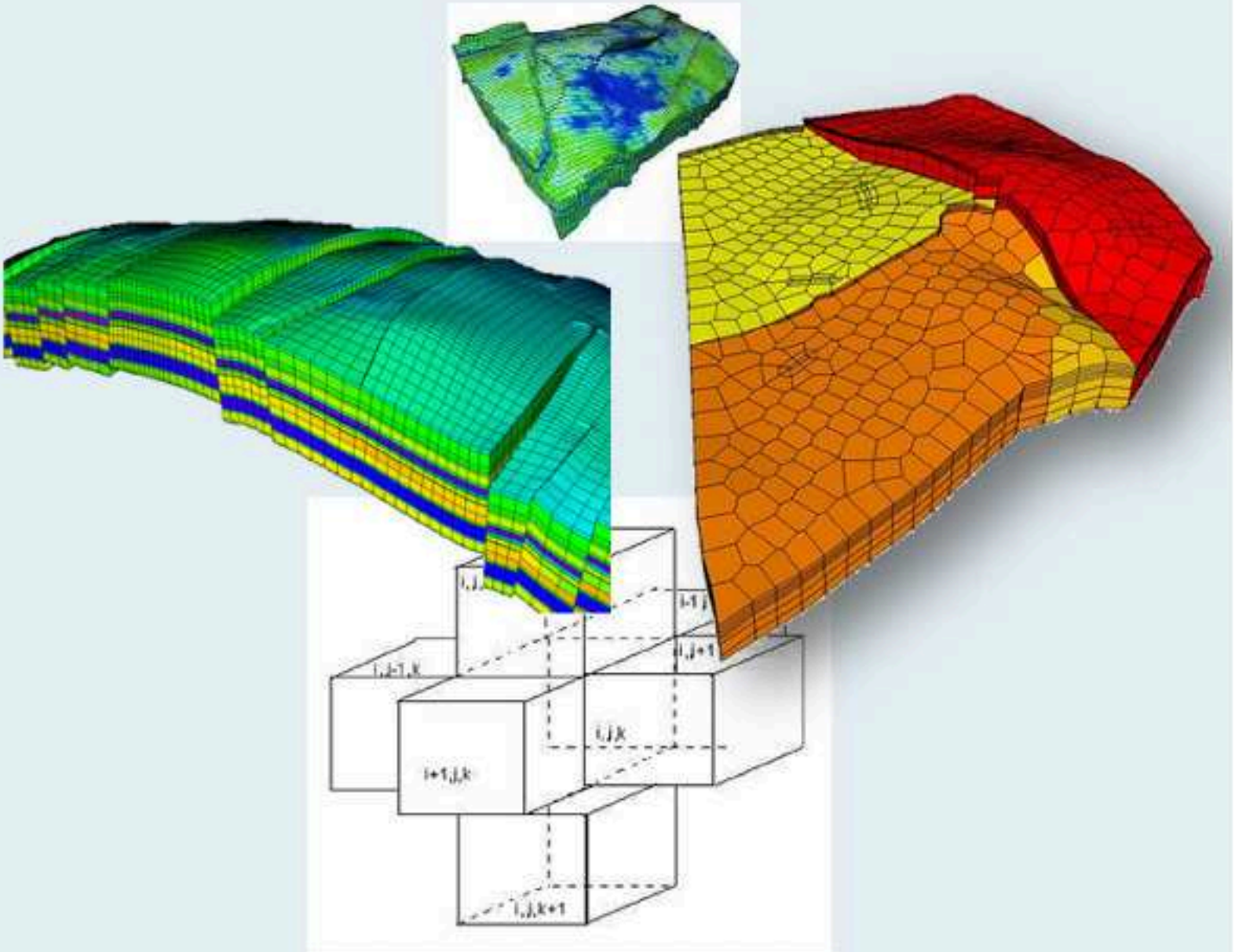
Introducción al *Método de Diferencias Finitas y su Implementación Computacional*



Carrillo Ledesma Antonio
González Rosas Karla Ivonne · Mendoza Bernal Omar

Introducción al Método de Diferencias Finitas y su Implementación Computacional

Antonio Carrillo Ledesma,
Karla Ivonne González Rosas y Omar Mendoza Bernal
Facultad de Ciencias, UNAM
http://academicos.fciencias.unam.mx/antoniocarrillo

Una copia de este trabajo se puede descargar de la página:
https://sites.google.com/ciencias.unam.mx/acl/en-desarrollo

Confinamiento 2020-2021, Versión 1.0α[1]

Índice

1 Introducción

Los sistemas continuos —sistemas físicos macroscópicos (véase [1])—, tales como los yacimientos petroleros, la atmósfera, los campos electromagnéticos, los océanos, el aparato circulatorio de los seres humanos, la corteza terrestre y muchos otros sistemas de interés en Ciencia y en Ingeniería, al modelarse contienen un gran número de grados de libertad[1].

Los modelos matemáticos de los sistemas continuos (véase [66] y [11]) son sistemas de ecuaciones diferenciales, las cuales son parciales —con valores iniciales y condiciones de frontera— para casi todos los sistemas de mayor interés en la Ciencia y la Ingeniería. Salvo por los problemas más sencillos, no es posible obtener por métodos analíticos las soluciones de tales ecuaciones, que son las que permiten predecir el comportamiento de los sistemas continuos y realizar las simulaciones requeridas.

La capacidad para formular los modelos matemáticos de sistemas continuos complicados y de gran diversidad, es sin duda una contribución fundamental para el avance de la Ciencia y sus aplicaciones, tal contribución quedaría incompleta y, debido a ello, sería poco fecunda, si no se hubiera desarrollado simultáneamente su complemento esencial: los métodos numéricos y la computación electrónica.

Sin embargo, la solución numérica y las simulaciones computacionales de problemas concomitantes en Ciencias e Ingenierías han llevado al límite nuestra actual capacidad de predicción, por la gran cantidad de grados de libertad que necesitan nuestros modelos para tratar de representar a la realidad.

Con el desarrollo de nuevas herramientas numéricas y computacionales, la diversidad y complejidad de problemas que pueden ser tratados de forma satisfactoria y eficiente es impresionante. Pero hay que destacar, que todavía hay una gama de problemas que hasta la fecha no es posible resolver satisfactoriamente o con la precisión deseada —como la predicción climática a largo plazo o simulación de recuperación mejorada en yacimientos petroleros, entre otros—.

1.1 Antecedentes

La solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales por los esquemas tradicionales —tipo Diferencias Finitas, Volumen Finito y Elemento Finito—

[1] El número de grados de libertad en un sistema físico se refiere al número mínimo de números reales que es necesario especificar para determinar completamente el estado físico.

reducen el problema a la generación y solución de un —cada vez más grande— sistema algebraico de ecuaciones (véase [4]). La factorización directa de sistemas de gran escala $O(10^6)$ con toda su eficacia, no es, en general una opción viable, y el uso de métodos iterativos básicos —tales como el método de gradiente conjugado o residual mínimo generalizado— resultan en una convergencia bastante lenta con respecto a otras formas de discretización como son los métodos de descomposición de dominio (véase [7] y [9]).

El desarrollo de métodos numéricos para sistemas algebraicos grandes, es central en el desarrollo de códigos eficientes para la solución de problemas en Ciencia e Ingeniería, actualmente cuando se necesita implementar una solución computacional, se dispone de bibliotecas optimizadas[2] para la solución de sistemas lineales que pueden correr en ambientes secuenciales y/o paralelos. Estas bibliotecas implementan métodos algebraicos robustos para muchos problemas prácticos, pero sus discretizaciones no pueden ser construidas por sólo técnicas algebraicas simples, tales como aproximaciones a la inversa o factorización incompleta.

En la actualidad, los sistemas computacionales paralelos son ubicuos. En ellos es posible encontrar más de una unidad de procesamiento, conocidas como Núcleo (Core). El número de Cores es creciente conforme avanza la tecnología, esto tiene una gran importancia en el desarrollo eficiente de algoritmos que resuelvan sistemas algebraicos en implementaciones paralelas. Actualmente la gran mayoría de los algoritmos desarrollados son algoritmos secuenciales y su implantación en equipos paralelos no es óptima, pero es una práctica común usar diversas técnicas de pseudoparalelización —a veces mediante la distribución de una gran matriz en la memoria de los múltiples Cores y otras mediante el uso de directivas de compilación—, pero la eficiencia resultante es pobre y no escalable a equipos masivamente paralelos por la gran cantidad de comunicación involucrada en la solución.

Para hacer eficiente la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, se introdujeron los métodos de descomposición de dominio que toman en cuenta la ecuación diferencial parcial y su discretización, permitiendo una alta eficiencia computacional en diversas arquitecturas paralelas (véase [7] y [9]). La idea básica detrás de los métodos de descomposición de dominio es que en lugar de resolver un enorme problema sobre un dominio, puede ser

[2]Como pueden ser las bibliotecas ATLAS —http://math-atlas.sourceforge.net— y HYPRE —https://computation.llnl.gov/projects/hypre-scalable-linear-solvers-multigrid-methods— entre muchas otras.

conveniente —o necesario— resolver múltiples problemas de tamaño menor sobre un solo subdominio un cierto número de veces. Mucho del trabajo en la descomposición de dominio se relaciona con la selección de subproblemas que aseguren que la razón de convergencia del nuevo método iterativo sea rápida. En otras palabras, los métodos de descomposición de dominio proveen precondicionadores a priori que puedan acelerarse por métodos en el espacio de Krylov (véase [23]).

1.2 Métodos de Descomposición de Dominio

La descomposición de dominio generalmente se refiere a la separación de una ecuación diferencial parcial o una aproximación de ella dentro de problemas acoplados sobre subdominios pequeños formando una partición del dominio original. Esta descomposición puede hacerse a nivel continuo, donde diferentes modelos físicos, pueden ser usados en diferentes regiones, o a nivel discreto, donde puede ser conveniente el empleo de diferentes métodos de aproximación en diferentes regiones, o en la solución del sistema algebraico asociado a la aproximación de la ecuación diferencial parcial —estos tres aspectos estan íntimamente interconectados en la práctica (véase [23])—.

Los método de descomposición de dominio —Domain Decomposition Methods (DDM)— se basan en la suposición de que dado un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, se puede particionar en E subdominios $\Omega_i, i = 1, 2, ..., E$; tales que $\Omega = \left(\bigcup_{i=1}^{E} \Omega_i \right)$, entre los cuales puede o no existir traslape (véase [4] y [23]). Entonces, el problema es reformulado en términos de cada subdominio —mediante el uso de algún método de discretización— obteniendo una familia de subproblemas de tamaño reducido independientes entre sí, y que estan acoplados a través de la solución en la interfase —que es desconocida— de los subdominios.

De esta manera, se puede clasificar de forma burda a los métodos de descomposición de dominio (véase [7]), como aquellos en que: existe traslape entre los subdominios y en los que no existe traslape. A la primera clase pertenece el método de Schwarz —en el cual el tamaño del traslape es importante en la convergencia del método— y a los de la segunda clase pertenecen los métodos del tipo subestructuración —en el cual los subdominios sólo tienen en común a los nodos de la interfase o frontera interior—.

Desde hace algún tiempo, la comunidad internacional[3] inicio el estudio intensivo de los métodos de descomposición de dominio, la atención se ha desplazado (véase [10]) de los métodos con traslape en el dominio (véase [54]) a los métodos sin traslape en el dominio (véase [47], [48], [49], [50] y [51]), debido a que estos últimos son más efectivos para una gran variedad de problemas de Ciencia e Ingeniería.

Los métodos de descomposición de dominio sin traslape son un paradigma natural usado por la comunidad de modeladores (véase [1]). Los sistemas físicos son descompuestos en dos o más subdominios contiguos basados en consideraciones fenomenológicas o computacionales. Esta descomposición se refleja en la Ingeniería de Software del código correspondiente, además, el uso de la programación orientada a objetos, permite dividir en niveles la semántica de los sistemas complejos, tratando así con las partes, más manejables que el todo, permitiendo una implementación, extensión y mantenimiento sencillo (véase [21]).

Tomando en cuenta que los métodos de descomposición de dominio sin traslape son fácilmente implementados para su uso en computadoras paralelas mediante técnicas de programación orientada a objetos —porqué el algoritmo del método es paralelo–, además, con los continuos avances en cómputo, en particular, en la computación en paralelo mediante equipos de cómputo de alto desempeño y/o Clusters parecen ser el mecanismo más efectivo para incrementar la capacidad y velocidad de resolución de varios tipos de problemas de interés en Ciencias e Ingenierías usando métodos de descomposición de dominio (véase [48], [49], [50], [52] y [53]).

La implementación de los métodos de descomposición de dominio permite utilizar de forma eficiente, las crecientes capacidades del cómputo en paralelo (véase [22] y [23]) —Grids[4] de decenas de Clusters, cada uno con cientos o miles de procesadores interconectados por red, con un creciente poder de

[3] Ello se refleja en las más de 19 conferencias internacionales de Métodos Descomposición de Dominio (véase [22]) y de las cuales se han publicado 14 libros que recopilan los trabajos más relevantes de cada conferencia. Además de varios mini simposios de descomposición de dominio en congresos mundiales como es el World Congress on Computational Mechanics o el Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering.

[4] Bajo el Macroproyecto: Tecnologías para la Universidad de la Información y la Computación de la UNAM, se interconectaron cuatro Cluster heterogéneos —dos en la Facultad de Ciencias, uno en el Instituto de Geofísica y otro en el Instituto de Matemáticas Aplicadas y Sistemas— con redes no dedicadas y en ellos se probo una versión de los códigos, en los cuales se vio que es factible el uso en Grids y si estos cuentan con una red dedicada —de alta velocidad— su eficiencia puede llegar a ser alta.

cómputo medible en Peta Flops—, así como el uso de una amplia memoria —ya sea distribuida y/o compartida del orden de Terabytes—, permitiendo atacar una gran variedad de problemas que sin estas técnicas es imposible hacer de manera flexible y eficiente. Pero hay que notar que existe una amplia gama de problemas que es necesario resolver, los cuales superan la capacidad de cómputo actual, ya sea por el tiempo requerido para su solución, por el consumo excesivo de memoria o ambos.

Así, los métodos de descomposición de dominio que introducen desde la formulación matemática del problema una separación natural de las tareas a realizar y simplifican considerablemente la transmisión de información entre los subdominios (véase [23]), en conjunción con la programación orientada a objetos y el cómputo en paralelo forman una amalgama poderosa. La cual permite construir aplicaciones que coadyuven en la solución una gran gama de problemas concomitantes en Ciencias e Ingenierías que requieren hacer uso de una gran cantidad de grados de libertad.

Por otro lado, la lista de los métodos de descomposición de dominio y el tipo de problemas que pueden ser atacados por estos, es grande y esta en constante evolución (véase [22] y [23]), ya que se trata de encontrar un equilibrio entre la complejidad del método —aunada a la propia complejidad del modelo—, la eficiencia en el consumo de los recursos computacionales y la precisión esperada en la solución encontrada por los diversos métodos y las arquitecturas paralelas en la que se implante.

1.3 Objetivos

El presente trabajo tiene por objetivo el hacer una introducción al Método de Diferencias Finitas (MDF) y su implementación computacional, este método es de carácter general que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales definidas en un dominio finito. Es de una gran sencillez conceptual y constituye un procedimiento muy adecuado para la resolución de una ecuación en una, dos o tres dimensiones.

El método consiste en una aproximación de las derivadas parciales por expresiones algebraicas con los valores de la variable dependiente en un número finito de puntos seleccionados en el dominio. Como resultado de la aproximación, la ecuación diferencial parcial que describe el problema es reemplazada por un número finito de ecuaciones algebraicas, en términos de los valores de la variable dependiente en los puntos seleccionados. El valor de los puntos seleccionados se convierten en las incógnitas. La solución del sistema

de ecuaciones algebraico permite obtener la solución aproximada en cada punto seleccionado de la malla.

Objetivos Generales Mostraremos la parte teórica del método de Diferencias Finitas y como implementar soluciones computacionales en una, dos y tres dimensiones para resolver ecuaciones diferenciales parciales — elípticas, parabólicas e hiperbólicas— con condiciones de frontera Dirichlet, Neumann o Robin.

Objetivos Particulares La implementación computacional básica del método de Diferencias Finitas fue hecha en los paquetes de cómputo OCTAVE (MatLab), SciLab y en los lenguajes de programación C++, Python, Java, Mono (C#), Fortran y C.

Además, el modelo computacional generado para la parelización de los métodos de descomposición de dominio —Método de Descomposición de Dominio de Subestructuración (DDM) y Métodos del Espacio de Vectores Derivados (DVS)—, esta contenido en un programa de cómputo bajo el paradigma de programación orientada a objetos, programado en el lenguaje C++ en su forma secuencial y en su forma paralela en C++ y la interfaz de paso de mensajes (MPI) bajo el esquema Maestro-Esclavo.

Para desarrollar estos códigos, se realizó una jerarquía de clases[5] para cada uno de los distintos componentes del sistema de descomposición de dominio en base a clases abstractas, las cuales reducen la complejidad del esquema DDM y DVS, permitiendo usarlo tanto en forma secuencial como paralela redefiniendo sólo algunos comportamientos.

Estos ejemplos y el presente texto se pueden descargar de la página WEB:

http://132.248.182.159/acl/MDF/

desde GitHub[6] (https://github.com/antoniocarrillo69/MDF) mediante:

[5] Hay que notar que, el paradigma de programación orientada a objetos sacrifica algo de eficiencia computacional por requerir mayor manejo de recursos computacionales al momento de la ejecución. Pero en contraste, permite mayor flexibilidad a la hora de adaptar los códigos a nuevas especificaciones. Adicionalmente, disminuye notoriamente el tiempo invertido en el mantenimiento y búsqueda de errores dentro del código. Esto tiene especial interés cuando se piensa en la cantidad de meses invertidos en la programación comparada con los segundos consumidos en la ejecución.

[6] GitHub es una plataforma de desarrollo colaborativo para alojar proyectos usando el sistema de control de versiones GIT.

git clone git://github.com/antoniocarrillo69/MDF.git

desde GitLab[7] (https://gitlab.com/antoniocarrillo69/MDF) mediante:

git clone https://gitlab.com/antoniocarrillo69/MDF.git

1.4 Infraestructura Computacional Usada

La programación, depuración y puesta a punto de los códigos fue hecha en el siguiente equipo:

- Notebook Intel dual Core a 1.7 GHtz con 2 GB de RAM en Linux/GNU Debian, haciendo uso del compilador C++ GNU y MPICH para el paso de mensajes.
- PC Intel Quad Core a 2.4 GHtz con 3 GB de RAM en Linux/GNU Debian, haciendo uso del compilador C++ GNU y MPICH para el paso de mensajes.

Las pruebas de rendimiento de los distintos programas se realizaron en equipos multiCore y Clusters a los que se tuvo acceso y que estan montados en la Universidad Nacional Autónoma de México, en las pruebas de análisis de rendimiento se usó el siguiente equipo:

- Cluster homogéneo Kanbalam de 1024 Cores AMD Opteron a 2.6 GHtz de 64 bits, cada 4 Cores con 8 GB de RAM interconectados con un switch de 10 Gbps ubicado en el Departamento de Supercómputo de la D.G.C.T.I.C de la UNAM.
- Cluster homogéneo Olintlali de 108 Cores emulando 216 hilos, Intel Xeon a 2.67 GHtz, 9 nodos con 6 Cores y 8 hilos de ejecución con 48 GB RAM interconectados con GIGE 10/100/1000 Gb/s, a cargo del Dr. Ismael Herrera Revilla del Departamento de Recursos Naturales del Instituto de Geofísica de la UNAM.
- Cluster homogéneo Pohualli de 104 Cores Intel Xeon a 2.33 GHtz de 64 bits, cada 8 Cores cuentan con 32 GB de RAM interconectados con un switch de 1 Gbps, a cargo del Dr. Víctor Cruz Atienza del Departamento de Sismología del Instituto de Geofísica de la UNAM.

[7] GitLab es una plataforma de desarrollo colaborativo para alojar proyectos usando el sistema de control de versiones GIT.

- Cluster homogéneo IO de 22 Cores Intel Xeon a 2.8 GHtz de 32 bits, cada 2 Cores con 1 GB de RAM interconectados con un switch de 100 Mbps, a cargo de la Dra. Alejandra Arciniega Ceballos del Departamento de Vulcanología del Instituto de Geofísica de la UNAM.
- PC de alto rendimiento Antipolis de 8 Cores Intel Xeon a 2.33 GHtz de 64 bits y 32 GB de RAM, a cargo del Dr. Víctor Cruz Atienza del Departamento de Sismología del Instituto de Geofísica de la UNAM.

1.5 Sobre los Ejemplos de este Trabajo

La documentación y los diferentes ejemplos que se presentan en este trabajo, se encuentran disponibles en la página Web: http://132.248.182.159/acl/MDF/, para que puedan ser copiados desde el navegador y ser usados en la terminal de línea de comandos. En aras de que el interesado pueda correr dichos ejemplos y afianzar sus conocimientos, además de que puedan ser usados en otros ámbitos distintos a los presentados aquí.

1.6 Agradecimientos

Este proyecto fue posible gracias al apoyo recibido por la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y al tiempo robado a nuestras actividades académicas, principalmente durante el período de confinamiento

Agradecimientos Este proyecto fue posible gracias al apoyo recibido por la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y al tiempo robado a nuestras actividades académicas, principalmente durante el período de confinamiento de los años 2020 y 2021. Agradecemos la revisión y aportaciones del Dr. Robert Yates (Alternativas en Computación, S.A de C.V), del Dr. Ismael Herrera Revilla (Instituto de Geofísica, UNAM) y del Dr. Martín Alberto Díaz Viera (Instituto Mexicano del Petróleo, IMP).

2 Sistemas Continuos y sus Modelos

Los fundamentos de la física macroscópica nos proporciona la 'teoría de los medios continuos'. En este capítulo, en base a ella se introduce una formulación clara, general y sencilla de los modelos matemáticos de los sistemas continuos. Esta formulación es tan sencilla y tan general, que los modelos básicos de sistemas tan complicados y diversos como la atmósfera, los océanos, los yacimientos petroleros, o los geotérmicos, se derivan por medio de la aplicación repetida de una sola ecuación diferencial: 'la ecuación diferencial de balance'.

Dicha formulación también es muy clara, pues en el modelo general no hay ninguna ambigüedad; en particular, todas las variables y parámetros que intervienen en él, estan definidos de manera unívoca. En realidad, este modelo general de los sistemas continuos constituye una realización extraordinaria de los paradigmas del pensamiento matemático. El descubrimiento del hecho de que los modelos matemáticos de los sistemas continuos, independientemente de su naturaleza y propiedades intrínsecas, pueden formularse por medio de balances, cuya idea básica no difiere mucho de los balances de la contabilidad financiera, fue el resultado de un largo proceso de perfeccionamiento en el que concurrieron una multitud de mentes brillantes.

2.1 Los Modelos

Un modelo de un sistema es un sustituto de cuyo comportamiento es posible derivar el correspondiente al sistema original. Los modelos matemáticos, en la actualidad, son los utilizados con mayor frecuencia y también los más versátiles. En las aplicaciones específicas estan constituidos por programas de cómputo cuya aplicación y adaptación a cambios de las propiedades de los sistemas es relativamente fácil. También, sus bases y las metodologías que utilizan son de gran generalidad, por lo que es posible construirlos para situaciones y sistemas muy diversos.

Los modelos matemáticos son entes en los que se integran los conocimientos científicos y tecnológicos, con los que se construyen programas de cómputo que se implementan con medios computacionales. En la actualidad, la simulación numérica permite estudiar sistemas complejos y fenómenos na-turales que sería muy costoso, peligroso o incluso imposible de estudiar por experimentación directa. En esta perspectiva la significación de los modelos matemáticos en ciencias e ingeniería es clara, porqué la modelación

matemática constituye el método más efectivo de predecir el comportamiento de los diversos sistemas de interés. En nuestro país, ellos son usados ampliamente en la industria petrolera, en las ciencias y la ingeniería del agua y en muchas otras.

2.1.1 Física Microscópica y Física Macroscópica

La materia, cuando se le observa en el ámbito ultramicroscópico, esta formada por moléculas y átomos. Estos a su vez, por partículas aún más pequeñas como los protones, neutrones y electrones. La predicción del comportamiento de estas partículas es el objeto de estudio de la mecánica cuántica y la física nuclear. Sin embargo, cuando deseamos predecir el comportamiento de sistemas tan grandes como la atmósfera o un yacimiento petrolero, los cuales estan formados por un número extraordinariamente grande de moléculas y átomos, su estudio resulta inaccesible con esos métodos y en cambio el enfoque macroscópico es apropiado.

Por eso en lo que sigue distinguiremos dos enfoques para el estudio de la materia y su movimiento. El primero —el de las moléculas, los átomos y las partículas elementales— es el enfoque microscópico y el segundo es el enfoque macroscópico. Al estudio de la materia con el enfoque macroscópico, se le llama física macroscópica y sus bases teóricas las proporciona la mecánica de los medios continuos.

Cuando se estudia la materia con este último enfoque, se considera que los cuerpos llenan el espacio que ocupan, es decir que no tienen huecos, que es la forma en que los vemos sin el auxilio de un microscopio. Por ejemplo, el agua llena todo el espacio del recipiente donde esta contenida. Este enfoque macroscópico esta presente en la física clásica. La ciencia ha avanzado y ahora sabemos que la materia esta llena de huecos, que nuestros sentidos no perciben y que la energía también esta cuantizada. A pesar de que estos dos enfoques para el análisis de los sistemas físicos, el microscópico y el macroscópico, parecen a primera vista conceptualmente contradictorios, ambos son compatibles, y complementarios, y es posible establecer la relación entre ellos utilizando a la mecánica estadística.

2.2 Cinemática de los Modelos de Sistemas Continuos

En la teoría de los sistemas continuos, los cuerpos llenan todo el espacio que ocupan. Y en cada punto del espacio físico hay una y solamente una partícula.

Así, definimos como sistema continuo a un conjunto de partículas. Aún más, dicho conjunto es un subconjunto del espacio Euclidiano tridimensional. Un cuerpo es un subconjunto de partículas que en cualquier instante dado ocupa un dominio, en el sentido matemático, del espacio físico; es decir, del espacio Euclidiano tridimensional. Denotaremos por $B(t)$ a la región ocupada por el cuerpo $\mathcal{B}$, en el tiempo t, donde t puede ser cualquier número real.

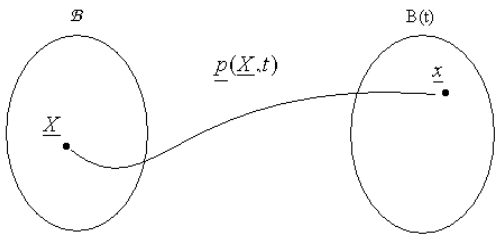


Figura 1: Representación del movimiento de partículas de un cuerpo $\mathcal{B}$, para un tiempo dado.

Frecuentemente, sin embargo, nuestro interés de estudio se limitará a un intervalo finito de tiempo. Dado un cuerpo $\mathcal{B}$, todo subdominio $\tilde{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}$, constituye a su vez otro cuerpo; en tal caso, se dice que $\tilde{\mathcal{B}} \subset \mathcal{B}$ es un subcuerpo de $\mathcal{B}$. De acuerdo con lo mencionado antes, una hipótesis básica de la teoría de los sistemas continuos es que en cualquier tiempo $t \in (-\infty, \infty)$ y en cada punto $x \in \mathcal{B}$ de la región ocupada por el cuerpo, hay una y sólo una partícula del cuerpo. Como en nuestra revisión se incluye no solamente la estatica (es decir, los cuerpos en reposo), sino también la dinámica (es decir, los cuerpos en movimiento), un primer problema de la cinemática de los sistemas continuos consiste en establecer un procedimiento para identificar a las partículas cuando estan en movimiento en el espacio físico.

Sea $\underline{X} \in \mathcal{B}$, una partícula y $p(\underline{X}, t)$ el vector de la posición que ocupa, en el espacio físico, dicha partícula en el instante t. Una forma, pero no la única, de identificar la partícula $\underline{X}$ es asociándole la posición que ocupa en un instante determinado. Tomaremos en particular el tiempo $t = 0$, en tal caso $\underline{p}(\underline{X}, 0) \equiv \underline{X}$.

A las coordenadas del vector $\underline{X} \equiv (x_1, x_2, x_3)$, se les llama las coordenadas materiales de la partícula. En este caso, las coordenadas materiales de una partícula son las coordenadas del punto del espacio físico que ocupaba la partícula en el tiempo inicial, $t = 0$. Desde luego, el tiempo inicial puede ser

cualquier otro, si así se desea. Sea $\mathcal{B}$ el dominio ocupado por un cuerpo en el tiempo inicial, entonces $\underline{X} \in \mathcal{B}$ si y solamente si la partícula $\underline{X}$ es del cuerpo. Es decir, $\mathcal{B}$ caracteriza al cuerpo. Sin embargo, debido al movimiento, la región ocupada por el mismo cambia con el tiempo y será denotada por $\mathcal{B}(t)$.

Formalmente, para cualquier $t \in (-\infty, \infty)$, $\mathcal{B}(t)$ se define por

$$\mathcal{B}(t) \equiv \left\{ \underline{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \exists \underline{X} \in \mathcal{B} \quad tal \quad que \quad \underline{x} = \underline{p}(\underline{X}, t) \right\} \tag{2.1}$$

el vector posición $\underline{p}(\underline{X}, t)$ es función del vector tridimensional $\underline{X}$ y del tiempo. Si fijamos el tiempo t, $\underline{p}(\underline{X}, t)$ define una transformación del espacio Euclidiano $\mathbb{R}^3$ en sí mismo y la Ec. (2.1) es equivalente a $\mathcal{B}(t) = \underline{p}(\mathcal{B}, t)$. Una notación utilizada para representar esta familia de funciones es $\underline{p}(\cdot, t)$. De acuerdo a la hipótesis de los sistemas continuos: En cualquier tiempo $t \in (-\infty, \infty)$ y en cada punto $\underline{x} \in \mathcal{B}$ de la región ocupada por el cuerpo hay una y sólo una partícula del cuerpo $\mathcal{B}$ para cada t fijo. Es decir, $\underline{p}(\cdot, t)$ es una función biunívoca, por lo que existe la función inversa $\underline{p}^{-1}(\cdot, t)$.

Si se fija la partícula $\underline{X}$ en la función $\underline{p}(\underline{X}, t)$ y se varía el tiempo t, se obtiene su trayectoria. Esto permite obtener la velocidad de cualquier partícula, la cual es un concepto central en la descripción del movimiento. Ella se define como la derivada con respecto al tiempo de la posición cuando la partícula se mantiene fija. Es decir, es la derivada parcial con respecto al tiempo de la función de posición $\underline{p}(\underline{X}, t)$. Por lo mismo, la velocidad como función de las coordenadas materiales de las partículas, esta dada por

$$\underline{\mathrm{V}}(\underline{X}, t) \equiv \frac{\partial \underline{p}}{\partial t}(\underline{X}, t). \tag{2.2}$$

2.2.1 Propiedades Intensivas y sus Representaciones

En lo que sigue consideraremos funciones definidas para cada tiempo, en cada una de las partículas de un sistema continuo. A tales funciones se les llama 'propiedades intensivas'. Las propiedades intensivas pueden ser funciones escalares o funciones vectoriales. Por ejemplo, la velocidad, definida por la Ec. (2.2), es una función vectorial que depende de la partícula $\underline{X}$ y del tiempo t.

Una propiedad intensiva con valores vectoriales es equivalente a tres escalares, correspondientes a cada una de sus tres componentes. Hay dos formas de representar a las propiedades intensivas: la representación Euleriana y la representación Lagrangiana. Los nombres son en honor a los matemáticos

Leonard Euler (1707-1783) y Joseph Louis Lagrange (1736-1813), respectivamente. Frecuentemente, el punto de vista Lagrangiano es utilizado en el estudio de los sólidos, mientras que el Euleriano se usa más en el estudio de los fluidos.

Considere una propiedad intensiva escalar, la cual en el tiempo t toma el valor $\phi(\underline{X}, t)$ en la partícula $\underline{X}$. Entonces, de esta manera se define una función $\phi : \mathcal{B} \to \mathbb{R}^1$, para cada $t \in (-\infty, \infty)$ a la que se denomina representación Lagrangiana de la propiedad intensiva considerada. Ahora, sea $\psi(\underline{x}, t)$ el valor que toma esa propiedad en la partícula que ocupa la posición $\underline{x}$, en el tiempo t. En este caso, para cada $t \in (-\infty, \infty)$ se define una función $\psi : \mathcal{B}(t) \to \mathbb{R}^1$ a la cual se denomina representación Euleriana de la función considerada. Estas dos representaciones de una misma propiedad estan relacionadas por la siguiente identidad

$$\phi(\underline{X}, t) \equiv \psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t). \tag{2.3}$$

Nótese que, aunque ambas representaciones satisfacen la Ec. (2.3), las funciones $\phi(\underline{X}, t)$ y $\psi(\underline{x}, t)$ no son idénticas. Sus argumentos $\underline{X}$ y $\underline{x}$ son vectores tridimensionales (es decir, puntos de $\mathbb{R}^3$); sin embargo, si tomamos $\underline{X} = \underline{x}$, en general

$$\phi(\underline{X}, t) \neq \psi(\underline{X}, t). \tag{2.4}$$

La expresión de la velocidad de una partícula dada por la Ec. (2.2), define a su representación Lagrangiana, por lo que utilizando la Ec. (2.3) es claro que

$$\frac{\partial p}{\partial t}(\underline{X}, t) = \underline{\mathrm{V}}(\underline{X}, t) \equiv \underline{\mathrm{v}}(\underline{p}(\underline{X}, t), t) \tag{2.5}$$

donde $\underline{\mathrm{v}}(\underline{x}, t)$ es la representación Euleriana de la velocidad. Por lo mismo

$$\underline{\mathrm{v}}(\underline{x}, t) \equiv \underline{\mathrm{V}}(\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), t). \tag{2.6}$$

Esta ecuación tiene la interpretación de que la velocidad en el punto $\underline{x}$ del espacio físico, es igual a la velocidad de la partícula que pasa por dicho punto en el instante t. La Ec. (2.6) es un caso particular de la relación

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \phi(\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), t)$$

de validez general, la cual es otra forma de expresar la relación de la Ec. (2.3) que existe entre las dos representaciones de una misma propiedad intensiva.

La derivada parcial con respecto al tiempo de la representación Lagrangiana $\phi(\underline{X},t)$ de una propiedad intensiva, de acuerdo a la definición de la derivada parcial de una función, es la tasa de cambio con respecto al tiempo que ocurre en una partícula fija. Es decir, si nos montamos en una partícula y medimos a la propiedad intensiva y luego los valores así obtenidos los derivamos con respecto al tiempo, el resultado final es $\frac{\partial\phi(\underline{X},t)}{\partial t}$. En cambio, si $\psi(\underline{x},t)$ es la representación Euleriana de esa misma propiedad, entonces $\frac{\partial\psi(\underline{x},t)}{\partial t}$ es simplemente la tasa de cambio con respecto al tiempo que ocurre en un punto fijo en el espacio. Tiene interés evaluar la tasa de cambio con respecto al tiempo que ocurre en una partícula fija, cuando se usa la representación Euleriana. Derivando con respecto al tiempo a la identidad de la Ec. (2.3) y la regla de la cadena, se obtiene

$$\frac{\partial\phi(\underline{X},t)}{\partial t}=\frac{\partial\psi}{\partial t}(\underline{p}(\underline{X},t),t)+\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\psi}{\partial x_i}(\underline{p}(\underline{X},t),t)\frac{\partial p_i}{\partial t}(\underline{X},t). \tag{2.7}$$

Se acostumbra definir el símbolo $\frac{D\psi}{Dt}$ por

$$\frac{D\psi}{Dt}=\frac{\partial\psi}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}v_i\frac{\partial\psi}{\partial x_i} \tag{2.8}$$

o, más brevemente,

$$\frac{D\psi}{Dt}=\frac{\partial\psi}{\partial t}+\underline{\mathrm{v}}\cdot\nabla\psi \tag{2.9}$$

utilizando esta notación, se puede escribir

$$\frac{\partial\phi(\underline{X},t)}{\partial t}=\frac{D\psi}{Dt}(\underline{p}(\underline{X},t)\equiv\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}+\underline{\mathrm{v}}\cdot\nabla\psi\right)(\underline{p}(\underline{X},t),t). \tag{2.10}$$

Por ejemplo, la aceleración de una partícula se define como la derivada de la velocidad cuando se mantiene a la partícula fija. Aplicando la Ec. (2.9) se tiene

$$\frac{D\underline{\mathrm{v}}}{Dt}=\frac{\partial\underline{\mathrm{v}}}{\partial t}+\underline{\mathrm{v}}\cdot\nabla\underline{\mathrm{v}} \tag{2.11}$$

una expresión más transparente se obtiene aplicando la Ec. (2.9) a cada una de las componentes de la velocidad. Así, se obtiene

$$\frac{D\mathrm{v}_i}{Dt}=\frac{\partial\mathrm{v}_i}{\partial t}+\underline{\mathrm{v}}\cdot\nabla\mathrm{v}_i. \tag{2.12}$$

Desde luego, la aceleración, en representación Lagrangiana es simplemente

$$\frac{\partial}{\partial t}\underline{\mathrm{V}}(\underline{X},t) = \frac{\partial^2}{\partial t^2}\underline{p}(\underline{X},t). \tag{2.13}$$

2.2.2 Propiedades Extensivas

En la sección anterior se consideraron funciones definidas en las partículas de un cuerpo, más precisamente, funciones que hacen corresponder a cada partícula y cada tiempo un número real, o un vector del espacio Euclidiano tridimensional $\mathbb{R}^3$. En esta, en cambio, empezaremos por considerar funciones que a cada cuerpo $\mathcal{B}$ de un sistema continuo, y a cada tiempo t le asocia un número real o un vector de $\mathbb{R}^3$. A una función de este tipo $\mathbb{E}(\mathcal{B},t)$ se le llama 'propiedad extensiva' cuando esta dada por una integral

$$\mathbb{E}(\mathcal{B},t) \equiv \int_{\mathcal{B}(t)} \psi(\underline{x},t)d\underline{\mathrm{x}}. \tag{2.14}$$

Observe que, en tal caso, el integrando define una función $\psi(\underline{x},t)$ y por lo mismo, una propiedad intensiva. En particular, la función $\psi(\underline{x},t)$ es la representación Euleriana de esa propiedad intensiva. Además, la Ec. (2.14) establece una correspondencia biunívoca entre las propiedades extensivas y las intensivas, porqué dada la representación Euleriana $\psi(\underline{x},t)$ de cualquier propiedad intensiva, su integral sobre el dominio ocupado por cualquier cuerpo, define una propiedad extensiva. Finalmente, la notación empleada en la Ec. (2.14) es muy explicita, pues ahí se ha escrito $\mathbb{E}(\mathcal{B},t)$ para enfatizar que el valor de la propiedad extensiva corresponde al cuerpo $\mathcal{B}$. Sin embargo, en lo que sucesivo, se simplificara la notación omitiendo el símbolo $\mathcal{B}$ es decir, se escribirá $\mathbb{E}(t)$ en vez de $\mathbb{E}(\mathcal{B},t)$.

Hay diferentes formas de definir a las propiedades intensivas. Como aquí lo hemos hecho, es por unidad de volumen. Sin embargo, es frecuente que se le defina por unidad de masa véase [11]. Es fácil ver que la propiedad intensiva por unidad de volumen es igual a la propiedad intensiva por unidad de masa multiplicada por la densidad de masa (es decir, masa por unidad de volumen), por lo que es fácil pasar de un concepto al otro, utilizando la densidad de masa.

Sin embargo, una ventaja de utilizar a las propiedades intensivas por unidad de volumen, en lugar de las propiedades intensivas por unidad de masa, es que la correspondencia entre las propiedades extensivas y las intensivas es más directa: dada una propiedad extensiva, la propiedad intensiva

que le corresponde es la función que aparece como integrando, cuando aquélla se expresa como una integral de volumen. Además, del cálculo se sabe que

$$\psi(\underline{x},t) \equiv \lim_{Vol\to 0} \frac{\mathbb{E}(t)}{Vol} = \lim_{Vol\to 0} \frac{\int_{\mathcal{B}(t)} \psi(\underline{\xi},t) d\underline{\xi}}{Vol}. \tag{2.15}$$

La Ec. (2.15) proporciona un procedimiento efectivo para determinar las propiedades extensivas experimentalmente: se mide la propiedad extensiva en un volumen pequeño del sistema continuo de que se trate, se le divide entre le volumen y el cociente que se obtiene es una buena aproximación de la propiedad intensiva.

El uso que haremos del concepto de propiedad extensiva es, desde luego, lógicamente consistente. En particular, cualquier propiedad que satisface las condiciones de la definición de propiedad extensiva establecidas antes es, por ese hecho, una propiedad extensiva. Sin embargo, no todas las propiedades extensivas que se pueden obtener de esta manera son de interés en la mecánica de los medios continuos. Una razón básica por la que ellas son importantes es porqué el modelo general de los sistemas continuos se formula en términos de ecuaciones de balance de propiedades extensivas, como se verá más adelante.

2.2.3 Balance de Propiedades Extensivas e Intensivas

Los modelos matemáticos de los sistemas continuos estan constituidos por balances de propiedades extensivas. Por ejemplo, los modelos de transporte de solutos (los contaminantes transportados por corrientes superficiales o subterráneas, son un caso particular de estos procesos de transporte) se construyen haciendo el balance de la masa de soluto que hay en cualquier dominio del espacio físico. Aquí, el término balance se usa, esencialmente, en un sentido contable. En la contabilidad que se realiza para fines financieros o fiscales, la diferencia de las entradas menos las salidas nos da el aumento, o cambio, de capital. En forma similar, en la mecánica de los medios continuos se realiza, en cada cuerpo del sistema continuo, un balance de las propiedades extensivas en que se basa el modelo.

Ecuación de Balance Global Para realizar tales balances es necesario, en primer lugar, identificar las causas por las que las propiedades extensivas pueden cambiar. Tomemos como ejemplo de propiedad extensiva a las existencias de maíz que hay en el país. La primera pregunta es: ¿qué causas

pueden motivar su variación, o cambio, de esas existencias?. Un análisis sencillo nos muestra que dicha variación puede ser debida a que se produzca o se consuma. También a que se importe o se exporte por los límites del país (fronteras o litorales). Y con esto se agotan las causas posibles; es decir, esta lista es exhaustiva. Producción y consumo son términos similares, pero sus efectos tienen signos opuestos, que fácilmente se engloban en uno solo de esos conceptos. De hecho, si convenimos en que la producción puede ser negativa, entonces el consumo es una producción negativa.

Una vez adoptada esta convención, ya no es necesario ocuparnos separadamente del consumo. En forma similar, la exportación es una importación negativa. Entonces, el incremento en las existencias $\Delta\mathbb{E}$ en un período Δt queda dado por la ecuación

$$\Delta\mathbb{E} = \mathbb{P} + \mathbb{I} \tag{2.16}$$

donde a la producción y a la importación, ambas con signo, se les ha representado por $\mathbb{P}$ y $\mathbb{I}$ respectivamente.

Similarmente, en la mecánica de los medios continuos, la lista exhaustiva de las causas por las que una propiedad extensiva de cualquier cuerpo puede cambiar, contiene solamente dos motivos:

i) Por producción en el interior del cuerpo; y

ii) Por importación (es decir, transporte) a través de la frontera.

Esto conduce a la siguiente ecuación de "balance global", de gran generalidad, para las propiedades extensivas

$$\frac{d\mathbb{E}}{dt}(t) = \int_{\mathcal{B}(t)} g(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\partial\mathcal{B}(t)} q(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} g_\Sigma(\underline{x},t)d\underline{x}. \tag{2.17}$$

Donde $g(\underline{x},t)$ es la generación en el interior del cuerpo, con signo, de la propiedad extensiva correspondiente, por unidad de volumen, por unidad de tiempo. Además, en la Ec. (2.17) se ha tomado en cuenta la posibilidad de que haya producción concentrada en la superficie $\Sigma(t)$, la cual esta dada en esa ecuación por la última integral, donde $g_\Sigma(\underline{x},t)$ es la producción por unidad de área. Por otra parte $q(\underline{x},t)$ es lo que se importa o transporta hacia el interior del cuerpo a través de la frontera del cuerpo $\partial\mathcal{B}(t)$, en otras palabras, es el flujo de la propiedad extensiva a través de la frontera del cuerpo, por unidad de área, por unidad de tiempo. Puede demostrarse, con

base en hipótesis válidas en condiciones muy generales, que para cada tiempo t existe un campo vectorial $\tau(\underline{x},t)$ tal que

$$q(\underline{x},t) \equiv \tau(\underline{x},t)\cdot \underline{n}(\underline{x},t) \tag{2.18}$$

donde $\underline{n}(\underline{x},t)$ es normal exterior a $\partial\mathcal{B}(t)$. En vista de esta relación, la Ec. (2.17) de balance se puede escribir como

$$\frac{d\mathbb{E}}{dt}(t) = \int_{\mathcal{B}(t)} g(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\partial\mathcal{B}(t)} \tau(\underline{x},t)\cdot\underline{n}(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}(\underline{x},t)d\underline{x}. \tag{2.19}$$

La relación (2.19) se le conoce con el nombre de "ecuación general de balance global" y es la ecuación básica de los balances de los sistemas continuos. A la función $g(\underline{x},t)$ se le denomina el generación interna y al campo vectorial $\tau(\underline{x},t)$ el campo de flujo.

Condiciones de Balance Local Los modelos de los sistemas continuos estan constituidos por las ecuaciones de balance correspondientes a una colección de propiedades extensivas. Así, a cada sistema continuo le corresponde una familia de propiedades extensivas, tal que, el modelo matemático del sistema esta constituido por las condiciones de balance de cada una de las propiedades extensivas de dicha familia.

Sin embargo, las propiedades extensivas mismas no se utilizan directamente en la formulación del modelo, en su lugar se usan las propiedades intensivas asociadas a cada una de ellas. Esto es posible porqué las ecuaciones de balance global son equivalentes a las llamadas condiciones de balance local, las cuales se expresan en términos de las propiedades intensivas correspondientes. Las condiciones de balance local son de dos clases: 'las ecuaciones diferenciales de balance local' y 'las condiciones de salto'.

Las primeras son ecuaciones diferenciales parciales, que se deben satisfacer en cada punto del espacio ocupado por el sistema continuo, y las segundas son ecuaciones algebraicas que las discontinuidades deben satisfacer donde ocurren; es decir, en cada punto de Σ. Cabe mencionar que las ecuaciones diferenciales de balance local son de uso mucho más amplio que las condiciones de salto, pues estas últimas solamente se aplican cuando y donde hay discontinuidades, mientras que las primeras en todo punto del espacio ocupado por el sistema continuo.

Una vez establecidas las ecuaciones diferenciales y de salto del balance local, e incorporada la información científica y tecnológica necesaria para

completar el modelo (la cual por cierto se introduce a través de las llamadas 'ecuaciones constitutivas'), el problema matemático de desarrollar el modelo y derivar sus predicciones se transforma en uno correspondiente a la teoría de la ecuaciones diferenciales, generalmente parciales, y sus métodos numéricos.

Las Ecuaciones de Balance Local En lo que sigue se supone que las propiedades intensivas pueden tener discontinuidades, de salto exclusivamente, a través de la superficie $\Sigma(t)$. Se entiende por 'discontinuidad de salto', una en que el límite por ambos lados de $\Sigma(t)$ existe, pero son diferentes.

Se utilizará en lo que sigue los resultados matemáticos que se dan a continuación, ver [66].

Teorema 1 *Para cada $t > 0$, sea $\mathcal{B}(t) \subset \mathbb{R}^3$ el dominio ocupado por un cuerpo. Suponga que la 'propiedad intensiva' $\psi(\underline{x}, t)$ es de clase C^1, excepto a través de la superficie $\Sigma(t)$. Además, sean las funciones $\underline{v}(\underline{x}, t)$ y $\underline{v}_\Sigma(\underline{x}, t)$ esta última definida para $\underline{x} \in \Sigma(t)$ solamente, las velocidades de las partículas y la de $\Sigma(t)$, respectivamente. Entonces*

$$\frac{d}{dt}\int_{\mathcal{B}(t)} \psi d\underline{x} \equiv \int_{\mathcal{B}(t)} \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) \right\} d\underline{x} + \int_{\Sigma} \left[(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)\, \psi \right] \cdot \underline{n} d\underline{x}. \tag{2.20}$$

Teorema 2 *Considere un sistema continuo, entonces, la 'ecuación de balance global' (2.19) se satisface para todo cuerpo del sistema continuo si y solamente si se cumplen las condiciones siguientes:*

i) La ecuación diferencial

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \underline{\tau} + g \tag{2.21}$$

vale en todo punto $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$, de la región ocupada por el sistema.

ii) La ecuación

$$\left[\psi \left(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma \right) - \underline{\tau} \right] \cdot \underline{n} = g_\Sigma \tag{2.22}$$

vale en todo punto $\underline{x} \in \Sigma$.

A las ecuaciones (2.21) y (2.22), se les llama 'ecuación diferencial de balance local' y 'condición de salto', respectivamente.

Desde luego, el caso más general que se estudiará se refiere a situaciones dinámicas; es decir, aquéllas en que las propiedades intensivas cambian con el tiempo. Sin embargo, los estados estacionarios de los sistemas continuos

son de sumo interés. Por estado estacionario se entiende uno en que las propiedades intensivas son independientes del tiempo. En los estados estacionarios, además, las superficies de discontinuidad $\Sigma(t)$ se mantienen fijas (no se mueven). En este caso $\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$ y $\underline{v}_\Sigma = 0$. Por lo mismo, para los estados estacionarios, la ecuación de balance local y la condición de salto se reducen a

$$\nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \underline{\tau} + g \tag{2.23}$$

que vale en todo punto $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$ y

$$[\psi \underline{v} - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} = g_\Sigma \tag{2.24}$$

que se satisface en todo punto de la discontinuidad $\Sigma(t)$ respectivamente.

2.3 Ejemplos de Modelos

Una de las aplicaciones más sencillas de las condiciones de balance local es para formular restricciones en el movimiento. Aquí ilustramos este tipo de aplicaciones formulando condiciones que se deben cumplir localmente cuando un fluido es incompresible. La afirmación de que un fluido es incompresible significa que todo cuerpo conserva el volumen de fluido en su movimiento. Entonces, se consideraran dos casos: el de un 'fluido libre' y el de un 'fluido en un medio poroso'. En el primer caso, el fluido llena completamente el espacio físico que ocupa el cuerpo, por lo que el volumen del fluido es igual al volumen del dominio que ocupa el cuerpo, así

$$V_f(t) = \int_{\mathcal{B}(t)} d\underline{x} \tag{2.25}$$

aquí, $V_f(t)$ es el volumen del fluido y $\mathcal{B}(t)$ es el dominio del espacio físico (es decir, de $\mathbb{R}^3$) ocupado por el cuerpo. Observe que una forma más explicita de esta ecuación es

$$V_f(t) = \int_{\mathcal{B}(t)} 1 d\underline{x} \tag{2.26}$$

porqué en la integral que aparece en la Ec. (2.25) el integrando es la función idénticamente 1. Comparando esta ecuación con la Ec. (2.14), vemos que el volumen del fluido es una propiedad extensiva y que la propiedad intensiva que le corresponde es $\psi = 1$.

Además, la hipótesis de incompresibilidad implica

$$\frac{dV_f}{dt}(t) = 0 \tag{2.27}$$

esta es el balance global de la Ec. (2.19), con $g = g_\Sigma = 0$ y $\tau = 0$, el cual a su vez es equivalente a las Ecs. (2.21) y (2.22). Tomando en cuenta además que $\psi = 1$, la Ec. (2.21) se reduce a

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0. \tag{2.28}$$

Esta es la bien conocida condición de incompresibilidad para un fluido libre, además, aplicando la Ec. (2.22) donde haya discontinuidades, se obtiene $[\underline{v}] \cdot \underline{n} = 0$. Esto implica que si un fluido libre es incompresible, la velocidad de sus partículas es necesariamente continua.

El caso en que el fluido se encuentra en un 'medio poroso', es bastante diferente. Un medio poroso es un material sólido que tiene huecos distribuidos en toda su extensión, cuando los poros estan llenos de un fluido, se dice que el medio poroso esta 'saturado'. Esta situación es la de mayor interés en la práctica y es también la más estudiada. En muchos de los casos que ocurren en las aplicaciones el fluido es agua o petróleo. A la fracción del volumen del sistema, constituido por la 'matriz sólida' y los huecos, se le llama 'porosidad' y se le representara por ϕ, así

$$\phi(x,t) = \lim_{V \to 0} \frac{\text{Volumen de huecos}}{\text{Volumen total}} \tag{2.29}$$

aquí hemos escrito $\phi(x,t)$ para enfatizar que la porosidad generalmente es función tanto de la posición como del tiempo. Las variaciones con la posición pueden ser debidas, por ejemplo, a heterogeneidad del medio y los cambios con el tiempo a su elasticidad; es decir, los cambios de presión del fluido originan esfuerzos en los poros que los dilatan o los encogen.

Cuando el medio esta saturado, el volumen del fluido V_f es igual al volumen de los huecos del dominio del espacio físico que ocupa, así

$$V_f(t) = \int_{\mathcal{B}(t)} \phi(x,t) d\underline{x}. \tag{2.30}$$

En vista de esta ecuación, la propiedad intensiva asociada al volumen de fluido es la porosidad $\phi(x,t)$ por lo que la condición de incomprensibilidad del fluido contenido en un medio poroso, esta dada por la ecuación diferencial

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\phi) = 0. \tag{2.31}$$

Que la divergencia de la velocidad sea igual a cero en la Ec. (2.28) como condición para que un fluido en su movimiento libre conserve su volumen, es ampliamente conocida. Sin embargo, este no es el caso de la Ec. (2.31), como condición para la conservación del volumen de los cuerpos de fluido contenidos en un medio poroso. Finalmente, debe observarse que cualquier fluido incompresible satisface la Ec. (2.28) cuando se mueve en el espacio libre y la Ec. (2.31) cuando se mueve en un medio poroso.

Cuando un fluido efectúa un movimiento en el que conserva su volumen, al movimiento se le llama 'isocorico'. Es oportuno mencionar que si bien es cierto que cuando un fluido tiene la propiedad de ser incompresible, todos sus movimientos son isocoricos, lo inverso no es cierto: un fluido compresible en ocasiones puede efectuar movimientos isocoricos.

Por otra parte, cuando un fluido conserva su volumen en su movimiento satisface las condiciones de salto de Ec. (2.22), las cuales para este caso son

$$[\phi(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)] \cdot \underline{n} = 0. \tag{2.32}$$

En aplicaciones a geohidrología y a ingeniería petrolera, las discontinuidades de la porosidad estan asociadas a cambios en los estratos geológicos y por esta razón estan fijas en el espacio; así, $\underline{v}_\Sigma = 0$ y la Ec. (2.32) se reduce a

$$[\phi \underline{v}] \cdot \underline{n} = 0 \tag{2.33}$$

o, de otra manera

$$\phi_+ v_{n_+} = \phi_- v_{n_-}. \tag{2.34}$$

Aquí, la componente normal de la velocidad es $v_n \equiv \underline{v} \cdot \underline{n}$ y los subíndices más y menos se utilizan para denotar los límites por los lado más y menos de Σ, respectivamente. Al producto de la porosidad por la velocidad se le conoce con el nombre de velocidad de Darcy $\underline{U}$, es decir

$$\underline{U} = \phi \underline{v} \tag{2.35}$$

utilizándola, las Ecs. (2.33) y (2.34) obtenemos

$$[\underline{U}] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{y} \quad \underline{U}_{n_+} = \underline{U}_{n_-} \tag{2.36}$$

es decir, 1.

La Ec. (2.34) es ampliamente utilizada en el estudio del agua subterránea (geohidrología). Ahí, es frecuente que la porosidad ϕ sea discontinua en la

superficie de contacto entre dos estratos geológicos diferentes, pues generalmente los valores que toma esta propiedad dependen de cada estrato. En tal caso, $\phi_+ \neq \phi_-$ por lo que $v_{n_+} \neq v_{n_-}$ necesariamente.

Para más detalles de la forma y del desarrollo de algunos modelos usados en ciencias de la tierra, véase [66], [11], [65] y [63].

3 Ecuaciones Diferenciales Parciales

Cada una de las ecuaciones de balance da lugar a una ecuación diferencial parcial u ordinaria (en el caso en que el modelo depende de una sola variable independiente), la cual se complementa con las condiciones de salto, en el caso de los modelos discontinuos. Por lo mismo, los modelos de los sistemas continuos estan constituidos por sistemas de ecuaciones diferenciales cuyo número es igual al número de propiedades intensivas que intervienen en la formulación del modelo básico.

Los sistemas de ecuaciones diferenciales se clasifican en elípticas, hiperbólicas y parabólicas. Es necesario aclarar que esta clasificación no es exhaustiva; es decir, existen sistemas de ecuaciones diferenciales que no pertenecen a ninguna de estas categorías. Sin embargo, casi todos los modelos de sistemas continuos, en particular los que han recibido mayor atención hasta ahora, si estan incluidos en alguna de estas categorías.

3.1 Clasificación

Es importante clasificar a las ecuaciones diferenciales parciales y a los sistemas de tales ecuaciones, porqué muchas de sus propiedades son comunes a cada una de sus clases. Así, su clasificación es un instrumento para alcanzar el objetivo de unidad conceptual. La forma más general de abordar la clasificación de tales ecuaciones, es estudiando la clasificación de sistemas de ecuaciones. Sin embargo, aquí solamente abordaremos el caso de una ecuación diferencial de segundo orden, pero utilizando un método de análisis que es adecuado para extenderse a sistemas de ecuaciones.

La forma general de un operador diferencial cuasi-lineal de segundo orden definido en $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ es

$$\mathcal{L}u \equiv a(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = F(x,y,u,u_x,u_y) \qquad (3.1)$$

para una función u de variables independientes x e y. Nos restringiremos al caso en que a, b y c son funciones sólo de x e y y no funciones de u.

Para la clasificación de las ecuaciones de segundo orden consideraremos una simplificación de la ecuación anterior en donde $F(x,y,u,u_x,u_y) = 0$ y los coeficientes a, b y c son funciones constantes, es decir

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \qquad (3.2)$$

en la cual, examinaremos los diferentes tipos de solución que se pueden obtener para diferentes elecciones de a, b y c. Entonces iniciando con una solución de la forma

$$u(x, y) = f(mx + y) \tag{3.3}$$

para una función f de clase C^2 y para una constante m, que deben ser determinadas según los requerimientos de la Ec. (3.2). Usando un apostrofe para denotar la derivada de f con respecto de su argumento, las derivadas parciales requeridas de segundo orden de la Ec. (3.2) son

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = m^2 f'', \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = m f'', \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f'' \tag{3.4}$$

sustituyendo la ecuación anterior en la Ec. (3.2) obtenemos

$$\left(am^2 + bm + c\right) f'' = 0 \tag{3.5}$$

de la cual podemos concluir que $f'' = 0$ ó $am^2 + bm + c = 0$ ó ambas. En el caso de que $f'' = 0$ obtenemos la solución $f = f_0 + mx + y$, la cual es una función lineal de x e y y es expresada en términos de dos constantes arbitrarias, f_0 y m. En el otro caso obtenemos

$$am^2 + bm + c = 0 \tag{3.6}$$

resolviendo esta ecuación cuadrática para m obtenemos las dos soluciones

$$m_1 = \frac{\left(-b + \sqrt[2]{b^2 - 4ac}\right)}{2a}, \quad m_2 = \frac{\left(-b - \sqrt[2]{b^2 - 4ac}\right)}{2a} \tag{3.7}$$

de donde es evidente la importancia de los coeficientes de la Ec. (3.2), ya que el signo del discriminante $(b^2 - 4ac)$ es crucial para determinar el número y tipo de soluciones de la Ec. (3.6). Así, tenemos tres casos a considerar:

Caso I. $(b^2 - 4ac) > 0$, **Ecuación Hiperbólica**.

La Ec. (3.6) tiene dos soluciones reales distintas, m_1 y m_2. Así cualquier función de cualquiera de los dos argumentos $m_1 x + y$ ó $m_2 x + y$ resuelven a la Ec. (3.2). Por lo tanto la solución general de la Ec. (3.2) es

$$u(x, y) = \mathcal{F}\left(m_1 x + y\right) + \mathcal{G}(m_2 x + y) \tag{3.8}$$

donde $\mathcal{F}$ y $\mathcal{G}$ son cualquier función de clase C^2. Un ejemplo de este tipo de ecuaciones es la ecuación de onda, cuya ecuación canónica es

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0. \tag{3.9}$$

Caso II. $(b^2 - 4ac) = 0$, **Ecuación Parabólica**.

Asumiendo que $b \neq 0$ y $a \neq 0$ (lo cual implica que $c \neq 0$). Entonces se tiene una sola raíz degenerada de la Ec. (3.6) con el valor de $m_1 = \frac{-b}{2a}$ que resuelve a la Ec. (3.2). Por lo tanto la solución general de la Ec. (3.2) es

$$u(x, y) = \mathcal{F}(m_1 x + y) + y\mathcal{G}(m_1 x + y) \tag{3.10}$$

donde $\mathcal{F}$ y $\mathcal{G}$ son cualquier función de clase C^2. Si $b = 0$ y $a = 0$, entonces la solución general es

$$u(x, y) = \mathcal{F}(x) + y\mathcal{G}(x) \tag{3.11}$$

la cual es análoga si $b = 0$ y $c = 0$. Un ejemplo de este tipo de ecuaciones es la ecuación de difusión o calor, cuya ecuación canónica es

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \tag{3.12}$$

Caso III. $(b^2 - 4ac) < 0$, **Ecuación Elíptica**.

La Ec. (3.6) tiene dos soluciones complejas m_1 y m_2 las cuales satisfacen que m_2 es el conjugado complejo de m_1, es decir, $m_2 = m_1$. La solución general puede ser escrita en la forma

$$u(x, y) = \mathcal{F}(m_1 x + y) + \mathcal{G}(m_2 x + y) \tag{3.13}$$

donde $\mathcal{F}$ y $\mathcal{G}$ son cualquier función de clase C^2. Un ejemplo de este tipo de ecuaciones es la ecuación de Laplace, cuya ecuación canónica es

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \tag{3.14}$$

Consideremos ahora el caso de un operador diferencial lineal de segundo orden definido en $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ cuya forma general es

$$\mathcal{L}u = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^{n} b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + cu \tag{3.15}$$

y consideremos también la ecuación homogénea asociada a este operador

$$\mathcal{L}u = 0 \tag{3.16}$$

además, sea $\underline{x} \in \Omega$ un punto del espacio Euclidiano y $V(x)$ una vecindad de ese punto. Sea una función u definida en $V(\underline{x})$ con la propiedad de que exista una variedad Σ de dimensión $n-1$ cerrada y orientada, tal que la función u satisface la Ec. (3.16) en $V(\underline{x})\backslash\Sigma$. Se supone además que existe un vector unitario $\underline{n}$ que apunta en la dirección positiva (único) esta definido en Σ. Además, la función u y sus derivadas de primer orden son continuas a través de Σ, mientras que los límites de las segundas derivadas de u existen por ambos lados de Σ. Sea $\underline{x} \in \Sigma$ tal que

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}(\underline{x})\right] \neq 0 \tag{3.17}$$

para alguna pareja $i, j = 1, ..., n$. Entonces decimos que la función u es una solución débil de esta ecuación en $\underline{x}$.

Teorema 3 *Una condición necesaria para que existan soluciones débiles de la ecuación homogénea (3.16) en un punto $\underline{x} \in \Sigma$ es que*

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} n_i n_j = 0. \tag{3.18}$$

Así, si definimos a la matriz $\underline{\underline{A}} = (a_{ij})$ y observamos que

$$\underline{n} \cdot \underline{\underline{A}} \cdot \underline{n} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} n_i n_j \tag{3.19}$$

entonces podemos decir que:

I) Cuando todos los eigenvalores de la matriz $\underline{\underline{A}}$ son distintos de cero y además del mismo signo, entonces se dice que el operador es **Elíptico**.

II) Cuando todos los eigenvalores de la matriz $\underline{\underline{A}}$ son distintos de cero y además $n-1$ de ellos tienen el mismo signo, entonces se dice que el operador es **Hiperbólico**.

III) Cuando uno y sólo uno de los eigenvalores de la matriz $\underline{\underline{A}}$ es igual a cero, entonces se dice que el operador es **Parabólico**.

Para el caso en que $n = 2$, esta forma de clasificación coincide con la dada anteriormente.

3.2 Condiciones Iniciales y de Frontera

Dado un problema concreto de ecuaciones en derivadas parciales sobre un dominio Ω, si la solución existe, esta no es única ya que generalmente este tiene un número infinito de soluciones. Para que el problema tenga una y sólo una solución es necesario imponer condiciones auxiliares apropiadas y estas son las condiciones iniciales y condiciones de frontera.

En esta sección sólo se enuncian de manera general las condiciones iniciales y de frontera que son esenciales para definir un problema de ecuaciones diferenciales:

A) **Condiciones Iniciales**

Las condiciones iniciales expresan el valor de la función al tiempo inicial $t = 0$ (t puede ser fijada en cualquier valor)

$$u(\underline{x}, \underline{y}, 0) = \gamma(\underline{x}, \underline{y}). \tag{3.20}$$

B) **Condiciones de Frontera**

Las condiciones de frontera especifican los valores que la función $u(\underline{x}, \underline{y}, t)$ o $\nabla u(\underline{x}, \underline{y}, t)$ tomarán en la frontera $\partial\Omega$, siendo de tres tipos posibles:

1) **Condiciones tipo Dirichlet**

Especifica los valores que la función $u(\underline{x}, \underline{y}, t)$ toma en la frontera $\partial\Omega$

$$u(\underline{x}, \underline{y}, t) = \gamma(\underline{x}, \underline{y}). \tag{3.21}$$

2) **Condiciones tipo Neumann**

Aquí se conoce el valor de la derivada de la función $u(\underline{x}, \underline{y}, t)$ con respecto a la normal $\underline{n}$ a lo largo de la frontera $\partial\Omega$

$$\nabla u(\underline{x}, \underline{y}, t) \cdot \underline{n} = \gamma(\underline{x}, \underline{y}). \tag{3.22}$$

3) **Condiciones tipo Robin**

esta condición es una combinación de las dos anteriores

$$\alpha(\underline{x}, \underline{y})u(\underline{x}, \underline{y}, t) + \beta(\underline{x}, \underline{y})\nabla u(\underline{x}, \underline{y}, t) \cdot \underline{n} = g_{\partial}(\underline{x}, \underline{y}) \tag{3.23}$$

$\forall\ \underline{x},\ \underline{y} \in \partial\Omega$.

En un problema dado se debe prescribir las condiciones iniciales al problema y debe existir alguno de los tipos de condiciones de frontera o combinación de ellas en $\partial\Omega$.

3.3 Modelos Completos

Los modelos de los sistemas continuos estan constituidos por:

- Una colección de propiedades intensivas o lo que es lo mismo, extensivas.
- El conjunto de ecuaciones de balance local correspondientes (diferenciales y de salto).
- Suficientes relaciones que liguen a las propiedades intensivas entre sí y que definan a g, $\underline{\tau}$ y $\underline{v}$ en términos de estas, las cuales se conocen como leyes constitutivas.

Una vez que se han planteado las ecuaciones que gobiernan al problema, las condiciones iniciales, de frontera y mencionado los procesos que intervienen de manera directa en el fenómeno estudiado, necesitamos que nuestro modelo sea *completo.* Decimos que el modelo de un sistema es *completo* si define un problema *bien planteado.* Un problema de valores iniciales y condiciones de frontera es *bien planteado* si cumple que:

i) Existe una y sólo una solución y,

ii) La solución depende de manera continua de las condiciones iniciales y de frontera del problema.

Es decir, un modelo completo es aquél en el cual se incorporan condiciones iniciales y de frontera que definen conjuntamente con las ecuaciones diferenciales un problema bien planteado.

A las ecuaciones diferenciales definidas en $\Omega \subset \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0 \\ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u &= 0 \end{aligned} \tag{3.24}$$

se les conoce con los nombres de ecuación de Laplace, ecuación de onda y ecuación del calor, respectivamente. Cuando se considera la primera de estas

ecuaciones, se entiende que u es una función del vector $x \equiv (x_1, ..., x_n)$, mientras que cuando se considera cualquiera de las otras dos, u es una función del vector $x \equiv (x_1, ..., x_n, t)$. Así, en estos últimos casos el número de variables independientes es $n+1$ y los conceptos relativos a la clasificación y las demás nociones discutidas con anterioridad deben aplicarse haciendo la sustitución $n \to n+1$ e identificando $x_{n+1} = t$.

Ecuación de Laplace Para la ecuación de Laplace consideraremos condiciones del tipo Robin. En particular, condiciones de Dirichlet y condiciones de Neumann. Sin embargo, en este último caso, la solución no es única pues cualquier función constante satisface la ecuación de Laplace y también $\frac{\partial u}{\partial \underline{n}} = g_\partial$ con $g_\partial = 0$.

Ecuación de Onda Un problema general importante consiste en obtener la solución de la ecuación de onda, en el dominio del espacio-tiempo $\Omega \times [0, t]$, que satisface para cada $t \in (0, t]$ una condición de frontera de Robin en $\partial\Omega$ y las condiciones iniciales

$$u(\underline{x}, 0) = u_0(\underline{x}) \quad \text{y} \quad \frac{\partial u}{\partial t}(\underline{x}, 0) = v_0(\underline{x}), \quad \forall \underline{x} \in \Omega \tag{3.25}$$

aquí $u_0(\underline{x})$ y $v_0(\underline{x})$ son dos funciones prescritas. El hecho de que para la ecuación de onda se prescriban los valores iniciales, de la función y su derivada con respecto al tiempo, es reminiscente de que en la mecánica de partículas se necesitan las posiciones y las velocidades iniciales para determinar el movimiento de un sistema de partículas.

Ecuación de Calor También para la ecuación del calor un problema general importante consiste en obtener la solución de la ecuación de onda, en el dominio del espacio-tiempo $\Omega \times [0, t]$, que satisface para cada $t \in (0, t]$ una condición de frontera de Robin y ciertas condiciones iniciales. Sin embargo, en este caso en ellas sólo se prescribe a la función

$$u(\underline{x}, 0) = u_0(\underline{x}), \quad \forall \underline{x} \in \Omega. \tag{3.26}$$

4 Método de Diferencias Finitas

En la búsqueda de una descripción cualitativa de un determinado fenómeno, por lo general se plantea un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, validas para cierto dominio y donde se imponen sobre este, una serie de condiciones en la frontera y en su caso de condiciones iniciales. Después de esto, el modelo matemático se considera completo, y es aquí donde la implementación computacional entra a ayudar en la solución del problema, ya que sólo es posible resolver de forma exacta problemas simples y en fronteras geométricas triviales con los métodos matemáticos que disponemos.

En esta sección consideraremos como implementar la solución computacional del Método de Diferencias Finitas, este método es de carácter general que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales definidas en un dominio finito. Es de una gran sencillez conceptual y constituye un procedimiento muy adecuado para la resolución de una ecuación en una, dos o tres dimensiones.

El método consiste en una aproximación de las derivadas parciales por expresiones algebraicas con los valores de la variable dependiente en un número finito de puntos seleccionados en el dominio[8]. Como resultado de la aproximación, la ecuación diferencial parcial que describe el problema es remplazada por un número finito de ecuaciones algebraicas, en términos de los valores de la variable dependiente en los puntos seleccionados. El valor de los puntos seleccionados se convierten en las incógnitas. La solución del sistema de ecuaciones algebraico permite obtener la solución aproximada en cada punto seleccionado de la malla.

4.1 Método de Diferencias Finitas en una Dimensión

Sin perdida de generalidad, consideremos la ecuación diferencial parcial

$$\left(p\left(x\right)u'\left(x\right)\right)' + q\left(x\right)u'\left(x\right) - r\left(x\right)u\left(x\right) = f\left(x\right) \tag{4.1}$$

$$\text{en } a \leq x \leq b \qquad \text{donde: } u\left(a\right) = u_\alpha \text{ y } u\left(b\right) = u_\beta$$

[8]La técnica fundamental para los cálculos numéricos en diferencias finitas se basa en aproximar $f(x)$ mediante un polinomio cerca de $x = x_0$. Una de las aproximaciones clásicas es mediante la serie de Taylor, la cual también nos permite, aparte de la aproximación de las derivadas, el cálculo del error en la aproximación mediante su fórmula del residuo.

con condiciones de frontera Dirichlet, Neumann o Robin. Para usar el procedimiento general de solución numérica mediante el método de diferencias finitas, debemos de:

1. Generar una malla del dominio, i.e. una malla es un conjunto finito de puntos en los cuales buscaremos la solución aproximada a la ecuación diferencial parcial.

2. Sustituir las derivadas correspondientes con alguna de las formulas de diferencias finitas centradas (véase 10.1 y 10.3), en cada punto donde la solución es desconocida para obtener un sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$.

3. Resolver el sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ (véase 11), y así obtener la solución aproximada en cada punto de la malla.

4.1.1 Problema con Condiciones de Frontera Dirichlet

Consideremos un caso particular de la Ec.(4.1) definido por la ecuación

$$u''(x) = f(x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = u_\alpha, \qquad u(1) = u_\beta \tag{4.2}$$

con condiciones de frontera Dirichlet. Para usar el procedimiento general de solución numérica mediante el método de diferencias finitas, debemos de:

1. Generar una malla homogénea del dominio[9]

$$x_i = ih, \qquad i = 0, 1, ..., n, \qquad h = \frac{1}{n} = \Delta x \tag{4.3}$$

2. Sustituir la derivada con la Ec.(10.24) en cada punto donde la solución es desconocida para obtener un sistema algebraico de ecuaciones. Así, en cada punto x_i de la malla aproximamos la ecuación diferencial por[10]

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_i - h) - 2u(x) + u(x_i + h)}{h^2} \tag{4.4}$$

[9] En el caso de que la malla no sea homogénea, es necesario incluir en la derivada a que h se refiere, por ejemplo en cada punto i, tenemos la h_{i-} (por la izquierda) y la h_{i+} (por la derecha), i.e. $u''(x_i) \approx \frac{u(x_i - h_{i-}) - 2u(x) + u(x_i + h_{i+})}{(h_{i-})(h_{i+})}$.

[10] Notemos que en cada punto de la malla, la aproximación por diferencias finitas supone la solución de tres puntos de la malla x_{i-1}, x_i y x_{i+1}. El conjunto de estos tres puntos de la malla es comúnmente llamado el esténcil de diferencias finitas en una dimensión.

o en su forma simplificada

$$u''(x_i) \approx \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} \tag{4.5}$$

definiendo la solución aproximada de $u(x)$ en x_i como u_i, entonces se genera el siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$\begin{aligned}
\frac{u_\alpha - 2u_1 + u_2}{h^2} &= f(x_1) \\
\frac{u_1 - 2u_2 + u_3}{h^2} &= f(x_2) \\
&\vdots \\
\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} &= f(x_i) \\
&\vdots \\
\frac{u_{n-3} - 2u_{n-2} + u_{n-1}}{h^2} &= f(x_{n-2}) \\
\frac{u_{n-2} - 2u_{n-1} + u_\beta}{h^2} &= f(x_{n-1}).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Este sistema de ecuaciones se puede escribir como la matriz $\underline{\underline{A}}$ y los vectores $\underline{u}$ y $\underline{f}$ de la forma

$$\begin{bmatrix}
-\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & & & & \\
\frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & & & \\
& \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & & \\
& & \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} \\
& & & & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix} f(x_1) - \frac{u_\alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_{n-2}) \\ f(x_{n-1}) - \frac{u_\beta}{h^2} \end{bmatrix}.$$

en este caso, podemos factorizar $1/h^2$ del sistema lineal $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$, quedando como

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix}
-2 & 1 & & & & \\
1 & -2 & 1 & & & \\
& 1 & -2 & 1 & & \\
& & \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & & 1 & -2 & 1 \\
& & & & 1 & -2
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix} f(x_1) - \frac{u_\alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_{n-2}) \\ f(x_{n-1}) - \frac{u_\beta}{h^2} \end{bmatrix}.$$

esta última forma de expresar el sistema lineal algebraico asociado es preferible para evitar problemas numéricos al momento de resolver el sistema lineal por métodos iterativos (véase 11.2) principalmente cuando $h \longrightarrow 0$.

3. Resolver el sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ (véase 11), obtenemos la solución aproximada en cada punto interior de la malla. La solución completa al problema la obtenemos al formar el vector

$$\left[\begin{array}{ccccccccc} u_\alpha & u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_{n-2} & u_{n-1} & u_\beta \end{array} \right].$$

Uno de los paquetes más conocidos y usados para el cálculo numérico es MatLab[11] el cual tiene un alto costo monetario para los usuarios. Por ello, una opción es usar alternativas desarrolladas usando licencia de código abierto, un par de estos paquetes son: GNU OCTAVE[12] y SCILAB[13].

Octave corre gran parte del código desarrollado para MatLab sin requerir cambio alguno, en cuanto a SCILAB es requerido hacer algunos ajustes en la codificación y ejecución. En los siguientes ejemplos[14] se mostrará como implementar la solución computacional. En la sección (16) se mostrará la implementación en diversos paquetes y lenguajes de programación.

[11] MatLab es un programa comercial para el cálculo numérico el cual provee un poderoso ambiente de cálculo para aplicaciones Científicas y de Ingeniería [https://www.mathworks.com/products/matlab-home.html].

[12] GNU OCTAVE es un programa open source para el cálculo numérico el cual provee un poderoso ambiente de cálculo para aplicaciones Científicas y de Ingeniería [http://www.gnu.org/software/octave].

[13] SCILAB es un programa open source para el cálculo numérico el cual provee un poderoso ambiente de cálculo para aplicaciones Científicas y de Ingeniería [http://www.scilab.org].

[14] Los ejemplos que se muestran en el presente texto se pueden descargar de la página WEB:

http://132.248.182.159/acl/MDF/

o desde GitHub (https://github.com/antoniocarrillo69/MDF) mediante

git clone git://github.com/antoniocarrillo69/MDF.git

Ejemplo 1 *Sea*

$$-u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad xi \leq x \leq xf, \qquad u(xi) = vi, \qquad u(xf) = vf$$

El programa queda implementado en OCTAVE (MatLab) como:

```
function [A,b,x] = fdm1d(xi,xf,vi,vf,n)
  N=n-2; % Nodos interiores
  h=(xf-xi)/(n-1); % Incremento en la malla
  %A = sparse(N,N); % Matriz SPARSE
  A=zeros(N,N); % Matriz A
  b=zeros(N,1); % Vector b
  R=1/(h^2);
  P=-2/(h^2);
  Q=1/(h^2);
  % Primer renglon de la matriz A y vector b
  A(1,1)=P;
  A(1,2)=Q;
  b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
  % Renglones intermedios de la matriz A y vector b
  for i=2:N-1
    A(i,i-1)=R;
    A(i,i)=P;
    A(i,i+1)=Q;
    b(i)=LadoDerecho(xi+h*(i-1));
  end
  % Renglon final de la matriz A y vector b
  A(N,N-1)=R;
  A(N,N)=P;
  b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
  % Resuleve el sistema lineal Ax=b
  x=inv(A)*b;
  % Prepara la graficacion
  xx=zeros(n,1);
  zz=zeros(n,1);
  for i=1:n
    xx(i)=xi+h*(i-1);
    zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
  end
```

```
    yy=zeros(n,1);
    yy(1)=vi; % Condicion inicial
    for i=1:N
       yy(i+1)=x(i);
    end
    yy(n)=vf; % Condicion inicial
    % Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
    plot(xx,[yy,zz]);
  endfunction
  function y=LadoDerecho(x)
    y=-pi*pi*cos(pi*x);
  endfunction
  function y=SolucionAnalitica(x)
    y=cos(pi*x);
  endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1d.m**, entonces se puede ejecutar en la consola de OCTAVE (MatLab) mediante

$$[A, b, x] = fdm1d(-1, 2, -1, 1, 30);$$

donde es necesario indicar el inicio (-1) y fin (2) del dominio, el valor de la condición de frontera de inicio (-1) y fin (1), además de el número de nodos (30) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz[15] y los vectores A, b, x generados por la función.

En OCTAVE (MatLab) es posible introducir funciones para que pasen cómo parámetros a otra función, de tal forma que se puede definir un programa genérico de diferencias finitas en una dimensión con condiciones de frontera Dirichlet en el cual se especifiquen los parámetros de la ecuación en la línea de comando de OCTAVE.

[15] En Octave (MatLab) se define a una matriz mediante A = zeros(N,N), este tipo de matriz no es adecuada para nuestros fines (véase capítulo 11). Para ahorrar espacio y acelerar los cálculos numéricos que se requieren para resolver el sistema lineal asociado usamos un tipo de matriz que no guarda valores innecesarios (ceros), esto se hace mediante la declaración de la matriz como A = sparse(N,N).

Usando este hecho, implementamos un programa para codificar el Método de Diferencias Finitas en una Dimensión para resolver el problema con condiciones Dirichlet

$$p(x)u'' + q(x)u' + r(x)u = f(x)$$

definido en el dominio $[xi, xf]$ y valores en la frontera de $u(xi) = vi$ y $u(xf) = vf$, además se le indica el tamaño de la partición n, si se graficara la solución indicando en $grf = 1$, con solución analítica $s(x)$ y si a esta se proporciona entonces $sws = 1$. Regresando la matriz y los vectores $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$ del sistema lineal generado así como los puntos del dominio y los valores de la solución en dichos puntos x, V, para cada problema que deseemos resolver.

Ejemplo 2 *El programa queda implementado en OCTAVE (MatLab) como:*

```
function [error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DD(p,q,r,f,xi,xf,vi,vf,n,grf,s,sws)
    if n < 3
        return
    end
    % Numero de incognitas del problema
    tm = n -2;
    % Declaracion de la matriz y vectores de trabajo
    %A = sparse(tm,tm);
    A = zeros(tm,tm); % Matriz de carga
    b = zeros(tm,1); % Vector de carga
    u = zeros(tm,1); % Vector de solucion
    x = zeros(n,1); % Vector de coordenadas de la particion
    V = zeros(n,1) ; % Vector solucion
    h = (xf-xi)/(n-1);
    h1 = h*h;
    % Llenado de los puntos de la malla
    for i = 1: n,
        x(i) = xi + (i-1)*h;
    end
    % Llenado de la matriz y vector
    b(1) = f(xi) - p(xi)*(vi/h1);
    A(1,2) = p(x(1))/h1 - q(x(1))/(2.0*h);
    A(1,1) = ((-2.0 * p(x(1))) / h1) + r(x(1));
    for i=2:tm-1,
        A(i,i-1) = p(x(i))/h1 - q(x(i))/(2.0*h);
```

```
    A(i,i) = ((-2.0 * p(x(i))) / h1) + r(x(i));
    A(i,i+1) = p(x(i))/h1 + q(x(i))/(2.0*h);
    b(i) = f(x(i));
end
A(tm,tm-1) = p(x(tm))/h1 - q(x(tm))/(2.0*h);
A(tm,tm) = ((-2.0 * p(x(tm))) / h1) + r(x(tm));
b(tm) = f(x(tm+1))-p(x(tm+1))*(vf/h1);
% Soluciona el sistema
u = inv(A)*b;
% Copia la solucion obtenida del sistema lineal al vector solucion
V(1) = vi;
for i=1:tm,
    V(i+1) = u(i);
end
V(n) = vf;
% Encuentra el error en norma infinita usando particion par=10
error = 0;
if sws == 1
    par = 10;
    for i = 1: n-1,
        inc = (x(i+1)-x(i))/par;
        for j = 1:par+1,
            px = x(i)+inc*(j-1);
            e = abs(s(px)-l(px,x(i),V(i),x(i+1),V(i+1)));
            if e > error
                error = e;
            end
        end
    end
end
% Revisa si se graficara
if grf == 1
    if sws == 1
        % Calcula la solucion analitica en la particion de calculo
        ua = zeros(n,1);
        for i = 1: n,
            ua(i) = s(x(i));
        end
```

```
            end
            % Graficar la solucion numerica
            plot(x,V,'o');
            hold
            % Graficar la solucion analitica en una particion tamano xPart
            if sws == 1
                xPart = 1000;
                h = (xf-xi)/(xPart-1);
                xx = zeros(xPart,1);
                xa = zeros(xPart,1);
                for i = 1: xPart,
                    xx(i) = xi + (i-1)*h;
                    xa(i) = s(xx(i));
                end
                plot(xx,xa);
                % Grafica el error
                figure(2);
                plot(x,V-ua);
            end
        end
    end
    % Evalua el punto x en la recta dada por los puntos (x1,y1) y (x2,y2), se
usa para el calculo de la norma infinito
    function y = l(x,x1,y1,x2,y2)
        y = y1+((y2-y1)/(x2-x1))*(x-x1);
    end
```

De esta forma podemos implementar diversos problemas y ver su solución

Ejemplo 3 *Sea*

$$-u''(x) = -\pi^2 cos(\pi x), \qquad -1 \leq x \leq 2, \qquad u(-1) = -1, \qquad u(2) = 1$$

para ejecutar el programa anterior es necesario escribir en la consola de OCTAVE:

```
p=@(x) 1;
q=@(x) 0;
r=@(x) 0;
```

*f=@(x) -pi*pi*cos(pi*x);*
*s=@(x) cos(pi*x);*
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DD(p,q,r,f,-1,2,-1,1,11,1,s,1);

Otro ejemplo:

Ejemplo 4 *Sea*

$$u''(x) + u = -\pi^2 cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

para ejecutar el programa anterior es necesario escribir en la consola de OCTAVE:

p=@(x) 1;
q=@(x) 0;
r=@(x) 0;
*f=@(x) -pi*pi*cos(pi*x);*
*s=@(x) cos(pi*x);*
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DD(p,q,r,f,0,1,1,-1,40,1,s,1);

Ahora veamos un ejemplo con un parámetro adicional (velocidad):

Ejemplo 5 *Sea*

$$-u''(x) + v(x)u = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 0, \qquad u(1) = 1$$

para ejecutar el programa anterior es necesario escribir en la consola de OCTAVE:

v=@(x) 1.0; % velocidad
p=@(x) -1.0;
q=@(x) v(x);
r=@(x) 0;
f=@(x) 0;
*s=@(x) (exp(v(x)*x)-1.0)/(exp(v(x))-1.0);*
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DD(p,q,r,f,0,1,0,1,11,1,s,1);

En éste caso, la velocidad es $v = 1.0$ y nuestro programa lo puede resolver sin complicación alguna. Si aumentamos la velocidad a $v = 50.0$ y volvemos a correr el programa haciendo estos cambios, entonces:

Ejemplo 6 *v=@(x) 50.0;*
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DN(p,q,r,f,0,1,-1,0,-1,1,11,1,s,1);

Aún el programa lo resuelve bien, pero si ahora subimos la velocidad a $v = 100.0$ y corremos nuevamente el programa:

Ejemplo 7 *v=@(x) 100.0;*
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DN(p,q,r,f,0,1,-1,0,-1,1,11,1,s,1);

Entonces tendremos que la solución oscila en torno al cero. Para corregir esto, algunas opciones son: aumentar el número de nodos en la malla de discretización, usar una malla no homogénea refinada adecuadamente para tener un mayor número de nodos en donde sea requerido, usar fórmulas más precisas para las derivadas o mejor aún, usar diferentes esquemas tipo Upwind, Scharfetter-Gummel y Difusión Artificial para implementar el Método de Diferencias Finitas, como se muestra a continuación.

Número de Péclet Para el problema general dado por la Ec.(4.1)

$$\left(p\left(x\right)u'\left(x\right)\right)' + q\left(x\right)u'\left(x\right) - r\left(x\right)u\left(x\right) = f\left(x\right) \tag{4.7}$$

$$\text{en } a \leq x \leq b \qquad \text{donde: } u\left(a\right) = u_\alpha \text{ y } u\left(b\right) = u_\beta$$

el término $q\left(x\right)u'\left(x\right)$ algunas veces es llamado el término advectivo[16] si u es la velocidad y puede ocasionar inestabilidad numérica en el Método de Diferencias Finitas como se mostró en el ejemplo anterior Ej.(7), para evitar dichas inestabilidades existen diversas técnicas de discretización mediante el análisis de la solución considerando el Número de Péclet (local y global) y su implementación en el Método de Diferencias Finitas (véase [39]) mediante el esquema Upwind, Scharfetter-Gummel y Difusión Artificial, entre otros, para ello consideremos:

- Si las funciones $p(x), q(x)$ y $r(x)$ son constantes, el esquema de diferencias finitas centradas para todas las derivadas, este esta dado por el estencil

$$p_i\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + q_i\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - r_iu_i = f_i \qquad i = 1, 2, ..., n. \tag{4.8}$$

[16] Cuando la advección es fuerte, esto es cuando $|q\left(x\right)|$ es grande, la ecuación se comporta como si fuera una ecuación de onda.

donde la ventaja de esta discretización, es que el método es de segundo orden de exactitud. La desventaja es que los coeficientes de la matriz generada pueden no ser diagonal dominante si $r(x) > 0$ y $p(x) > 0$. Cuando la advección $|p(x)|$ es grande, la ecuación se comporta como la ecuación de onda.

- Tomando las funciones $p(x,t), q(x,t)$ y $r(x,t)$ más generales posibles, es necesario hacer una discretización que garantice que el método es de segundo orden de exactitud, esto se logra mediante la siguiente discretización para $(p(x,t)u'(x,t))'$ mediante

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\left(p\frac{\partial u}{\partial x}\right)(x,t) \simeq & \left[p\left(x+\frac{\Delta x}{2},t\right)\frac{u(x+\Delta x,t)-u(x,t)}{\Delta x}\right. \\ & \left.-p\left(x-\frac{\Delta x}{2},t\right)\frac{u(x,t)-u(x-\Delta x,t)}{\Delta x}\right]/\Delta x\end{aligned} \tag{4.9}$$

entonces se tiene que

$$\frac{p(u_{i+1},t)\frac{u_{i+1}+u_i}{h}-p(u_{i-1,t})\frac{u_i-u_{i-1}}{h}}{h}+q_i\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2h}-r_iu_i=f_i \tag{4.10}$$

para $i=1,2,...,n$, (véase [56] pág. 78 y 79).

- El esquema mixto, en donde se usa el esquema de diferencias finitas centradas para el término de difusión y el esquema *upwind* para el término de advección

$$\begin{aligned}p_i\frac{u_{i-1}-2u_i+u_{i+1}}{h^2}+q_i\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{h}-r_iu_i &= f_i, \text{ si } q_i\geq 0 \\ p_i\frac{u_{i-1}-2u_i+u_{i+1}}{h^2}+q_i\frac{u_i-u_{i-1}}{h}-r_iu_i &= f_i, \text{ si } q_i<0\end{aligned} \tag{4.11}$$

el propósito es incrementar el dominio de la diagonal. Este esquema es de orden uno de exactitud y su uso es altamente recomendable si $|q(x)| \sim 1/h$, en caso de no usarse, se observará que la solución numérica oscila alrededor del cero.

4.1.2 Problema con Condiciones de Frontera Neumann

Consideremos el problema

$$u''(x)=f(x), \qquad 0\leq x\leq 1 \tag{4.12}$$

con condiciones de frontera Neumann

$$\frac{du}{dx} = cte_1 \text{ en } u(0) \text{ y } \frac{du}{dx} = cte_2 \text{ en } u(1)$$

para usar el procedimiento general de solución numérica mediante el método de diferencias finitas, primero debemos discretizar las condiciones de frontera, una manera sería usar para la primera condición de frontera una aproximación usando diferencias progresivas Ec.(10.5)

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_i} = \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h}$$

quedando

$$\frac{u_1 - u_0}{h} = cte_1 \tag{4.13}$$

para la segunda condición de frontera una aproximación usando diferencias regresivas Ec.(10.10)

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_i} = \frac{u(x_i) - u(x_i - h)}{h}$$

quedando

$$\frac{u_n - u_{n-1}}{h} = cte_2 \tag{4.14}$$

pero el orden de aproximación no sería el adecuado pues estamos aproximando el dominio con diferencias centradas con un error local de truncamiento de segundo orden $O_c(\Delta x^2)$, en lugar de ello usaremos diferencias centradas Ec.(10.15) para tener todo el dominio con el mismo error local de truncamiento.

Para usar diferencias centradas Ec.(10.15)

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_i} = \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h}$$

en el primer nodo necesitamos introducir un punto de la malla ficticio $x_{-1} = (x_0 - \Delta x)$ con un valor asociado a u_{-1}, entonces

$$\frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = cte_1 \tag{4.15}$$

así también, en el último nodo necesitamos introducir un punto de la malla ficticio $x_{n+1} = (x_n + \Delta x)$ con un valor asociado a u_{n+1}, obteniendo

$$\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} = cte_2. \tag{4.16}$$

Estos valores no tienen significado físico alguno, dado que esos puntos se encuentran fuera del dominio del problema. Entonces debemos de:

1. Generar una malla homogénea del dominio

$$x_i = ih, \qquad i = 0, 1, ..., n, \qquad h = \frac{1}{n} = \Delta x. \tag{4.17}$$

2. Sustituir la derivada con la Ec.(10.24)[17] en cada punto donde la solución es desconocida para obtener un sistema algebraico de ecuaciones. Así, en cada punto x_i de la malla aproximamos la ecuación diferencial por

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_i - h) - 2u(x) + u(x_i + h)}{h^2} \tag{4.18}$$

definiendo la solución aproximada de $u(x)$ en x_i como u_i como la solución del siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$\begin{aligned}
\frac{u_1 - u_{-1}}{2h} &= cte_1 \\
\frac{u_0 - 2u_1 + u_2}{h^2} &= f(x_1) \\
&\vdots \\
\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} &= f(x_i) \\
&\vdots \\
\frac{u_{n-2} - 2u_{n-1} + u_n}{h^2} &= f(x_{n-1}) \\
\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} &= cte_2.
\end{aligned} \tag{4.19}$$

3. Resolver el sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ (véase 11), obtenemos la solución aproximada en cada punto de la malla.

[17] Para mantener la estabilidad es necesario tomar en cuenta las distintas formas de discretización en el Método de Diferencias Finitas mediante el esquema Upwind, Scharfetter-Gummel y Difusión Artificial, entre otros (véase la sección: 4.1.1, Ecs. 4.8 a 4.11).

4.1.3 Problema con Condiciones de Frontera Robin

El método de un punto de la malla ficticio es usado para el manejo de las condiciones de frontera mixta, también conocidas como condiciones de frontera Robin. Sin perdida de generalidad, supongamos que en $x = a$, tenemos

$$\alpha u'(a) + \beta u(b) = \gamma$$

donde $\alpha \neq 0$. Entonces usando el punto de la malla ficticio, tenemos que

$$\alpha \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} + \beta u_n = \gamma$$

o

$$u_{-1} = u_1 + \frac{2\beta}{\alpha} u_n - \frac{2h\gamma}{\alpha}$$

introduciendo esto en términos de diferencias finitas centradas, en $x = x_0$, entonces se tiene que

$$\left(-\frac{2}{h^2} + \frac{2\beta}{\alpha h}\right) u_n + \frac{2}{h^2} u_1 = f_0 + \frac{2\gamma}{\alpha h}$$

o

$$\left(-\frac{1}{h^2} + \frac{\beta}{\alpha h}\right) u_n + \frac{1}{h^2} u_1 = \frac{f_0}{2} + \frac{\gamma}{\alpha h}$$

lo que genera coeficientes simétricos en la matriz.

Consideremos el problema

$$u''(x) = f(x), \qquad 0 \leq x \leq 1 \tag{4.20}$$

con condiciones de frontera Dirichlet y Neumann

$$u(0) = u_\alpha \qquad \text{y} \qquad \frac{du}{dx} = cte_1 \text{ en } u(1).$$

respectivamente. Para usar el procedimiento general de solución numérica mediante el método de diferencias finitas, primero debemos expresar la condición de frontera Neumann mediante diferencias centradas Ec.(10.15)

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_i} = \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h}$$

en el último nodo necesitamos introducir un punto de la malla ficticio $x_{n+1} = (x_n + \Delta x)$ con un valor asociado a u_{n+1} quedando

$$\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} = cte_2. \tag{4.21}$$

Este valor no tiene significado físico alguno, dado que este punto se encuentra fuera del dominio del problema.

Entonces debemos de:

1. Generar una malla homogénea del dominio

$$x_i = ih, \qquad i = 0, 1, ..., n, \qquad h = \frac{1}{n} = \Delta x. \tag{4.22}$$

2. Sustituir la derivada con la Ec.(10.24)[18] en cada punto donde la solución es desconocida para obtener un sistema algebraico de ecuaciones. Así, en cada punto x_i de la malla aproximamos la ecuación diferencial por

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_i - h) - 2u(x) + u(x_i + h)}{h^2} \tag{4.23}$$

definiendo la solución aproximada de $u(x)$ en x_i como u_i como la solución del siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$\begin{aligned}
\frac{u_\alpha - 2u_1 + u_2}{h^2} &= f(x_1) \\
\frac{u_1 - 2u_2 + u_3}{h^2} &= f(x_2) \\
&\vdots \\
\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} &= f(x_i) \\
&\vdots \\
\frac{u_{n-2} - 2u_{n-1} + u_n}{h^2} &= f(x_{n-1}) \\
\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} &= cte_1.
\end{aligned} \tag{4.24}$$

[18] Para mantener la estabilidad es necesario tomar en cuenta las distintas formas de discretización en el Método de Diferencias Finitas mediante el esquema Upwind, Scharfetter-Gummel y Difusión Artificial, entre otros (véase la sección: 4.1.1, Ecs. 4.8 a 4.11).

3. Resolver el sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ (véase 11), obtenemos la solución aproximada en cada punto de la malla. La solución completa al problema la obtenemos al formar el vector

$$\left[\begin{array}{ccccccccc} u_\alpha & u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_{n-2} & u_{n-1} & u_n \end{array} \right].$$

La implementación de un programa para codificar el Método de Diferencias Finitas en una Dimensión para resolver el problema con condiciones Dirichlet o Neumann del problema

$$p(x)u'' + q(x)u' + r(x)u = f(x)$$

definido en el dominio $[xi, xf]$ y el tipo de frontera en xi —ti igual a -1 Dirichlet ($u(xi) = vi$) ó -2 Neumann ($u_x(xi) = vi$)— y el valor en la frontera xf —tf igual a -1 Dirichlet$(u(xf) = vf)$ o -2 Neumann $(u_x(xf) = vf)$—, además se le indica el tamaño de la partición n, si se graficara la solución indicando en $grf = 1$, con la solución analítica $s(x)$ y si esta se proporciona $sws = 1$. Regresando la matriz y los vectores $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$ del sistema lineal generado así como los puntos del dominio y los valores de la solución en dichos puntos x, V

Ejemplo 8 *El programa queda implementado en OCTAVE (MatLab) como:*

```
function [error,A,b,u,x,V] = fdm1d(p,q,r,f,xi,xf,ti,vi,tf,vf,n,grf,s,sws)
    if n < 3
        return
    end
    % llenado de valores para el tipo de nodo y valor de frontera
    TN = zeros(n,1); % Vector para guardar el tipo de nodo
    V = zeros(n,1); % Vector para guardar la solucion y frontera
    TN(1) = ti;
    TN(n) = tf;
    V(1) = vi;
    V(n) = vf;
    % Calcula el numero de incognitas del problema
    tm = 0;
    for i=1:n,
        if TN(i) == -1 % Descarta nodos frontera Dirichlet
            continue
```

```
        end
        tm = tm +1;
    end
    % Declaracion de la matriz y vectores de trabajo
    %A = sparse(tm,tm);
    A = zeros(tm,tm); % Matriz de carga
    b = zeros(tm,1); % Vector de carga
    u = zeros(tm,1); % Vector de solucion
    x = zeros(n,1); % Vector de coordenadas de la particion
    % Llenado de la matriz y vector
    h = (xf-xi)/(n-1);
    h1 = h*h;
    j = 1;
    for i=1:n,
        x(i) = xi + (i-1)*h;
        if TN(i) == -1 % Descarta nodos frontera Dirichlet
            continue;
        end
        % Diagonal central
        A(j,j) = ((-2.0 * p(x(i))) / h1) + r(x(i));
        if TN(i) == -2
            A(j,j) = -1/h1;
        end
        % Lado derecho
        b(j) = f(x(i));
        % Diagonal anterior
        if TN(i) == -2
            b(j) = V(i)/h;
            if i > 1
                A(j,j-1) = -1/h1;
            end
        elseif TN(i-1) == -1
            b(j) = f(x(i)) - p(x(i))*(V(i-1)/h1);
        else
            A(j,j-1) = p(x(i))/h1 - q(x(i))/(2.0*h);
        end
        % Diagonal superior
        if TN(i) == -2
```

```
            b(j) = V(i)/h;
            if i < n
                  A(j,j+1) = -1/h1;
            end
      elseif TN(i+1) == -1
            b(j) = f(x(i)) - p(x(i))*(V(i+1)/h1);
      else
            A(j,j+1) = p(x(i))/h1 + q(x(i))/(2.0*h);
      end
      j = j + 1;
end
% Soluciona el sistema
u = A\b;
% Copia la solucion obtenida del sistema lineal al vector solucion
j = 1;
for i=1:n,
      if TN(i) == -1 % descarta nodos frontera Dirichlet
            continue
      end
      V(i) = u(j);
      j = j + 1;
end
% Encuentra error en norma infinita usando particion par = 10
error = 0;
if sws == 1
      par = 10;
      for i = 1: n-1,
            inc = (x(i+1)-x(i))/par;
            for j = 1:par+1,
                  px = x(i)+inc*(j-1);
                  e = abs(s(px)-l(px,x(i),V(i),x(i+1),V(i+1)));
                  if e > error
                        error = e;
                  end
            end
      end
end
% Revisa si se graficara
```

```
    if grf == 1
        if sws == 1
            % Calcula la solucion analitica en la particion de calculo
            ua = zeros(n,1);
            for i = 1: n,
                ua(i) = s(x(i));
            end
        end
        % Grafica la solucion numerica
        plot(x,V,'o');
        hold
        % Graficar solucion analitica en particion de tamano xPart
        if sws == 1
            xPart = 1000;
            h = (xf-xi)/(xPart-1);
            xx = zeros(xPart,1);
            xa = zeros(xPart,1);
            for i = 1: xPart,
                xx(i) = xi + (i-1)*h;
                xa(i) = s(xx(i));
            end
            plot(xx,xa);
            % Grafica el error
            figure(2);
            plot(x,V-ua);
        end
    end
end
% evalua el punto x en la recta dada por los puntos (x1,y1) y (x2,y2)
function y = l(x,x1,y1,x2,y2)
    y = y1+((y2-y1)/(x2-x1))*(x-x1);
end
```

Ejemplo 9 *Sea*

$$-u''(x) + u = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 0, \qquad u(1) = 1$$

para ejecutar el programa anterior es necesario escribir en la consola de OCTAVE:

```
v=@(x) 1.0; % velocidad, posibles valores 1,25,100, etc.
p=@(x) -1.0;
q=@(x) v(x);
r=@(x) 0;
f=@(x) 0;
s=@(x) (exp(v(x)*x)-1.0)/(exp(v(x))-1.0);
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DN(p,q,r,f,0,1,-1,0,-1,1,11,1,s,1);
```

Ejemplo 10 *Sea*

$$u''(x) + u = -\pi^2 cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

para ejecutar el programa anterior es necesario escribir en la consola de OCTAVE:

```
p=@(x) 1;
q=@(x) 0;
r=@(x) 0;
f=@(x) -pi*pi*cos(pi*x);
s=@(x) cos(pi*x);
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DN(p,q,r,f,0,1,-1,1,-1,-1,40,1,s,1);
```

Ejemplo 11 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 0.5, \qquad u(0) = 1, \qquad u_x(0.5) = -\pi$$

para ejecutar el programa anterior es necesario escribir en la consola de OCTAVE:

```
p=@(x) 1;
q=@(x) 0;
r=@(x) 0;
f=@(x) -pi*pi*cos(pi*x);
s=@(x) cos(pi*x);
[error,A,b,u,x,V] = fdm1d_DN(p,q,r,f,0,0.5,-1,1,-2,-pi,40,1,s,1);
```

Pese a que con el programa anterior podríamos resolver la ecuación

$$-u''(x) - k^2 u(x) = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u'(1) = iku(1)$$

esta ecuación se conoce como la ecuación de Helmholtz la cual es difícil de resolver si $r(x) \leq 0$ y $|r(x)|$ es grande, i.e. $r(x) \sim 1/h^2$. Para resolver correctamente dicha ecuación, usaremos otro programa con los esquemas de discretización de diferencias finitas y diferencias finitas exactas. Este último procedimiento fue desarrollado en: Exact Finite Difference Schemes for Solving Helmholtz Equation at any Wavenumber, Yau Shu Wong and Guangrui Lim International Journal of Numerical Analysis and Modeling, Volumen 2, Number 1, Pages 91-108, 2011. Y la codificación de prueba queda como:

Ejemplo 12 *Sea*

$$-u''(x) - k^2 u(x) = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u'(1) = iku(1)$$

con $k = 150$, *entonces el programa en SCILAB queda implementado como:*

```
TEST = 1; // (0) Diferencias finitas, (1) Diferencias finitas exactas

function y=LadoDerecho(x)
 y=0.0;
endfunction

function y=SolucionAnalitica(x, k)
 //y=cos(k*x)+%i*sin(k*x);
 y=exp(%i*k*x);
endfunction

K = 150;
KK = K*K;
a=0; // Inicio dominio
c=1; // Fin dominio
M=300; // Particion
N=M-1; // Nodos interiores
h=(c-a)/(M-1); // Incremento en la malla
Y0=1; // Condicion Dirichlet inicial en el inicio del dominio
Y1=%i*K; // Condicion Neumann inicial en el fin del dominio
```

```
A=zeros(N,N); // Matriz A
b=zeros(N); // Vector b

if TEST = 0 then
R=-1/(h^2);
P=2/(h^2)-KK;
Q=-1/(h^2);
else
R=-1/(h^2);
P=(2*cos(K*h)+(K*h)^2)/(h^2) - KK;
Q=-1/(h^2);
end

// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,1)=P;
A(1,2)=Q;
b(1)=LadoDerecho(a)-Y0*R; // Frontera Dirichlet
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
 A(i,i-1)=R;
 A(i,i)=P;
 A(i,i+1)=Q;
 b(i)=LadoDerecho(a+h*(i-1));
end
// Renglon final de la matriz A y vector b
if TEST = 0 then
 A(N,N-1)=1/(h^2);
 A(N,N)=-1/(h^2)+ Y1/h;
 b(N)=LadoDerecho(c)/2;
else
 A(N,N-1)=1/(h^2);
 A(N,N)=-1/(h^2)+ %i*sin(K*h)/(h^2);
 b(N)=LadoDerecho(c)/2;
end

// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=inv(A)*b;

ESC = 5;
```

```
xxx=zeros(M*ESC,1);
zzz=zeros(M*ESC,1);
for i=1:M*ESC
 xxx(i)=a+h/ESC*(i-1);
 zzz(i)=SolucionAnalitica(xxx(i),K);
end
// Prepara la graficacion
xx=zeros(M,1);
zz=zeros(M,1);
for i=1:M
 xx(i)=a+h*(i-1);
 zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i),K);
end
yy=zeros(M,1);
yy(1)=Y0; // Condicion inicial
for i=1:N
 yy(i+1)=x(i);
end
// Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,yy,15)
plot2d(xxx,zzz)
```

4.1.4 Ecuación con Primera Derivada Temporal

Hasta ahora se ha visto como discretizar la parte espacial de las ecuaciones diferenciales parciales, lo cual nos permite encontrar la solución estatica de los problemas del tipo elíptico. Sin embargo, para ecuaciones del tipo parabólico e hiperbólico dependen del tiempo, se necesita introducir una discretización a las derivadas con respecto del tiempo. Al igual que con las discretizaciones espaciales, podemos utilizar algún esquema de diferencias finitas en la discretización del tiempo.

Para la solución de la ecuaciones diferenciales con derivada temporal (u_t), se emplean diferentes esquemas en diferencias finitas para la discretización del tiempo. Estos esquemas se conocen de manera general como esquemas $theta(\theta)$.

Definiendo la ecuación diferencial parcial general de segundo orden como

$$u_t = \mathcal{L}u \tag{4.25}$$

donde

$$\mathcal{L}u = \left(p\left(x\right)u'\left(x\right)\right)' + q\left(x\right)u'\left(x\right) - r\left(x\right)u\left(x\right) - f\left(x\right) \tag{4.26}$$

aquí, los coeficientes p, q y r pueden depender del espacio y del tiempo. Entonces el esquema *theta* esta dado por

$$u_t = \left(1-\theta\right)\left(\mathcal{L}u\right)^j + \theta\left(\mathcal{L}u\right)^{j+1}. \tag{4.27}$$

Existen diferentes casos del esquema *theta* a saber:

- Para $\theta = 0$, se obtiene un esquema de diferencias finitas hacia adelante en el tiempo, conocido como esquema completamente explícito, ya que el paso $n+1$ se obtiene de los términos del paso anterior n. Es un esquema sencillo, el cual es condicionalmente estable cuando $\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2}$.
- Para $\theta = 1$, se obtiene el esquema de diferencias finitas hacia atrás en el tiempo, conocido como esquema completamente implícito, el cual es incondicionalmente estable.
- Para $\theta = \frac{1}{2}$, se obtiene un esquema de diferencias finitas centradas en el tiempo, conocido como esquema Crank-Nicolson, este esquema es también incondicionalmente estable y es más usado por tal razón.

Para la implementación del esquema Crank-Nicolson se toma una diferencia progresiva para el tiempo y se promedian las diferencias progresivas y regresivas en el tiempo para las derivadas espaciales. Entonces, si tenemos la Ec. (4.26), las discretizaciones correspondientes son[19]:

$$u_t \simeq \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} \tag{4.28}$$

$$\left(p\left(x\right)u'\left(x\right)\right)' \simeq \frac{p}{2}\left[\frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{\Delta x^2} + \frac{u_{i-1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}}{\Delta x^2}\right] \tag{4.29}$$

[19] Para mantener la estabilidad es necesario tomar en cuenta las distintas formas de discretización en el Método de Diferencias Finitas mediante el esquema Upwind, Scharfetter-Gummel y Difusión Artificial, entre otros (véase sección: 4.1.1, Ecs. 4.8 a 4.11).

$$q\left(x\right)u'\left(x\right) \simeq \frac{q}{2}\left[\frac{u_{i-1}^{j}+u_{i+1}^{j}}{2\Delta x}+\frac{u_{i-1}^{j+1}+u_{i+1}^{j+1}}{2\Delta x}\right] \tag{4.30}$$

además de $r(x), u_i^j$ y f_i^j.

Entonces, una vez que se sustituyen las derivadas por su forma en diferencias finitas, lo siguiente es formar el sistema:

$$Au^{j+1} = Bu^j + f^j \tag{4.31}$$

esto se logra, colocando del lado izquierdo la igualdad de los términos que contengan el paso del tiempo correspondiente a $j+1$ y del lado derecho a los términos correspondientes de j.

A continuación, veamos un ejemplo del esquema Crank-Nicolson desarrollados en SCILAB[20]

Ejemplo 13 *Sea*

$$u_t - a(x)u''(x) - b(x)u'(x) + c(x)u = f, \qquad l0 \leq x \leq l, \qquad 0 < t < T$$

entonces el programa queda implementado como:

```
// Crank-Nicolson
// Para una EDP de segundo orden
// u_t + a(x)u_xx + b(x)u_x +c(x)u = f
// Dominio
// l0<x<l
// 0<t<T
// Condiciones de frontera Dirichlet
// u(0,t) = u(l,t) = constante 0 < t < T cond de frontera
// Condicion inicial
// u(x,0) = g(x) l0 <= x <= l
// Datos de entrada
// intrevalo [l0, l]
// entero m>=3
// entero N>=1
// Salida
```

[20] Scilab es un programa Open Source para el cálculo numérico el cual provee un poderoso ambiente de cálculo para aplicaciones Científicas y de Ingeniería [http://www.scilab.org].

```
// aproximaciones w_ij a u(x_i,t_j)
// Funciones de los coeficientes
function y = a(x)
y = -1;
endfunction
function y = b(x)
y = -1;
endfunction
function y = c(x)
y = 1;
endfunction
function y = f(x)
y = 0;
endfunction
// funcion de la condicion inicial
function y = condicion_inicial(x)
y = sin(x * %pi);
endfunction
// Condiciones de frontera
// Solo Dirichlet
cond_izq = 0;
cond_der = 0;
// Datos de entrada
l0 = 0;l = 1; // intervalo [0,1]
m = 11; // Numero de nodos
M = m - 2; // Nodos interiores
// Division del espacio y del tiempo
h = (l - l0)/(m-1);
k = 0.025; // Paso del tiempo
N = 50; // Numero de iteraciones
// Aw^(j+1) = Bw^j + f^j
// creo el vector w donde se guardara la solucion para cada tiempo
// A matriz del lado izquierdo
// B matriz del lado derecho
// B_prima para guardar el resultado de Bw^j
// ff que es el vector de los valores de f en cada nodo
w = zeros(M,1);
ff = zeros(M,1)
```

```
A = zeros(M,M);
B = zeros(M,M);
//B_prima = zeros(M,1);
w_sol = zeros(m,m)
// Se crea el espacio de la solucion o malla
espacio = zeros(M,1)
for i = 1:m
xx = l0 + (i-1)*h;
espacio(i) = xx;
end
disp(espacio, "Espacio")
// Condicion inicial
for i=1:M
w(i) = condicion_inicial(espacio(i+1));
end
w_sol(1) = cond_izq;
for kk = 1:M
w_sol(kk + 1) = w(kk);
end
w_sol(m) = cond_izq;
plot(espacio, w_sol);
disp(w, "Condiciones iniciales")
// primer renglon de cada matriz
A(1,1) = 1/k - a(l0 + h)/(h*h);
A(1,2) = a(l0 + h)/(2*h*h) + b(l0 + h)/(4*h) ;
B(1,1) = 1/k + a(l0 + h)/(h*h) - c(l0 + h);
B(1,2) = - a(l0 + h)/(2*h*h) - b(l0 + h)/(4*h);
ff(1) = f(l0 + h) - cond_izq;
// se completa las matrices desde el renglon 2 hasta el m-2
for i = 2:M-1
A(i, i-1) = a(l0 + i*h)/(2*h*h) - b(l0 + i*h)/(4*h) ;
A(i,i) = 1/k - a(l0 + i*h)/(h*h);
A(i,i+1) = a(l0 + i*h)/(2*h*h) + b(l0 + i*h)/(4*h) ;
B(i, i-1) = - a(l0 + i*h)/(2*h*h) + b(l0 + i*h)/(4*h);
B(i,i) = 1/k + a(l0 + i*h)/(h*h) - c(l0 + i*h);
B(i,i+1) = - a(l0 + i*h)/(2*h*h) - b(l0 + i*h)/(4*h);
end
// Ultimo renglon de cada matriz
```

```
A(M,M-1) = a(l - h)/(2*h*h) - b(l-h)/(4*h) ;
A(M,M) = 1/k - a(l - h)/(h*h);
B(M,M-1) = - a(l-h)/(2*h*h) + b(l-h)/(4*h);
B(M,M) = 1/k + a(l-h)/(h*h) - c(l-h);
ff(M) = f(l - h) - cond_der;
// Resolvemos el sistema iterativamente
for j=1:21
t = j*k;
B_prima = B * w + ff;
w = inv(A) * B_prima;
disp(t, "tiempo")
disp(w, "Sol")
w_sol(1) = cond_izq;
for kk = 1:M
  w_sol(kk + 1) = w(kk);
end
w_sol(m) = cond_izq;
plot(espacio, w_sol);
end
```

4.1.5 Ecuación con Segunda Derivada Temporal

Para el caso de ecuaciones con segunda derivada temporal, esta se aproxima por diferencias finitas centradas en el tiempo, partiendo de la Ec. (4.26), las discretizaciones correspondientes son[21]

$$u_{tt} \simeq \frac{u_i^{j-1} - 2u_i^j + u_i^{j+1}}{\Delta t^2} \tag{4.32}$$

$$\left(p\left(x\right)u'\left(x\right)\right)' \simeq p\left[\frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{\Delta x^2}\right] \tag{4.33}$$

$$q\left(x\right)u'\left(x\right) \simeq q\left[\frac{u_{i-1}^j + u_{i+1}^j}{2\Delta x}\right] \tag{4.34}$$

[21] Para mantener la estabilidad es necesario tomar en cuenta las distintas formas de discretización en el Método de Diferencias Finitas mediante el esquema Upwind, Scharfetter-Gummel y Difusión Artificial, entre otros (véase sección: 4.1.1, Ecs. 4.8 a 4.11).

además de $r(x)$, u_i^j y f_i^j.

Entonces, una vez que se sustituyen las derivadas por su forma en diferencias finitas, lo siguiente es formar el sistema

$$u_i^{j+1} = 2u_i^j - u_i^{j-1} + (\Delta t)^2 \, Bu^j \tag{4.35}$$

esto se logra, colocando del lado izquierdo la igualdad de los términos que contengan el paso del tiempo correspondiente a $j+1$ y del lado derecho a los correspondientes términos de j y $j-1$. Para calcular u_i^{j+1} es necesario conocer u_{i-1}, u_i, u_{i+1} en los dos instantes inmediatos anteriores, i.e. t_j y t_{j-1}.

En particular para calcular u_i^1 es necesario conocer u_i^0 y u_i^{-1}, si consideramos

$$u_i^{j+1} = 2u_i^j - u_i^{j-1} + (\Delta t)^2 \, \mathcal{L}u^j \tag{4.36}$$

para $j = 0$, entonces

$$u_i^1 = 2u_i^0 - u_i^{-1} + (\Delta t)^2 \, \mathcal{L}u^0 \tag{4.37}$$

donde u_i^0 es la condición inicial y $\frac{u_i^1 - u_i^{-1}}{2\Delta t}$ es la primer derivada de la condición inicial. Así, para el primer tiempo tenemos

$$u_i^1 = u(x_i, 0) + \Delta t u'(x_i, 0) + (\Delta t)^2 \, \mathcal{L}u^0 \tag{4.38}$$

lo cual permite calcular u_i^1 a partir de las condiciones iniciales.

La derivación del método parte de

$$\begin{aligned} u_{tt} &= \mathcal{L}u^j \\ \frac{u_i^{j-1} - 2u_i^j + u_i^{j+1}}{(\Delta t)^2} &= \mathcal{L}u^j \\ u_i^{j+1} &= 2u_i^j - u_i^{j-1} + (\Delta t)^2 \, \mathcal{L}u^j \end{aligned} \tag{4.39}$$

donde el error intrínseco a la discretización es de orden cuadrático, pues se ha usado diferencias centradas, tanto para el espacio como para el tiempo.

Ejemplo 14 *Sea*

$$u_{tt} - 4u''(x) = 0, \qquad 0 \le x \le l, \qquad 0 < t < T$$

sujeta a

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \qquad u(x,0) = \sin(\pi x), \qquad u_t(x,0) = 0$$

con solución analítica

$$u(x,t) = sen(\pi x) * cos(2\pi t)$$

entonces el programa queda implementado como:

```
// Dominio
a_ = 0
b_ = 1
// Particion en x
m = 101; // numero de nodos
h = (b_ - a_)/(m-1)
dt = 0.001 // salto del tiempo
// Para que sea estable se debe cumplir que
// sqrt(a) <= h/dt
// Coeficiente
function y = a(x)
y = -4;
endfunction
// Condicion inicial
function y = inicial(x)
y = sin(%pi * x)
endfunction
function y = u_t(x)
y = 0;
endfunction
// Solucion analitica
function y = analitica(x,t)
y = sin(%pi * x) * cos(2* %pi * t)
endfunction
////////////////////////////////////
// Aw^(j+1) = Bw^j
// creo el vector w donde se guradaria la solucion para cada tiempo
// A matriz del lado izquierdo
// B matriz del lado derecho
// B_prima para guardar el resultado de Bw^j
```

```
w_sol = zeros(m,1);
w_sol_temp = zeros(m,1);
w_temp = zeros(m,1);
w = zeros(m,1);
w_ = zeros(m,1);
A = eye(m,m);
B = zeros(m,m);
B_prima = zeros(m,1);
espacio = zeros(m,1)
sol = zeros(m,1);
// primer renglon de cada matriz
B(1,1) = 2*a(a_)*dt*dt/(h*h)
B(1,2) = -a(a_)*dt*dt/(h*h)
// se completa las matrices desde el renglon 2 hasta el m-1
for i = 2:m-1
B(i, i-1) = -a(i*h)*dt*dt/(h*h)
B(i,i) = 2*a(i*h)*dt*dt/(h*h)
B(i,i+1) = -a(i*h)*dt*dt/(h*h)
end
// Ultimo renglon de cada matriz
B(m,m-1) = -a(b_)*dt*dt/(h*h)
B(m,m) = 2*a(b_)*dt*dt/(h*h)
// muestro la matriz
//printf("Matriz B\n");
//disp(B);
for i=1:m
xx = (i-1)*h;
espacio(i) = a_ + xx;
w(i) = inicial(espacio(i)); // Condiciones iniciales
w_(i) = inicial(espacio(i)) + u_t(espacio(i)) * dt
end
//
//disp(espacio)
//disp(w)
////////////
//Para t = 0
B_prima = B * w;
for i = 1:m
```

```
w_sol(i) = w_(i) + B_prima(i);
end
////////////
printf("w para t = 0\n");
disp(w_sol);
for i = 1:m
sol(i) = analitica(espacio(i), 0)
end
printf("Solucion analitica para t = 0\n")
disp(sol)
plot(espacio,w_sol)
//plot(espacio,sol,'r')
w_sol_temp = w_sol;
w_temp = w
for i=1:500
t = i*dt
B_prima = B * w_sol_temp;
w_ = 2 * w_sol_temp - w_temp
w_sol = w_ + B_prima;
////
// for j = 1:m
// sol(j) = analitica(espacio(j), t)
// end
//
// printf("Sol analitica dt = %f", t)
// disp(sol)
// printf("Sol metodo dt = %f", t)
// disp(w_sol)
w_temp = w_sol_temp
w_sol_temp = w_sol
if i == 5 | i == 50 | i == 100 | i == 150 | i == 200 | i == 250 | i ==
300 | i== 350 | i == 400 | i == 450 | i == 500 then
plot(espacio,w_sol)
end
//plot(espacio,sol,'r')
end
```

4.2 Consistencia, Estabilidad, Convergencia y Error del Método de Diferencias Finitas

Cuando se usa algún método para la resolución de ecuaciones diferenciales, se necesita conocer cuan exacta es la aproximación obtenida en comparación con la solución analítica (en caso de existir).

Error Global Sea $U = [U_1, U_2, ..., U_n]^T$ el vector solución obtenido al utilizar el método de diferencias finitas y $u = [u(x_1), u(x_n), ..., u(x_n)]$ la solución exacta de los puntos de la malla. El vector de error global se define como $E = U - u$, lo que se desea es que el valor máximo sea pequeño. Usualmente se utilizan distintas normas para encontrar el error.

- La norma infinito, definida como $\|E\|_\infty = \max |e_i|$
- La norma-1, definida como $\|E\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |e_i|$
- La norma-2, definida como $\|E\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} e_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$

La norma infinito $\|E\|_\infty$ es en general, la más apropiada para calcular los errores relativos a la discretización.

Definición 4 *Si* $\|E\| \leq Ch^p, p > 0$, *decimos que el método de diferencias finitas es de orden-p de precisión.*

Definición 5 *Un método de diferencias finitas es llamado convergente si*

$$\lim_{h \to 0} \|E\| = 0. \tag{4.40}$$

Error de Truncamiento Local Sea el operador diferencia $\mathcal{L}u$, definimos el operador en diferencias finitas $\mathcal{L}_h$, por ejemplo para la ecuación de segundo orden $u''(x) = f(x)$, uno de los operadores de diferencias finitas puede ser

$$\mathcal{L}_h u(x) = \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2}. \tag{4.41}$$

Definición 6 *El error de truncamiento local es definido como*

$$T(x) = \mathcal{L}u - \mathcal{L}_h u. \tag{4.42}$$

Para la ecuación diferencial $u''(x) = f(x)$ y el esquema de diferencias centradas usando tres puntos $\frac{u(x-h)-2u(x)+u(x+h)}{h^2}$, el error de truncamiento local es

$$\begin{aligned} T(x) &= \mathcal{L}u - \mathcal{L}_h u = u''(x) - \frac{u(x-h)-2u(x)+u(x+h)}{h^2} \\ &= f(x) - \frac{u(x-h)-2u(x)+u(x+h)}{h^2}. \end{aligned} \tag{4.43}$$

Note que el error de truncamiento local sólo depende de la solución del estencil en diferencias finitas (en el ejemplo es usando tres puntos) pero no depende de la solución global, es por ello que se denomina error de truncamiento local. Este es una medida de que tanto la discretización en diferencias finitas se aproxima a la ecuación diferencial.

Definición 7 *Un esquema de diferencias finitas es llamado consistente si*

$$\lim_{h\to 0} T(x) = \lim_{h\to 0} (\mathcal{L}u - \mathcal{L}_h u) = 0. \tag{4.44}$$

Si $T(x) = Ch^p, p > 0$, entonces se dice que la discretización es de orden$-p$ de precisión, donde C es una constante independiente de h pero puede depender de la solución de $u(x)$. Para conocer cuando un esquema de diferencias finitas es consistente o no, se usa la expansión de Taylor. Por ejemplo, para el esquema de diferencias finitas centradas usando tres puntos para la ecuación diferencial $u''(x) = f(x)$, tenemos que

$$T(x) = u''(x) - \frac{u(x-h)-2u(x)+u(x+h)}{h^2} = -\frac{h^2}{12}u^{(4)}(x) + ... = Ch^2 \tag{4.45}$$

donde $C = \frac{1}{12}u^{(4)}(x)$. Por lo tanto, este esquema de diferencias finitas es consistente y la discretización es de segundo orden de precisión.

La consistencia no puede garantizar que un esquema de diferencias finitas trabaje. Para ello, necesitamos determinar otra condición para ver si converge o no. Tal condición es llamada la estabilidad de un método de diferencias finitas. Para el problema modelo, tenemos que

$$Au = F + T, \qquad AU = F, \qquad A(u - U) = T = -AE \tag{4.46}$$

donde A son los coeficientes de la matriz de las ecuaciones en diferencias finitas, F son los términos modificados por la condición de frontera, y T es el vector local de truncamiento en los puntos de la malla.

Si la matriz A es no singular, entonces $\|E\| = \|A^{-1}T\| \leq \|A^{-1}\| \|T\|$. Para el esquema de diferencias finitas centradas, tenemos que $\|E\| = \|A^{-1}\| h^2$. Tal que el error global depende del error de truncamiento local y $\|A^{-1}\|$.

Definición 8 *Un método de diferencias finitas para la ecuación diferencial elíptica es estable si A es invertible y*

$$\left\|A^{-1}\right\| \leq C, \text{ para todo } h \leq h_0 \tag{4.47}$$

donde C y h_0 son constantes.

Teorema 9 *Si el método de diferencias finitas es estable y consistente, entonces es convergente.*

4.3 Método de Diferencias Finitas en Dos y Tres Dimensiones

Sin perdida de generalidad y a modo de ejemplificar, consideremos la ecuación diferencial parcial en dos dimensiones

$$\left(p\left(x,y\right)u'\left(x,y\right)\right)' + q\left(x,y\right)u'\left(x,y\right) - r\left(x,y\right)u\left(x,y\right) = f\left(x,y\right) \tag{4.48}$$

$$\text{en } a \leq x \leq b \text{ y } c \leq y \leq d \qquad \text{donde: } u\left(x,y\right) = u_{xy}$$

esta definida en la frontera con condiciones de frontera Dirichlet, Neumann o Robin. Para usar el procedimiento general de solución numérica mediante el método de diferencias finitas, debemos:

1. Generar una malla del dominio, i.e. una malla es un conjunto finito de puntos en los cuales buscaremos la solución aproximada a la ecuación diferencial parcial.

2. Sustituir las derivadas correspondientes con alguna de las formulas de diferencias finitas centradas (véase 10.33 y 10.35 para dos dimensiones, 10.42 y 10.44 para tres dimensiones), en cada punto donde la solución es desconocida para obtener un sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$.

3. Resolver el sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ (véase 11), y así obtener la solución aproximada en cada punto de la malla.

Problema con Condiciones de Frontera Dirichlet Consideremos un caso particular de la Ec.(4.48) definido por la ecuación

$$u_{xx} + u_{yy} = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1 \text{ y } 0 \leq y \leq 1, \qquad u(x,y) = u_{xy} \tag{4.49}$$

con condiciones de frontera Dirichlet. Para usar el procedimiento general de solución numérica mediante el método de diferencias finitas, debemos:

1. Generar una malla homogénea del dominio, sin perdida de generalidad lo supondremos un rectángulo[22]

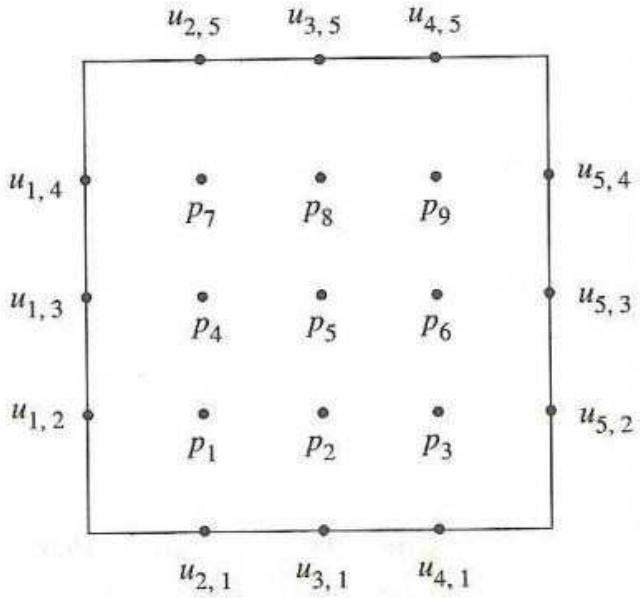


Figura 2: Si suponemos una malla discretizada en $5x5$ nodos, donde 9 serían interiores y 16 de frontera para tener un total de 25 nodos, donde la evaluación de los 9 nodos interiores los denotamos con $p_1, ..., p_9$.

2. Sustituir la derivada con la Ec.(10.35) en cada punto donde la solución es desconocida para obtener un sistema algebraico de ecuaciones. Así,

[22] En el caso de que la malla no sea homogénea, es necesario incluir en la derivada a que h_x (h_{x+} y h_{x-}) y k_y (k_{y+} y k_{y-}) se refiere (como se hizo en una dimensión).

en cada punto x, y de la malla aproximamos la ecuación diferencial por[23]

$$\begin{aligned} u_{xx} &\simeq \frac{u(x_i - \Delta x, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i + \Delta x, y_j)}{\Delta x^2} \\ u_{yy} &\simeq \frac{u(x_i, y_j - \Delta y) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_j + \Delta y)}{\Delta y^2} \end{aligned} \tag{4.50}$$

o en su forma simplificada

$$\begin{aligned} u_{xx} &\simeq \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} \\ u_{yy} &\simeq \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{k^2} \end{aligned} \tag{4.51}$$

definiendo la solución aproximada de $u(x, y)$ en x_i, y_j como u_{ij}, y si suponemos que $h = k$, entonces la formula para la aproximación es

$$\frac{u_{i-1,j} + u_{i+1,j} - 4u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}}{h^2} = 0$$

si suponemos una malla discretizada en $5x5$ nodos, donde 9 serían interiores y 16 de frontera para tener un total de 25 nodos, donde la evaluación de los 9 nodos interiores los denotamos con $p_1, ..., p_9$ tendríamos algo como:

$$\begin{bmatrix} -4p_1 & +p_2 & & +p_4 & & & & & \\ p_1 & -4p_2 & +p_3 & & +p_5 & & & & \\ & p_2 & -4p_3 & & & +p_6 & & & \\ p_1 & & & -4p_4 & +p_5 & & p_7 & & \\ & p_2 & & +p4 & -4p_5 & p_6 & & p_8 & \\ & & p_3 & & +p_5 & -4p_6 & & & p_9 \\ & & & p_4 & & & -4p_7 & p_8 & \\ & & & & p_5 & & +p_7 & -4p_8 & p_9 \\ & & & & & p_6 & & p_8 & -4p_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -u_{2,1} - u_{1,2} \\ -u_{3,1} \\ -u_{4,1} - u_{5,2} \\ -u_{1,3} \\ 0 \\ -u_{5,3} \\ -u_{2,5} - u_{1,4} \\ -u_{3,5} \\ -u_{4,5} - u_{5,4} \end{bmatrix}$$

3 Al resolver el sistema lineal algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{p} = \underline{f}$ (véase apéndice 11), obtenemos la solución aproximada en cada punto interior de la malla. La solución completa al problema la obtenemos agregar los valores de la frontera que eran conocidos.

[23] Notemos que en cada punto de la malla, la aproximación por diferencias finitas supone la solución de cinco puntos de la malla. El conjunto de estos puntos de la malla es comúnmente llamado el esténcil de diferencias finitas en dos dimensiones.

4.3.1 Procedimiento General para Programar MDF

Como para casi todo problema no trivial que se desee programar, en necesario tener claro el procedimiento matemático del problema en cuestión. A partir de los modelos matemáticos y los modelos numéricos se plasmará el modelo computacional en algún lenguaje de programación usando algún paradigma de programación soportado por el lenguaje seleccionado.

En particular, para programar el método de Diferencias Finitas que no es un problema trivial, debemos empezar seleccionando la ecuación diferencial parcial más sencilla, con una malla lo más pequeña posible pero adecuada a la dimensión de nuestro problema, esto nos facilitará hacer los cálculos entendiendo a cabalidad el problema. Además de esta forma podemos encontrar errores lógicos, conceptuales, de cálculo en las derivadas, ensamble en las matrices y solución del sistema lineal $Ax = b$ asociado, de otra forma se esta complicando innecesariamente el proceso de programación y depuración. Además tratar de rastrear errores sin tener primero claro los cálculos a los que debe llegar el programa es una complicación innecesaria.

Este procedimiento sirve tanto para *1D, 2D o 3D*, pero lo recomendable es iniciar en *1D* para adquirir la pericia necesaria para las dimensiones mayores, mediante el siguiente procedimiento:

a) Supondremos la ecuación diferencial parcial más sencilla, la ecuación de Poisson, con condiciones de frontera Dirichlet, definido en Ω como:

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u &= f_\Omega \text{ en } \Omega \\ u &= g_{\partial\Omega} \text{ en } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{4.52}$$

b) Generar la matriz correspondiente y compararla con la calculada por nosotros

c) Si la matriz es correcta, ahora usar una ecuación no homogénea constante para calcular el vector asociado y compararlo con lo calculado por nosotros, de ser necesario ahora podemos cambiar a una función del lado derecho cualquiera

d) En la malla homogénea más sencilla aplicable a la dimensión del problema —para *1D* una malla de 3 nodos, para *2D* una malla de *3x3* nodos y para *3D* una malla de *3x3x3* nodos— ahora podemos hacer el ensamble de la matriz global A y el vector b y compararla con la calculada por nosotros

e) Si es correcto el ensamble ahora podemos variar las dimensiones de nuestro dominio y la cantidad de nodos usados en la descretización —en *2D*

ahora podemos usar una malla del tipo *2x3* y *3x2*, algo similar en *3D* se puede hacer— para validar el ensamble correcto de la matriz, superado este punto ahora podemos ampliar la malla y ver que el ensamble se mantiene bien hecho —en *2D* la malla mínima adecuada es *3x3* nodos, en *3D* será de *3x3x3* nodos—

f) Regresando a la malla mínima aplicable a la dimensión del problema, ahora solucionar el sistema $Ax = b$ por inversa y revisar que concuerde con la solución calculada por nosotros. Si es correcta, ahora podemos usar algún método del tipo *CGM* o *GMRES* según sea simétrica o no simétrica la matriz A

g) Si contamos con la solución analítica de alguna ecuación, ahora podemos calcular la solución numérica por MDF para distintas mallas y compararla con la analítica y poder ver si la convergencia es adecuada al aumentar la malla

h) llegando a este punto, podemos ahora ampliar los términos de la ecuación diferencial parcial y bastará con revisar que la matriz y vector asociada sea bien generada para tener certeza de que todo funcionará.

4.4 Las Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes reciben su nombre de los físicos Claude Louis Navier y George Gabriel Stokes (Francés e Irlandés respectivamente), quienes aplicaron los principios de la mecánica y termodinámica, resultando las ecuaciones en derivadas parciales no lineales que logran describir el comportamiento de un fluido. Estas ecuaciones no se concentran en una posición sino en un campo de velocidades, más específicamente en el flujo de dicho campo, lo cual es la descripción de la velocidad del fluido en un punto dado en el tiempo y en el espacio.

Cuando se estudia la dinámica de fluidos se consideran los siguientes componentes:

- $\overrightarrow{\mu}$, este término se usa para definir la velocidad del fluido
- ρ, este término se relaciona con la densidad del fluido
- p, este término hace referencia con la presión o fuerza por unidad de superficie que el fluido ejerce

- g, este término se relaciona con la aceleración de la gravedad, la cuál esta aplicada a todo el cuerpo, en determinados casos la gravedad no es la única fuerza ejercida sobre el cuerpo, por tal razón se toma como la sumatoria de fuerzas externas
- v, este término hace referencia a la viscosidad cinemática

La ecuación de Navier-Stokes general es

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v\right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbb{T} + f \tag{4.53}$$

el término $\mathbb{T}$, expresa el tensor de estrés para los fluidos y condensa información acerca de las fuerzas internas del fluido. Supondremos al fluido incompresible cuyo campo de velocidades $\overrightarrow{\mu}$ satisface la condición $\nabla \cdot \overrightarrow{\mu} = 0$, por tal razón el tensor de estrés se reduce a $\nabla^2 \overrightarrow{\mu}$, dando como resultado la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \overrightarrow{\mu}}{\partial t} + \overrightarrow{\mu} \cdot \nabla \overrightarrow{\mu} + \frac{1}{\rho}\nabla p = g + v\nabla^2 \overrightarrow{\mu} \tag{4.54}$$

bajo la condición

$$\nabla \overrightarrow{\mu} = 0 \tag{4.55}$$

que garantiza la incompresibilidad del campo de velocidad sí la densidad permanece constante en el tiempo.

Así, las ecuaciones simplificadas de Navier-Stokes quedan como

$$\frac{\partial \overrightarrow{\mu}}{\partial t} = -\left(\overrightarrow{\mu}\nabla\right)\overrightarrow{\mu} + v\nabla^2 \overrightarrow{\mu} + f \tag{4.56}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\overrightarrow{\mu}\nabla\right)\rho + \kappa\nabla^2\rho + S \tag{4.57}$$

donde la primera ecuación describe la velocidad y la segunda hace referencia a la densidad a través de un campo vectorial. Estas ecuaciones son no lineales y no se conoce solución analítica a dicho problema.

La Solución Numérica de las Ecuaciones de Navier-Stokes La solución numérica de las ecuaciones (4.56, 4.57) partiendo del estado inicial $\overrightarrow{\mu}_0$ del campo de velocidad y el primer instante de tiempo $t = 0$, se busca estudiar su comportamiento para el tiempo $t > 0$. Si $\overrightarrow{\omega}_0$ es la estimación del campo vectorial en el instante t y $\overrightarrow{\omega}_4$ denota el campo vectorial de velocidades en el instante de tiempo $t + \Delta t$. Jos Stam (véase [57]) propone una solución numérica a partir de la descomposición de la ecuación de distintos términos y solucionando cada uno individualmente. Así, la solución de cada paso se construye a partir del paso anterior. La solución en el tiempo $t + \Delta t$, esta dada por el campo de velocidades $u(x, t + \Delta t) = \overrightarrow{\omega}_4$, la solución se obtiene iterando estos cuatro pasos:

1. Sumatoria de Fuerzas
2. Paso de Advección
3. Paso de Difusión
4. Paso de Proyección

i.e. $\overrightarrow{\omega}_0 \overset{1}{\rightarrow} \overrightarrow{\omega}_1 \overset{2}{\rightarrow} \overrightarrow{\omega}_2 \overset{3}{\rightarrow} \overrightarrow{\omega}_3 \overset{4}{\rightarrow} \overrightarrow{\omega}_4$

Sumatoria de Fuerzas La manera más práctica para incorporar la sumatoria de fuerzas externas f, se obtiene asumiendo que la fuerza no varía de manera considerable en un paso de tiempo. Bajo este supuesto, utilizando el método de Euler progresivo para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (teniendo en cuenta que la velocidad y la fuerza estan relacionadas mediante la segunda ley de Newton), tenemos que

$$\overrightarrow{\omega}_1(x) = \overrightarrow{\omega}_0(x) + \Delta t f(x, t). \tag{4.58}$$

Paso de Advección Una perturbación en cualquier parte del fluido se propaga de acuerdo a la expresión

$$-(\overrightarrow{\mu} \cdot \nabla)\overrightarrow{\mu} \tag{4.59}$$

este término hace que la ecuación de Navier-Stokes sea no lineal, de aplicarse el método de Diferencias Finitas, éste es estable sólo cuando Δt sea suficientemente pequeño tal que $\Delta t < \Delta h / |u|$, donde Δh es el menor incremento

de la malla de discretización, para prevenir esto, se usa el método de las características. Este dice que una ecuación de la forma

$$\frac{\partial \alpha(x,t)}{\partial t} = -v(x)\nabla\alpha(x,t) \tag{4.60}$$

y

$$\alpha(x,t) = \alpha_0(x) \tag{4.61}$$

como las características del vector del campo v, que fluye a través del punto x_0 en $t = 0$, i.e.

$$\frac{d}{dt}p(x_0,t) = v(p(x_0,t)) \tag{4.62}$$

donde

$$p(x_0,0) = x_0. \tag{4.63}$$

De modo tal que $\alpha(x_0,t) = \alpha\left(p(x_0,t),t\right)$, es el valor del campo que pasa por el punto x_0 en $t = 0$. Para calcular la variación de esta cantidad en el tiempo se usa la regla de la cadena

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{\partial\alpha}{\partial t} + v\nabla\alpha = 0 \tag{4.64}$$

que muestra que el valor de α no varía a lo largo de las líneas del flujo. En particular, se tiene que $\alpha(x_0,t) = \alpha(x_0,0) = \alpha_0(x_0)$; por lo tanto en el campo inicial de las líneas de flujo, en el sentido inverso se puede estimar el siguiente valor de α en x_0, esto es $\alpha\left(x_0, t+\Delta t\right)$.

Este método muestra en cada paso del tiempo, como las partículas del fluido se mueven por la velocidad del propio fluido. Por lo tanto, para obtener la velocidad en un punto x en el tiempo $t + \Delta t$, se regresa al punto x por el campo de velocidades $\overrightarrow{\omega}_1$ en el paso del tiempo Δt. Esta define una ruta $p(x,s)$ correspondiente a la trayectoria parcial del campo de velocidades. La nueva velocidad en el punto x, es entonces la velocidad de la partícula ahora en x que tenía su ubicación anterior en el tiempo Δt. De esta manera, se puede hallar el valor de la velocidad luego de la advección $\overrightarrow{\omega}_2$ resolviendo el problema

$$\overrightarrow{\omega}_2(x) = \overrightarrow{\omega}_1(p(x,-\Delta t)) \tag{4.65}$$

la ventaja que se obtiene interpolando linealmente entre valores adyacentes de este método es su estabilidad numérica. Ya conocida la velocidad en el instante t, la viscosidad del fluido y su naturaleza, obligan un proceso difusivo: la velocidad se propaga dentro del fluido, o bien en las partículas de este fluyen.

Paso de Difusión Este paso es para resolver el efecto de la viscosidad y es equivalente a la ecuación de difusión

$$\frac{\partial \overrightarrow{\omega}_2(x)}{\partial t} = \nu \nabla^2 \overrightarrow{\omega}_2(x) \tag{4.66}$$

esta es una ecuación para la cual se han desarrollado varios procedimientos numéricos. La forma más sencilla para resolver esta ecuación es discretizar el operador difusión ∇^2 y usar una forma explícita en el incremento del tiempo, sin embargo este método es inestable cuando la viscosidad es grande. Por ello una mejor opción es usar un método implícito para la ecuación

$$\left(\mathcal{I} - \nu \Delta t \nabla^2\right) \overrightarrow{\omega}_3(x) = \overrightarrow{\omega}_2(x) \tag{4.67}$$

donde $\mathcal{I}$ es el operador identidad.

Paso de Proyección Este último paso conlleva la proyección, que hace que resulte un campo libre de divergencia. Esto se logra mediante la solución del problema definido por

$$\nabla^2 q = \nabla \cdot \overrightarrow{\omega}_3(x) \qquad \text{y} \qquad \overrightarrow{\omega}_4(x) = \overrightarrow{\omega} 3(x) - \nabla q \tag{4.68}$$

es necesario utilizar, según sea el caso, aquel método numérico que proporcione una solución correcta y eficiente a la ecuación de Poisson, esto es especialmente importante cuando hay vórtices en el fluido.

5 Paralelización del Método de Diferencias Finitas

La solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales por los esquemas tradicionales —tipo Diferencias Finitas, Volumen Finito y Elemento Finito— reducen el problema a la generación y solución de un —cada vez más grande— sistema algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$ (véase [4]). La factorización directa de sistemas de gran escala $O(10^6)$ con toda su eficacia, no es, en general una opción viable, y el uso de métodos iterativos básicos —tales como el método de gradiente conjugado o residual mínimo generalizado— resultan en una convergencia bastante lenta —al ser algoritmos secuenciales— con respecto a otras formas de discretización como son los métodos de descomposición de dominio (véase [7] y [9]).

El desarrollo de métodos numéricos para sistemas algebraicos grandes, es central en el desarrollo de códigos eficientes para la solución de problemas en Ciencia e Ingeniería, actualmente cuando se necesita implementar una solución computacional, se dispone de bibliotecas optimizadas[24] para la solución de sistemas lineales que pueden correr en ambientes secuenciales y/o paralelos. Estas bibliotecas implementan métodos algebraicos robustos para muchos problemas prácticos, pero sus discretizaciones no pueden ser construidas por sólo técnicas algebraicas simples, tales como aproximaciones a la inversa o factorización incompleta.

En la actualidad, los sistemas computacionales paralelos son ubicuos. En ellos es posible encontrar más de una unidad de procesamiento, conocidas como Núcleo (Core). El número de Cores es creciente conforme avanza la tecnología, esto tiene una gran importancia en el desarrollo eficiente de algoritmos que resuelvan sistemas algebraicos en implementaciones paralelas. Actualmente la gran mayoría de los algoritmos desarrollados son algoritmos secuenciales y su implantación en equipos paralelos no es óptima, pero es una práctica común usar diversas técnicas de seudoparalelización —a veces mediante la distribución de una gran matriz en la memoria de los múltiples Cores y otras mediante el uso de directivas de compilación—, pero la eficiencia resultante es pobre y no escalable a equipos masivamente paralelos por la gran cantidad de comunicación involucrada en la solución.

[24] Como pueden ser las bibliotecas ATLAS —http://math-atlas.sourceforge.net— y HYPRE —https://computation.llnl.gov/projects/hypre-scalable-linear-solvers-multigrid-methods/software— entre muchas otras.

Para hacer eficiente la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, se introdujeron los métodos de descomposición de dominio que toman en cuenta la ecuación diferencial parcial y su discretización, permitiendo una alta eficiencia computacional en diversas arquitecturas paralelas (véase [7] y [9]). La idea básica detrás de los métodos de descomposición de dominio es que en lugar de resolver un enorme problema sobre un dominio, puede ser conveniente —o necesario— resolver múltiples problemas de tamaño menor sobre un solo subdominio un cierto número de veces. Mucho del trabajo en la descomposición de dominio se relaciona con la selección de subproblemas que aseguren que la razón de convergencia del nuevo método iterativo sea rápida. En otras palabras, los métodos de descomposición de dominio proveen precondicionadores a priori que puedan acelerarse por métodos en el espacio de Krylov (véase [23]).

La descomposición de dominio generalmente se refiere a la separación de una ecuación diferencial parcial o una aproximación de ella dentro de problemas acoplados sobre subdominios pequeños formando una partición del dominio original. Esta descomposición puede hacerse a nivel continuo, donde diferentes modelos físicos, pueden ser usados en diferentes regiones, o a nivel discreto, donde puede ser conveniente el empleo de diferentes métodos de aproximación en diferentes regiones, o en la solución del sistema algebraico asociado a la aproximación de la ecuación diferencial parcial —estos tres aspectos estan íntimamente interconectados en la práctica (véase [23])—.

Los método de descomposición de dominio —Domain Decomposition Methods (DDM)— se basan en la suposición de que dado un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, se puede particionar en E subdominios $\Omega_i, i = 1, 2, ..., E$; tales que $\Omega = \left(\bigcup_{i=1}^{E} \Omega_i \right)$, entre los cuales puede o no existir traslape (véase [4] y [23]). Entonces, el problema es reformulado en términos de cada subdominio —mediante el uso de algún método de discretización— obteniendo una familia de subproblemas de tamaño reducido independientes entre sí, y que estan acoplados a través de la solución en la interfase —que es desconocida— de los subdominios.

De esta manera, se puede clasificar de forma burda a los métodos de descomposición de dominio (véase [7]), como aquellos en que: existe traslape entre los subdominios y en los que no existe traslape. A la primera clase pertenece el método de Schwarz —en el cual el tamaño del traslape es importante en la convergencia del método— y a los de la segunda clase pertenecen

los métodos del tipo subestructuración —en el cual los subdominios sólo tienen en común a los nodos de la interfase o frontera interior—.

Desde hace algún tiempo, la comunidad internacional[25] inicio el estudio intensivo de los métodos de descomposición de dominio, la atención se ha desplazado (véase [10]) de los métodos con traslape en el dominio (véase [54]) a los métodos sin traslape en el dominio (véase [47], [48], [49], [50] y [51]), ya que estos últimos son más efectivos para una gran variedad de problemas de la Ciencia e Ingeniería.

Los métodos de descomposición de dominio sin traslape son un paradigma natural usado por la comunidad de modeladores (véase [1]). Los sistemas físicos son descompuestos en dos o más subdominios contiguos basados en consideraciones fenomenológicas o computacionales. Esta descomposición se refleja en la Ingeniería de Software del código correspondiente, además, el uso de la programación orientada a objetos, permite dividir en niveles la semántica de los sistemas complejos, tratando así con las partes, más manejables que el todo, permitiendo una implementación, extensión y mantenimiento sencillo (véase [21]).

Tomando en cuenta que los métodos de descomposición de dominio sin traslape son fácilmente implementados para su uso en computadoras paralelas mediante técnicas de programación orientada a objetos —porqué el algoritmo del método es paralelo–, además, con los continuos avances en cómputo, en particular, en la computación en paralelo mediante equipos de cómputo de alto desempeño y/o Clusters parecen ser el mecanismo más efectivo para incrementar la capacidad y velocidad de resolución de varios tipos de problemas de interés en Ciencias e Ingenierías usando métodos de descomposición de dominio (véase [48], [49], [50], [52] y [53]).

La implementación de los métodos de descomposición de dominio permite utilizar de forma eficiente, las crecientes capacidades del cómputo en paralelo (véase [22] y [23]) —Grids[26] de decenas de Clusters, cada uno con cientos o

[25] Ello se refleja en las más de 19 conferencias internacionales de Métodos Descomposición de Dominio (véase [22]) y de las cuales se han publicado 14 libros que recopilan los trabajos más relevantes de cada conferencia. Además de varios mini simposios de descomposición de dominio en congresos mundiales como es el World Congress on Computational Mechanics o el Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering.

[26] Bajo el Macroproyecto: Tecnologías para la Universidad de la Información y la Computación de la UNAM, se interconectaron cuatro Cluster heterogéneos —dos en la Facultad de Ciencias, uno en el Instituto de Geofísica y otro en el Instituto de Matemáticas Aplicadas y Sistemas— con redes no dedicadas y en ellos se probo una versión de los códigos, en los cuales se vio que es factible el uso en Grids y si estos cuentan con una red dedicada

miles de procesadores interconectados por red, con un creciente poder de cómputo medible en petaFlops—, así como el uso de una amplia memoria —ya sea distribuida y/o compartida del orden de TeraBytes—, permitiendo atacar una gran variedad de problemas que sin estas técnicas es imposible hacerlo de manera flexible y eficiente. Pero hay que notar que existe una amplia gama de problemas que se necesitan resolver, los cuales superan la capacidad de cómputo actual, ya sea por el tiempo requerido para su solución, por el consumo excesivo de memoria o ambos.

Así, los métodos de descomposición de dominio que introducen desde la formulación matemática del problema una separación natural de las tareas a realizar y simplifican considerablemente la transmisión de información entre los subdominios (véase [23]), en conjunción con la programación orientada a objetos y el cómputo en paralelo forman una amalgama poderosa. La cual permite construir aplicaciones que coadyuven en la solución una gran gama de problemas concomitantes en Ciencias e Ingenierías que requieren hacer uso de una gran cantidad de grados de libertad.

Por otro lado, la lista de los métodos de descomposición de dominio y el tipo de problemas que pueden ser atacados por estos, es grande y esta en constante evolución (véase [22] y [23]), ya que se trata de encontrar un equilibrio entre la complejidad del método —aunada a la propia complejidad del modelo—, la eficiencia en el consumo de los recursos computacionales y la precisión esperada en la solución encontrada por los diversos métodos y las arquitecturas paralelas en la que se implante.

5.1 Métodos de Descomposición de Dominio

Los métodos de descomposición de dominio son un paradigma natural usado por la comunidad de modeladores. Los sistemas físicos son descompuestos en dos o más subdominios contiguos basados en consideraciones fenomenológicas. Estas descomposiciones basadas en dominios físicos son reflejadas en la ingeniería de software del código correspondiente.

Los métodos de descomposición de dominio permiten tratar los problemas de tamaño considerable, empleando algoritmos paralelos en computadoras secuenciales y/o paralelas. Esto es posible ya que cualquier método de descomposición de dominio se basa en la suposición de que dado un dominio computacional Ω, este se puede particionar en subdominios $\Omega_i, i = 1, 2, ..., E$

—de alta velocidad— su eficiencia puede llegar a ser alta.

entre los cuales puede o no existir traslape. Entonces el problema es reformulado en términos de cada subdominio (empleando algún método del tipo Diferencias Finitas o Elemento Finito) obteniendo una familia de subproblemas de tamaño reducido independientes en principio entre sí, que estan acoplados a través de la solución en la interfaz de los subdominios que es desconocida.

De esta manera, podemos clasificar de manera burda a los métodos de descomposición de dominio, como aquellos en que existe traslape entre los subdominios y en los que no existe traslape. A la primera clase pertenece el método de Schwarz (en el cual el tamaño del traslape es importante en la convergencia del método) y a los de la segunda clase pertenecen los métodos del tipo subestructuración (en el cual los subdominios sólo tienen en común los nodos de la frontera interior).

La computación en paralelo es una técnica que nos permite distribuir una gran carga computacional entre muchos procesadores. Y es bien sabido que una de las mayores dificultades del procesamiento en paralelo es la coordinación de las actividades de los diferentes procesadores y el intercambio de información entre los mismos [19] mediante el paso de mensajes.

Así, mediante los métodos de descomposición de dominio, la programación orientada a objetos y esquemas de paralelización que usan el paso de mensajes, es posible construir aplicaciones que coadyuven a la solución de problemas concomitantes en Ciencia e Ingeniería, ya que permiten utilizar todas las capacidades del cómputo en paralelo (supercomputadoras, clusters o grids), de esta forma es posible atacar una gran variedad de problemas que sin estas técnicas es imposible hacerlo de manera flexible y eficiente.

Pero hay que notar que existe una amplia gama de problemas que nos interesa resolver, que superan las capacidades de cómputo actuales, ya sea por el tiempo requerido para su solución, por el consumo excesivo de memoria o ambos.

La lista de los métodos de descomposición de dominio y el tipo de problemas que pueden ser atacados por estos, es grande y esta en constante evolución, ya que se trata de encontrar un equilibrio entre la complejidad del método (aunada a la propia complejidad del modelo), la eficiencia en el consumo de los recursos computacionales y la precisión esperada en la solución encontrada por los diversos métodos y las arquitecturas paralelas en la que se implante.

A continuación describiremos algunos de estos métodos generales. En este capítulo se considerarán problemas con valor en la frontera (BVP) de la

forma

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= f \quad \text{en } \Omega \\ u &= g \quad \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \tag{5.1}$$

donde

$$\mathcal{L}u = -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \cdot \nabla u + cu \tag{5.2}$$

como un caso particular del operador elíptico de orden dos.

5.2 Método de Schwarz

El método fue desarrollado por Hermann Amandus Schwarz en 1869 (no como un método de descomposición de dominio), ya que en esos tiempos los matemáticos podían resolver problemas con geometrías sencillas de manera analítica, pero no tenían una idea clara de como poder resolver problemas que involucraran el traslape de esas geometrías sencillas. Como se conocía la solución para las geometrías sencillas por separado, la idea de Schwarz fue usar estas para conocer la solución en la geometría resultante al tener traslape, para más detalle ver [4].

Para describir el método, consideremos primero un dominio Ω que esta formado de dos subdominios Ω_1 y Ω_2 traslapados, es decir $\Omega_1 \cap \Omega_2 \neq \varnothing$, entonces $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ y denotemos a $\Sigma_1 = \partial\Omega_1 \cap \Omega_2$, $\Sigma_2 = \partial\Omega_2 \cap \Omega_1$ y $\Omega_{1,2} = \Omega_1 \cap \Omega_2$, como se muestra en la figura para dos dominios distintos:

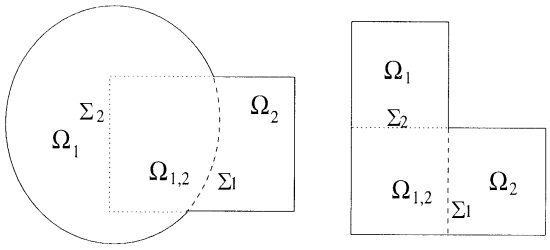


Figura 3: Dominio Ω subdividido en dos subdominios Ω_1 y Ω_2.

La forma original del método iterativo de Schwarz conocido como métodos alternantes de Schwarz, consiste en resolver sucesivamente los siguientes problemas.

Sea u^o una función de inicialización definida en Ω, que se nulifica en $\partial\Omega$, además hacemos $u_1^0 = u^0_{|\Omega_1}$ y $u_2^0 = u^0_{|\Omega_2}$. Para $k \geq 0$ definimos dos sucesiones u_1^{k+1} y u_2^{k+1} para resolver respectivamente

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_1^{k+1} = f \quad \text{en } \Omega_1 \\ u_1^{k+1} = u_2^k \quad \text{en } \Sigma_1 \\ u_1^{k+1} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega \end{cases} \tag{5.3}$$

y

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_2^{k+1} = f \quad \text{en } \Omega_2 \\ u_2^{k+1} = u_1^{k+1} \quad \text{en } \Sigma_2 \\ u_2^{k+1} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega \end{cases} \tag{5.4}$$

resolviendo los problemas secuencialmente en cada subdominio (por ejemplo con el método de Diferencias Finitas o Elemento Finito). Este método se conoce como Schwarz multiplicativo.

El método alternante de Schwarz dado por las Ecs. (5.3) y (5.4) converge a la solución u de (5.1) si suponemos alguna suavidad en los subdominios Ω_1 y Ω_2, ya que existen constantes C_1 y $C_2 \in (0,1)$ tal que para todo $k \geq 0$ se tiene

$$\begin{aligned} \left\| u_{|\Omega_1} - u_1^{k+1} \right\|_{L^\infty(\Omega_1)} &\leq C_1^k C_2^k \left\| u - u^0 \right\|_{L^\infty(\Sigma_1)} \\ \left\| u_{|\Omega_2} - u_2^{k+1} \right\|_{L^\infty(\Omega_2)} &\leq C_1^{k+1} C_2^k \left\| u - u^0 \right\|_{L^\infty(\Sigma_2)} \end{aligned} \tag{5.5}$$

las constantes C_1 y C_2 de reducción de error deben de estar bastante cerca de 1 si la región de traslape $\Omega_{1,2}$ es delgada, la prueba de esta estimación puede encontrarse en [2].

Por otro lado, teniendo el conjunto $u_1^0 = u^0_{|\Omega_1}$ y $u_2^0 = u^0_{|\Omega_2}$, podemos generar dos pasos independientes uno de otro

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_1^{k+1} = f \quad \text{en } \Omega_1 \\ u_1^{k+1} = u_2^k \quad \text{en } \Sigma_1 \\ u_1^{k+1} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega \end{cases} \tag{5.6}$$

y

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_2^{k+1} = f \quad \text{en } \Omega_2 \\ u_2^{k+1} = u_1^k \quad \text{en } \Sigma_2 \\ u_2^{k+1} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega \end{cases} \tag{5.7}$$

resolviendo los problemas en paralelo de cada subdominio (por ejemplo con el método de Diferencias Finitas o Elemento Finito). Este método se conoce como Schwarz aditivo.

La convergencia de este método en general requiere de algunas hipótesis adicionales, pero si converge, el número de iteraciones necesarias para converger será del doble que el método Schwarz multiplicativo.

La generalización del método de Schwarz en el caso en que Ω es particionada en $E > 2$ subdominios traslapados puede describirse como sigue:

Descomponiendo el dominio Ω en E subdominios Ω_e con traslape como por ejemplo, la descomposición siguiente

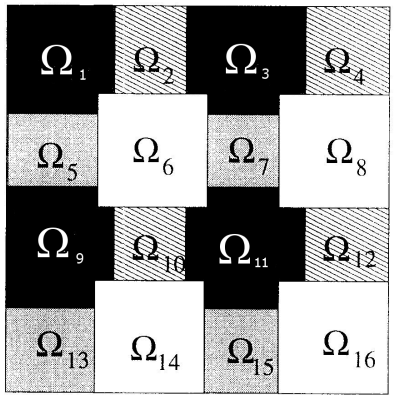


Figura 4: Descomposición de Ω en múltiples subdominios con traslape para el método de Schwarz.

Entonces para resolver el problema por el método de Schwarz, primeramente es necesario definir los siguientes subespacios del espacio de Sóbolev $H^1(\Omega)$, en ellos estarán definidas las funciones usadas en el desarrollo del método

$$\begin{aligned} V_i &= \left\{ v_i \in H^1(\Omega_i) \mid v_{|\partial\Omega \cap \partial\Omega_i} = 0 \right\} \\ V_i^0 &= H_0^1(\Omega_i) \\ V_i^* &= \left\{ v \in H_0^1(\Omega) \mid v = 0 \text{ en } \Omega \backslash \bar{\Omega}_i \right\}. \end{aligned}$$

Denotaremos por I al operador identidad, por $J_i, i = 1, ...E$ la inmersión de V_i^* sobre V (i.e. $J_i v = v$ para toda $v \in V_i^*$), y por $J_i^T : H_0^1(\Omega_i) \to V_i^*$ al transpuesto del operador J_i definido por

$$\left\langle J_i^T F, v \right\rangle = \left\langle F, J_i v \right\rangle, \quad \forall F \in V^{'}, v \in V_i^*. \tag{5.8}$$

y definimos

$$P_i = J_i P_i^* : H_0^1(\Omega_i) \to H_0^1(\Omega_i).$$

Sea $\mathcal{L}_i : V_i^0 \to \left(V_i^0\right)'$ la restricción del operador $\mathcal{L}$ al subespacio V_i^0, definido como

$$\langle \mathcal{L}_i w_i, v_i \rangle = a\left(w_i, v_i\right) \text{ para toda } w_i, v_i \in V_i^0$$

y como un operador de extensión $\rho_i^T : V_i^0 \to V_i^*$ definido como

$$\rho_i^T v_i = \tilde{v}_i \text{ para toda } v_i \in V_i^0 \tag{5.9}$$

y el transpuesto del operador restricción $\rho_i : (V_i^*)' \to (V_i^0)'$ como

$$\langle \rho_i G, v_i \rangle = \left\langle G, \rho_i^T v_i \right\rangle, \text{para toda } G \in (V_i^*)', v_i \in V_i^0. \tag{5.10}$$

De lo anterior se tiene que

$$\mathcal{L}_i = \rho_i J_i^T \mathcal{L} J_i \rho_i^T$$

y

$$P_i = J_i P_i^* : V \to V \text{ para } i = 1, ..., E. \tag{5.11}$$

Entonces el método Multiplicativo de Schwarz queda como

$$u^{k+\frac{i}{E}} = (I - P_i) u^{k+\frac{i-1}{E}} + J_i \rho_i^T \mathcal{L}_i^{-1} \rho_i J_i^T f \tag{5.12}$$

para $i = 1, 2, ..., E$ y

$$u^{k+1} = \left(I - \sum_{i=1}^{E} P_i \right) u^k + \sum_{i=1}^{M} J_i \rho_i^T \mathcal{L}_i^{-1} \rho_i J_i^T f \tag{5.13}$$

y la correspondiente ecuación de error como

$$u - u^{k+1} = (I - P_m) \ldots (I - P_1)(u - u^k). \tag{5.14}$$

El el método Aditivo de Schwarz queda como

$$u - u^{k+1} = \left(I - \sum_{i=1}^{E} P_i \right) \left(u - u^k \right) \tag{5.15}$$

y la correspondiente ecuación de error como

$$u - u^{k+1} = (I - P_m) \ldots (I - P_1)(u - u^k). \tag{5.16}$$

Observaciones:

• La precisión del método depende fuertemente del número de iteraciones realizadas en el proceso iterativo y converge a la precisión usada en la solución de cada subdominio en el mejor de los casos.

• El método aditivo de Schwarz es secuencial, en el caso del método multiplicativo de Schwarz es paralelizable pero tiene una parte serial importante en el algoritmo y su convergencia no es la óptima en esta formulación, pero existen variantes del método que permiten remediar esto, para más detalles ver [3], [7] y [9].

• Hay que notar que por cada subdominio (supóngase n) y en cada iteración (supóngase I) se resuelve un problema para cada Ω_i, esto significa que si se usa el método de Diferencias Finitas o Elemento Finito para resolver el problema local donde se usen en promedio r iteraciones para resolver el sistema lineal (no tomando en cuenta el costo invertido en generar las matrices), el total de iteraciones necesarias para resolver el problema en el dominio Ω será $r * n * I$, resultando muy costoso computacionalmente con respecto a otros métodos de descomposición de dominio.

5.3 Método de Descomposición de Dominio de Subestructuración (DDM)

La solución numérica por los esquemas tradicionales de discretización tipo Diferencias Finitas y Elemento Finito generan una discretización del problema, la cual es usada para generar un sistema de ecuaciones algebraicos $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$. Este sistema algebraico en general es de gran tamaño para problemas reales, al ser estos algoritmos secuenciales, su implantación suele hacerse en equipos secuenciales y por ello no es posible resolver muchos problemas que involucren el uso de una gran cantidad de memoria, actualmente para tratar de subsanar dicha limitante, se usa equipo paralelo para soportar algoritmos secuenciales, haciendo ineficiente su implantación en dichos equipos.

Los métodos de descomposición de dominio son un paradigma natural usado por la comunidad de modeladores. Los sistemas físicos son descompuestos en dos o más subdominios contiguos basados en consideraciones fenomenológicas. Estas descomposiciones basadas en dominios físicos son reflejadas en la Ingeniería de Software del código correspondiente.

Los métodos de descomposición de dominio permiten tratar los problemas de tamaño considerable, empleando algoritmos paralelos en computadoras secuenciales y/o paralelas. Esto es posible ya que cualquier método de descomposición de dominio se basa en la suposición de que dado un dominio computacional Ω, este se puede particionar –triangular– en E subdominios $\Omega_\alpha, \alpha = 1, 2, ..., E$ entre los cuales no existe traslape. Entonces el problema es reformulado en términos de cada subdominio (empleando por ejemplo algún método tipo Diferencias Finitas o Elemento Finito) obteniendo una familia de subproblemas de tamaño reducido independientes en principio entre sí, que estan acoplados a través de la solución en la interfaz de los subdominios que es desconocida [5], [4], [9] y [11], uno de los primeros Métodos de Descomposición de Dominio sin traslape es el de Subestructuración —mejor conocido como Schur— y el cual es la base los métodos más comúnmente usados como son FETI-DP, BDDC y el propio DVS-DDM.

En esta sección y sin perdida de generalidad se considerarán problemas con valor en la frontera (BVP) de la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= f \quad \text{en } \Omega \\ u &= g \quad \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \tag{5.17}$$

donde

$$\mathcal{L}u = -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \cdot \nabla u + cu \tag{5.18}$$

con $\underline{\underline{a}}$ una matriz positiva definida, simétrica y $c \geq 0$, como un caso particular del operador elíptico de orden 2 y para ejemplificar tomaremos un dominio $\Omega \subset R^2$ con fronteras poligonales, es decir, Ω es un conjunto abierto acotado y conexo tal que su frontera $\partial\Omega$ es la unión de un número finito de polígonos.

Un ejemplo de un dominio Ω y su descomposición en subdominios Ω_i y cada Ω_i a su vez descompuesto en Ω_e subdominios se muestra en la figura:

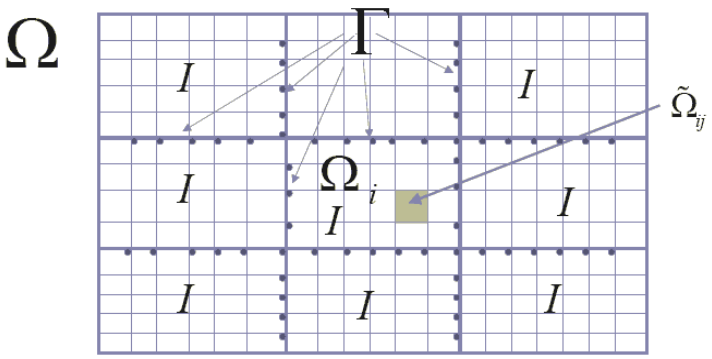


Figura 5: Dominio Ω descompuesto en una partición gruesa de 3×3 y cada subdominio Ω_i en una partición fina de 7×5.

Consideremos el problema dado por la Ec. (5.17) en el dominio Ω, el cual es subdividido en E subdominios Ω_i, $i = 1, 2, ..., E$ sin traslape, también conocida como malla gruesa $\mathcal{T}_H$, es decir

$$\Omega_i \cap \Omega_j = \varnothing \quad \forall i \neq j \quad \text{y} \quad \overline{\Omega} = \bigcup_{i=1}^{E} \overline{\Omega}_i, \tag{5.19}$$

y al conjunto

$$\Gamma = \bigcup_{i=1}^{E} \Gamma_i, \quad \text{si } \Gamma_i = \partial\Omega_i \backslash \partial\Omega \tag{5.20}$$

lo llamaremos la frontera interior del dominio Ω, denotamos por H al diámetro $H_i = Diam(\Omega_i)$ de cada Ω_i que satisface $Diam(\Omega_i) \leq H$ para cada $i = 1, 2, ..., E$, además, cada subdominio Ω_i es descompuesto en un mallado fino

$\mathcal{T}_h$ de K subdominios mediante una triangulación Ω_e de modo que esta sea conforme, denotamos por h al diámetro $h_i = Diam(\Omega_e)$ de cada Ω_e que satisface $Diam(\Omega_e) \leq h$ para cada $e = 1, 2, ..., K$ de cada $i = 1, 2, ..., E$.

Sin perdida de generalidad tomemos $g = 0$ en $\partial\Omega$, notemos que siempre es posible poner el problema de la Ec. (5.17) como uno con condiciones de frontera Dirichlet que se nulifiquen mediante la adecuada manipulación del término del lado derecho de la ecuación.

Sea $D \subset H_0^1(\Omega)$ un espacio lineal de funciones de dimensión finita N, en el cual este definido un producto interior denotado para cada $u, v \in D$ por

$$u \cdot v = \langle u, v \rangle \tag{5.21}$$

Considerando la existencia de los subconjuntos linealmente independientes

$$\begin{array}{c} \mathcal{B} \subset \tilde{D}, \mathcal{B}_I \subset \tilde{D}_I, \mathcal{B}_\Gamma \subset \tilde{D}_\Gamma \\ \mathcal{B}_\Gamma \subset \tilde{D}_\Gamma, \mathcal{B}_{\Gamma J} \subset \tilde{D}_{\Gamma 1}, \mathcal{B}_{\Gamma M} \subset \tilde{D}_{\Gamma 2} \end{array} \tag{5.22}$$

los cuales satisfacen

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}_I \cup \mathcal{B}_\Gamma \text{ y } \bar{\mathcal{B}}_\Gamma = \mathcal{B}_{\Gamma J} \cup \mathcal{B}_{\Gamma M} \tag{5.23}$$

el espacio generado por cada uno de los subconjuntos $\mathcal{B}_\Gamma$ y $\bar{\mathcal{B}}_\Gamma$ es $\tilde{D}_\Gamma$, sin embargo distinguimos la propiedad de que los miembros de $\mathcal{B}_\Gamma$ tienen soporte local.

Definimos las bases

$$\mathcal{B}_I = \left\{ w_I^1, ..., w_I^{\bar{N}_I} \right\}, \mathcal{B}_{\Gamma M} = \left\{ w_M^1, ..., w_M^{\bar{N}_\Gamma} \right\} \text{ y } \mathcal{B}_{\Gamma J} = \left\{ w_J^1, ..., w_J^{\bar{N}_\Gamma} \right\} \tag{5.24}$$

de las funcionales lineales ϕ_i en Ω.

Entonces definiendo para toda $\delta = 1, ..., K$, la matriz de $N_\delta \times N_\delta$

$$\underline{\underline{A}}_{II}^{\delta} \equiv \left[\langle w_I^i, w_I^j \rangle \right] \tag{5.25}$$

que sólo esta definida en cada subespacio (subdominio Ω_δ). Entonces, la matriz virtual $\underline{\underline{A}}_{II}$ es dada por la matriz diagonal de la forma

$$\underline{\underline{A}}_{II} \equiv \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}_{II}^1 & & & \\ & \underline{\underline{A}}_{II}^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \underline{\underline{A}}_{II}^E \end{bmatrix} \tag{5.26}$$

donde el resto de la matriz fuera de la diagonal en bloques es cero.

De forma similar definimos

$$\underline{\underline{A}}^{\delta}_{I\Gamma} \equiv \left[\left\langle w^i_I, w^\alpha_\Gamma \right\rangle\right], \quad \underline{\underline{A}}^{\delta}_{\Gamma I} \equiv \left[\left\langle w^\alpha_\Gamma, w^i_I \right\rangle\right] \tag{5.27}$$

y

$$\underline{\underline{A}}^{\delta}_{\Gamma\Gamma} \equiv \left[\langle w^\alpha_\Gamma, w^\alpha_\Gamma \rangle\right] \tag{5.28}$$

para toda $\delta = 1, ..., E$, obsérvese que como $\bar{\mathcal{B}}_\Gamma = \mathcal{B}_{\Gamma J} \cup \mathcal{B}_{\Gamma M}$ entonces

$$\underline{\underline{A}}^{\delta}_{\Gamma\Gamma} = \left[\langle w^\alpha_\Gamma, w^\alpha_\Gamma \rangle\right] = \left[\left\langle w^\alpha_{\Gamma_J}, w^\alpha_{\Gamma_J} \right\rangle\right] + \left[\left\langle w^\alpha_{\Gamma_M}, w^\alpha_{\Gamma_M} \right\rangle\right] \tag{5.29}$$

también que $\underline{\underline{A}}^{\delta}_{I\Gamma} = \left(\underline{\underline{A}}^{\delta}_{\Gamma I}\right)^T$. Entonces las matrices virtuales $\underline{\underline{A}}_{\Gamma I}, \underline{\underline{A}}_{I\Gamma}$ y $\underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma}$ quedarán definidas como

$$\underline{\underline{A}}_{I\Gamma} \equiv \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^1_{I\Gamma} \\ \underline{\underline{A}}^2_{I\Gamma} \\ \vdots \\ \underline{\underline{A}}^E_{I\Gamma} \end{bmatrix} \tag{5.30}$$

$$\underline{\underline{A}}_{\Gamma I} \equiv \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^1_{\Gamma I} & \underline{\underline{A}}^2_{\Gamma I} & \cdots & \underline{\underline{A}}^E_{\Gamma I} \end{bmatrix} \tag{5.31}$$

y

$$\underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma} \equiv \left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma}\right] \tag{5.32}$$

donde $\left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma}\right]$ es construida sumando las $\underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma}$ según el orden de los nodos globales versus los nodos locales.

También consideremos al vector $\underline{u} \equiv (u_1, .., u_E)$ el cual puede ser escrito como $\underline{u} = (\underline{u_I}, \underline{u_\Gamma})$ donde $\underline{u_I} = (u_1, ..., _{N_I})$ y $\underline{u_\Gamma} = (u_1, ..., _{N_\Gamma})$.

Así, el sistema virtual

$$\begin{array}{rcl} \underline{\underline{A}}_{II}\underline{u_I} + \underline{\underline{A}}_{I\Gamma}\underline{u_\Gamma} & = & \underline{b_I} \\ \underline{\underline{A}}_{\Gamma I}\underline{u_I} + \underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma}\underline{u_\Gamma} & = & \underline{b_\Gamma} \end{array} \tag{5.33}$$

queda expresado como

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^1_{II} & & \\ & \ddots & \\ & & \underline{\underline{A}}^E_{II} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{u_I}_1 \\ \vdots \\ \underline{u_I}_E \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{\underline{A}}^1_{I\Gamma} \\ \vdots \\ \underline{\underline{A}}^E_{I\Gamma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{u_\Gamma}_1 \\ \vdots \\ \underline{u_\Gamma}_E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{b_I}_1 \\ \vdots \\ \underline{b_I}_E \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} & & \\ \underline{\underline{A}}^1_{\Gamma I} & \cdots & \underline{\underline{A}}^E_{\Gamma I} \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{u_I}_1 \\ \vdots \\ \underline{u_I}_E \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} & & \\ & \underline{\underline{A}}^{\Gamma\Gamma} & \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{u_\Gamma}_1 \\ \vdots \\ \underline{u_\Gamma}_E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{b_\Gamma}_1 \\ \vdots \\ \underline{b_\Gamma}_E \end{bmatrix}$$

o en forma compacta como $\underline{\underline{A}}\,\underline{u} = \underline{b}$, notemos que las matrices $\underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma}, \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I}, \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma}$ y $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ son matrices bandadas.

Si ahora despejamos $\underline{u_I}$ de la primera ecuación del sistema dado por la Ec. (5.33) obtenemos

$$\underline{u_I} = \left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\left(\underline{b_I} - \underline{\underline{A}}_{I\Gamma}\underline{u_\Gamma}\right)$$

si sustituimos $\underline{u_I}$ en la segunda ecuación del sistema dado por la Ec. (5.33) entonces tenemos

$$\left(\underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma} - \underline{\underline{A}}_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_{I\Gamma}\right)\underline{u_\Gamma} = \underline{b_\Gamma} - \underline{\underline{A}}_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\underline{b_I} \tag{5.34}$$

en la cual los nodos interiores no figuran en la ecuación y todo queda en función de los nodos de la frontera interior $\underline{u_\Gamma}$.

A la matriz formada por $\underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma} - \underline{\underline{A}}_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_{I\Gamma}$ se le conoce como el complemento de Schur global y se le denota como

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma} - \underline{\underline{A}}_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_{I\Gamma}. \tag{5.35}$$

En nuestro caso, como estamos planteando todo en términos de subdominios Ω_i, con $i = 1, ..., E$, entonces las matrices $\underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma}, \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I}, \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma}$ y $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ quedan definidas de manera local, así que procedemos a definir el complemento de Schur local como

$$\underline{\underline{S}}_i = \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma} - \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma} \tag{5.36}$$

adicionalmente definimos

$$\underline{b}_i = \underline{b_\Gamma}_i - \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{b_I}_i. \tag{5.37}$$

El sistema dado por la Ec. (5.34) lo escribimos como

$$\underline{\underline{S}}\,\underline{u_\Gamma} = \underline{b} \tag{5.38}$$

y queda definido de manera virtual a partir de

$$\left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{S}}_i\right] \underline{u_\Gamma} = \left[\sum_{i=1}^{E} \underline{b}_i\right] \tag{5.39}$$

donde $\left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{S}}_i\right]$ y $\left[\sum_{i=1}^{E} \underline{b}_i\right]$ podrían ser construidas sumando las S_i y b_i respectivamente según el orden de los nodos globales versus los nodos locales.

El sistema lineal virtual obtenido de la Ec. (5.38) se resuelve —dependiendo de si es o no simétrico— eficientemente usando el método de Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES, para ello no es necesario construir la matriz $\underline{\underline{S}}$ con las contribuciones de cada S_i correspondientes al subdominio i, lo que hacemos es pasar a cada subdominio el vector $\underline{u_{\Gamma}}_i$ correspondiente a la i-ésima iteración del método iterativo usado para que en cada subdominio se evalué ${\underline{\tilde{u}_\Gamma}}^i = \underline{\underline{S}}_i \underline{u_\Gamma}_i$ localmente y con el resultado se forma el vector $\underline{\tilde{u}_\Gamma} = \sum_{i=1}^{E} \underline{\tilde{u}_\Gamma}_i$ y se continué con los demás pasos del método. Esto es ideal para una implementación en paralelo del método de Gradiente Conjugado o variante de GMRES.

Una vez resuelto el sistema de la Ec. (5.39) en el que hemos encontrado la solución para los nodos de la frontera interior $\underline{u_\Gamma}$, entonces debemos resolver localmente los $\underline{u_I}_i$ correspondientes a los nodos interiores para cada subespacio Ω_i, para esto empleamos

$$\underline{u_I}_i = \left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1} \left(\underline{b_I}_i - \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma} \underline{u_\Gamma}_i\right) \tag{5.40}$$

para cada $i = 1, 2, ..., E$, quedando así resuelto el problema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$ tanto en los nodos interiores $\underline{u_I}_i$ como en los de la frontera interior $\underline{u_\Gamma}_i$ correspondientes a cada subespacio Ω_i.

Observación 1 *Notemos que normalmente las matrices locales* $\underline{\underline{S}}_i$ *y* $\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}$ *no se construyen, ya que estas serían matrices densas y su construcción es computacionalmente muy costosa, y como sólo nos interesa el producto* $\underline{\underline{S}}\underline{y_\Gamma}$, *o más precisamente* $\left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{S}}_i\right] \underline{y_\Gamma}$, *entonces sí llamamos* $\underline{y_\Gamma}_i$ *al vector correspondiente al subdominio* i, *entonces tendremos*

$${\underline{\tilde{u}_\Gamma}}^i = \left(\underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma} - \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I} \left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1} \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma}\right) \underline{y_\Gamma}_i. \tag{5.41}$$

Para evaluar eficientemente esta expresión, realizamos las siguientes operaciones equivalentes

$$\begin{aligned} \underline{x1} &= \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma\Gamma}\underline{y_\Gamma}_i \\ \underline{x2} &= \left(\underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma}\right)\underline{y_\Gamma}_i \\ \underline{\tilde{u}_\Gamma}^i &= \underline{x1} - \underline{x2} \end{aligned} \tag{5.42}$$

la primera y tercera expresión no tienen ningún problema en su evaluación, para la segunda expresión tendremos que hacer

$$\underline{x3} = \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma}\underline{y_\Gamma}_i \tag{5.43}$$

con este resultado intermedio deberíamos calcular

$$\underline{x4} = \left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{x3} \tag{5.44}$$

pero como no contamos con $\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}$, *entonces multiplicamos la expresión por* $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ *obteniendo*

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{x4} = \underline{\underline{A}}^i_{II}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{x3} \tag{5.45}$$

al simplificar, tenemos

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{x4} = \underline{x3}. \tag{5.46}$$

Esta última expresión puede ser resuelta usando Factorización LU, Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES (cada una de estas opciones tiene ventajas y desventajas computacionales que deben ser evaluadas al momento de implementar el código para un problema particular). Una vez obtenido $\underline{x4}$, *podremos calcular*

$$\underline{x2} = \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I}\underline{x4} \tag{5.47}$$

así

$$\underline{\tilde{u}_\Gamma}^i = \underline{x1} - \underline{x2} \tag{5.48}$$

completando la secuencia de operaciones necesaria para obtener $\underline{\underline{S}}_i\underline{y_\Gamma}_i$.

Observación 2 *En el caso del cálculo de*

$$\underline{b}_i = \underline{b_\Gamma}_i - \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I} \left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1} \underline{b_I}_i \tag{5.49}$$

algo análogo al comentario anterior deberá de hacerse, ya que nuevamente esta involucrado $\left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1}$, *por ello debemos usar el siguiente procedimiento para evaluar eficientemente esta expresión, realizando las operaciones equivalentes*

$$\underline{y1} = \left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1} \underline{b_I}_i \tag{5.50}$$

multiplicando por $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ *a la última expresión, obtenemos*

$$\underline{\underline{A}}^i_{II} \underline{y1} = \underline{\underline{A}}^i_{II} \left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1} \underline{b_I}_i \tag{5.51}$$

simplificando, tenemos

$$\left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right) \underline{y1} = \underline{b_I}_i \tag{5.52}$$

donde esta última expresión puede ser resuelta usando Factorización LU, Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES, luego hacemos

$$\underline{y2} = \underline{\underline{A}}^i_{\Gamma I} \underline{y1} \tag{5.53}$$

y para finalizar el cálculo, calculamos

$$\underline{b}_i = \underline{b_\Gamma}_i - \underline{y2}. \tag{5.54}$$

Observación 3 *En la evaluación de*

$$\underline{u_I}_i = \left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1} \left(\underline{b_I}_i - \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma} \underline{u_\Gamma}_i \right) \tag{5.55}$$

esta nuevamente involucrado $\left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1}$, *por ello debemos usar el siguiente procedimiento para evaluar eficientemente esta expresión, realizando las operaciones equivalentes*

$$\begin{aligned} \underline{x4} &= \underline{b_I}_i - \underline{\underline{A}}^i_{I\Gamma} \underline{u_\Gamma}_i \\ \underline{u_I}_i &= \left(\underline{\underline{A}}^i_{II} \right)^{-1} \underline{x4} \end{aligned} \tag{5.56}$$

multiplicando por $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ *a la última expresión, obtenemos*

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{u_{I_i}} = \underline{\underline{A}}^i_{II}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{x4} \tag{5.57}$$

simplificando, tenemos

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{u_{I_i}} = \underline{x4} \tag{5.58}$$

esta última expresión puede ser resuelta usando Factorización LU o Gradiente Conjugado.

Como se indico en las últimas observaciones, para resolver el sistema $\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{x} = \underline{b}$ podemos usar Factorización LU, Gradiente Conjugado, alguna variante de GMRES o cualquier otro método para resolver sistemas lineales, pero deberá usarse aquel que proporcione la mayor velocidad en el cálculo o que consuma la menor cantidad de memoria (ambas condicionantes son mutuamente excluyentes), por ello la decisión de qué método usar deberá tomarse al momento de tener que resolver un problema particular en un equipo dado y básicamente el condicionante es el tamaño del la matriz $\underline{\underline{A}}^i_{II}$.

Para usar el método de Factorización LU, primero se debe factorizar la matriz bandada $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ en una matriz $\underline{\underline{LU}}$, la cual es bandada pero incrementa el tamaño de la banda a más del doble, pero esta operación sólo se debe realizar una vez por cada subdominio, y para solucionar los diversos sistemas lineales $\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{x} = \underline{b}$ sólo será necesario evaluar los sistemas

$$\begin{aligned} \underline{\underline{L}}\underline{y} &= \underline{b} \\ \underline{\underline{U}}\underline{x} &= \underline{y} \end{aligned} \tag{5.59}$$

en donde $\underline{y}$ es un vector auxiliar. Esto proporciona una manera muy eficiente de evaluar el sistema lineal pero el consumo en memoria para un problema particular puede ser excesivo.

Por ello, si el problema involucra una gran cantidad de nodos interiores y el equipo en el que se implantará la ejecución del programa tiene una cantidad de memoria muy limitada, es recomendable usar el método de Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES, este consume una cantidad de memoria adicional muy pequeña y el tiempo de ejecución se optimiza versus la Factorización LU.

De esta forma, es posible adaptar el código para tomar en cuenta la implementación de este en un equipo de cómputo en particular y poder sacar

el máximo provecho al método de subestructuración en la resolución de problemas elípticos de gran envergadura.

En lo que resta de este trabajo, se asume que el método empleado para resolver $\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{x} = \underline{b}$ en sus respectivas variantes necesarias para evitar el cálculo de $\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}$ es el método de Gradiente Conjugado, logrando así el máximo desempeño en velocidad en tiempo de ejecución.

El número de condicionamiento del complemento de Schur sin precondicionamiento puede ser estimado, para ello:

Definición 10 *Introducimos una norma-L^2 equivalente sobre Γ mediante*

$$\left\|\underline{u_\Gamma}\right\|^2_\Gamma = \sum_{i=1}^{E} \left\|\underline{u_\Gamma}\right\|^2_{L^2(\partial\Omega_i)}. \tag{5.60}$$

Teorema 11 *Sea $\underline{u_\Gamma}$ la traza de funciones de elemento finito en V^h sobre Γ, asumimos que los coeficientes de la ecuación diferencial parcial $\rho_i = 1$, $i = 1, 2, ..., E$, y que la malla fina $\mathcal{T}_h$ y la malla gruesa $\mathcal{T}_H$ sea cuasi-uniforme. Entonces existen dos constantes positivas c y C, independientes de h y H, tal que*

$$cH \left\|\underline{u_\Gamma}\right\|^2_\Gamma \leq s(\underline{u_\Gamma}, \underline{u_\Gamma}) \leq Ch^{-1} \left\|\underline{u_\Gamma}\right\|^2_\Gamma \tag{5.61}$$

de este modo

$$\kappa = cond(\underline{\underline{S}}) \leq \frac{C}{Hh}. \tag{5.62}$$

Por analogía al método de subestructuración desarrollado anteriormente, dado un sistema lineal $\underline{\underline{M}}\underline{x} = \underline{f}$ que proviene de la discretización de algún método tipo Diferencias Finitas, Elemento Finito o Volumen Finito, siempre es posible reacomodarlo como

$$\begin{pmatrix} \underline{\underline{A}} & \underline{\underline{B}} \\ \underline{\underline{C}} & \underline{\underline{D}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{a} \\ \underline{b} \end{pmatrix} \tag{5.63}$$

con $\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}} & \underline{\underline{B}} \\ \underline{\underline{C}} & \underline{\underline{D}} \end{pmatrix}$, $\underline{x} = \begin{pmatrix} \underline{u} \\ \underline{v} \end{pmatrix}$ y $\underline{f} = \begin{pmatrix} \underline{a} \\ \underline{b} \end{pmatrix}$, en la cual la matriz $\underline{\underline{A}}$ sea invertible, entonces

$$\left(\underline{\underline{D}} - \underline{\underline{C}}\underline{\underline{A}}^{-1}\underline{\underline{B}}\right)\underline{v} = \underline{b} - \underline{\underline{C}}\underline{\underline{A}}^{-1}\underline{a} \tag{5.64}$$

y donde

$$\underline{u} = \underline{\underline{A}}^{-1} \left(\underline{a} - \underline{\underline{B}} \underline{v} \right). \tag{5.65}$$

Así, hemos transformado el sistema $\underline{\underline{M}} \underline{x} = \underline{f}$, en otro equivalente

$$\underline{\underline{N}} \underline{v} = \underline{g} \tag{5.66}$$

pero con un menor número de grados de libertad, donde

$$\underline{\underline{N}} = \left(\underline{\underline{D}} - \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{B}} \right), \qquad \underline{g} = \underline{b} - \underline{\underline{C}} \underline{\underline{A}}^{-1} \underline{a}. \tag{5.67}$$

a esta descomposición matricial se le conoce como la descomposición de Schur.

Así, para solucionar el sistema lineal $\underline{\underline{N}} \underline{v} = \underline{g}$, seleccionaremos el método adecuado acorde a las propiedades de la matriz $\underline{\underline{N}}$ como se vio en este capítulo, siendo los más comunes el método CGM –para matrices simétricas— y variantes del método GMRES —para matrices no simétricas—, entre otros.

5.4 Métodos del Espacio de Vectores Derivados (DVS)

El espacio de vectores derivados (DVS) es mostrado como una formulación numérica la cual esta íntimamente relacionada con la implementación computacional, tanto en la versión secuencial como paralela del código (véase [68] y [67]).

La implementación computacional dicta ciertas consideraciones sobre selección de los algoritmos numéricos, así como, la forma de implementación de estos. Con la única finalidad de aprovechar sus propiedades computacionales en la definición de una robusta jerarquía de clases que resuelva de forma eficiente el problema.

Para ello, se inicia considerando el operador de segundo orden dado por la ecuación

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= f \quad \text{en } \Omega \\ u &= g \quad \text{sobre } \partial\Omega \end{aligned} \tag{5.68}$$

Consideremos el problema dado por la Ec. (5.68) en el dominio Ω, el cual es subdividido en E subdominios Ω_i, $i = 1, 2, ..., E$ sin traslape, también conocida como malla gruesa $\mathcal{T}_H$, es decir

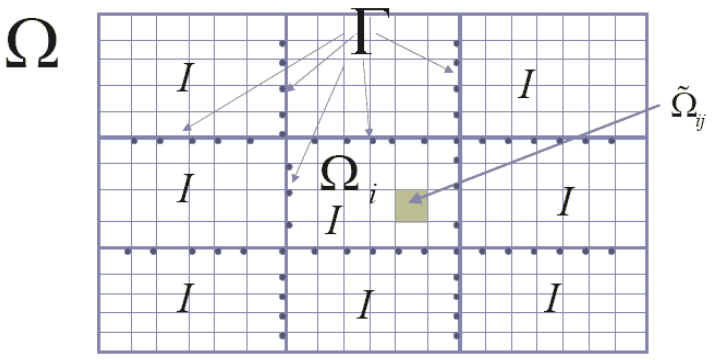


Figura 6: Dominio Ω descompuesto en una partición gruesa de 3×3 y cada subdominio Ω_i en una partición fina de 7×5.

$$\Omega_i \cap \Omega_j = \varnothing \quad \forall i \neq j \quad \text{y} \quad \overline{\Omega} = \bigcup_{i=1}^{E} \overline{\Omega}_i, \tag{5.69}$$

y al conjunto

$$\Gamma = \bigcup_{i=1}^{E} \Gamma_i, \quad \text{si } \Gamma_i = \partial\Omega_i \backslash \partial\Omega \tag{5.70}$$

lo llamaremos la frontera interior del dominio Ω, denotamos por H al diámetro $H_i = Diam(\Omega_i)$ de cada Ω_i que satisface $Diam(\Omega_i) \leq H$ para cada $i = 1, 2, ..., E$, además, cada subdominio Ω_i es descompuesto en un mallado fino $\mathcal{T}_h$ de K subdominios mediante una triangulación Ω_e de modo que esta sea conforme, denotamos por h al diámetro $h_i = Diam(\Omega_e)$ de cada Ω_e que satisface $Diam(\Omega_e) \leq h$ para cada $e = 1, 2, ..., K$ de cada $i = 1, 2, ..., E$.

Un ejemplo de un dominio Ω y su descomposición en subdominios Ω_i y cada Ω_i a su vez descompuesto en Ω_e subdominios se muestra en la figura anterior. Sin perdida de generalidad tomemos $g = 0$ en $\partial\Omega$, notemos que siempre es posible poner el problema de la Ec. (5.68) como uno con condiciones de frontera Dirichlet que se nulifiquen mediante la adecuada manipulación del término del lado derecho de la ecuación.

Para resolver dicho problema, se puede usar cualquiera de los ocho algoritmos que se han desarrollado, de cada uno de ellos se han dado formulaciones explícitas en términos de matrices.

Así, para generar la implementación de cualquiera de los algoritmos desarrollados se necesita generar las matrices locales

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{5.71}$$

que estan definidas de $W_r \rightarrow W_r$, o más explícitamente las matrices

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\pi} \text{ y } \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{5.72}$$

ello se puede hacer de dos formas, a saber:

- A partir de la matriz que es obtenida después de que el problema se ha discretizado —a partir de una discretización por el método de Elemento Finito, Volumen Finito o Diferencias Finitas— y para su aplicación no se requiere ninguna información acerca de la ecuación diferencial parcial de la cual se originó.

- A partir la discretización de la ecuación diferencial parcial generada localmente en cada subdominio por algún método de descomposición de dominio sin traslapes, como el usado para FETI-DP o BDDC.

En la sección (12.8) se derivo la forma de obtener las matrices locales a partir de la matriz $\underline{\underline{A}}^t : W \to W$ que es obtenida después de que el problema se ha discretizado y la cual es puesta en el espacio de vectores derivados. En la siguiente sección se da la forma de derivar cada una de las matrices locales a partir la discretización de la ecuación diferencial parcial generada localmente en cada subdominio; para que en las siguientes secciones, mediante el uso de dichas matrices se pueda implementar cualquiera de los métodos desarrollados.

5.4.1 Discretización de los Métodos Partiendo de la Formulación Local

Los métodos de descomposición de dominio —como son FETI-DP y BDDC— y el esquema DVS pueden partir de la discretización local mediante algún método de discretización como Diferencias Finitas, Volumen Finito o Elemento Finito –este último es uno de los más usados en los DDM— para construir cada una de las matrices locales

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\pi} \text{ y } \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{5.73}$$

para cada Ω_α con $\alpha = 1, ..., E$. Una vez construidas las matrices locales, se procede a definir al complemento de Schur local por subdominio —más detalles véase sección (5.3)—

$$\underline{\underline{S}}^{\alpha}_{\pi} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I} \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II} \right)^{-1} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi} \tag{5.74}$$

con el que se define

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II} & \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi} \\ \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I} & \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi} \end{pmatrix} \tag{5.75}$$

que a su vez define

$$\underline{\underline{S}}^{\alpha} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi} \right)^{-1} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta} \tag{5.76}$$

recordando que

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}, & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \end{cases} \tag{5.77}$$

$$\underline{\underline{S}} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{S}}^{\alpha} \qquad \text{y} \qquad \left(\underline{\underline{S}}\right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{E} \left(\underline{\underline{S}}^{\alpha}\right)^{-1} \tag{5.78}$$

entonces, finalmente se tienen definidas a $\underline{\underline{S}}$ y $\underline{\underline{S}}^{-1}$. Con estas definiciones, ahora ya es posible implementar cualesquiera de los métodos del esquema del espacio de vectores derivados.

Nótese que, por la forma de construcción de las matrices, se tienen las siguientes propiedades importantes

$$\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{E} \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}^{\alpha}\right)^{-1} \qquad \text{y} \qquad \left(\underline{\underline{A}}\right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{E} \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}\right)^{-1} \tag{5.79}$$

esto implica que el cálculo de la inversa de la matriz $\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}$ es exclusivamente a partir de las inversas locales a cada subdominio.

5.4.2 Formulación Operacional de los Métodos DVS

Para la resolución de problemas de interés en Ciencias e Ingenierías donde es necesario resolver, por ejemplo el problema dado por la Ec.(12.96) —más detalles véase la sección (12.9)— que consiste en buscar una función $\underline{u}^{'} \in W_r$ que satisfaga

$$\underline{\underline{aA}}\,\underline{u}^{'} = \underline{\overline{f}} \qquad \text{y} \qquad \underline{\underline{j}}\,\underline{u}^{'} = 0 \tag{5.80}$$

aquí, el vector $\underline{\overline{f}} \in W_{12}$ es un dato del problema y donde el vector $\underline{u}^{'}$ y $\underline{\overline{f}}$ esta formado por

$$\begin{pmatrix} \underline{u}_{\Pi} \\ \underline{u}_{\Delta} \end{pmatrix} = \underline{u}^{'} \qquad \text{y} \qquad \begin{pmatrix} \underline{f}_{\Pi} \\ \underline{f}_{\Delta} \end{pmatrix} = \underline{\overline{f}} \tag{5.81}$$

que satisfaga —véase sección (13.3) del operador Steklov-Poincaré Ecs.(13.62 y 13.63)—

$$\left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^{T}\,\underline{\underline{j}}\right)\underline{u}^{'} = \underline{\overline{f}}. \tag{5.82}$$

Entonces es necesario transformar el problema Ec.(5.82) en uno que

$$\underline{f}_{\Pi} = 0 \tag{5.83}$$

para ello, se introduce un vector auxiliar

$$\underline{u}_{p} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi} \tag{5.84}$$

en el cual $\left(\underline{u}_p\right)_\Delta = 0$, por lo tanto la Ec.(5.82) toma la forma

$$\left(\underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^T \underline{\underline{j}}\right) \underline{u}_\Delta = \underline{f}_\Delta - \underline{u}_p \tag{5.85}$$

así, la solución $\underline{u}'$ al problema será $\underline{u}' = \underline{u}_\Delta - \underline{u}_p$.

Dado que se necesita expresar el problema en términos del espacio W_{12} entonces

$$\underline{f}_{\Delta_2} = \underline{\underline{a}}\underline{f}_\Delta, \qquad \text{y} \qquad \underline{f}_{\Delta_1} = \underline{\underline{j}}\underline{f}_\Delta = 0 \tag{5.86}$$

$$\left(\underline{u}_p\right)_\Delta = \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{f}_\Pi \tag{5.87}$$

de lo anterior, la expresión dada por la Ec.(5.85), se puede reescribir como

$$\left(\underline{\underline{aS}} - \underline{\underline{Sj}}\right) \underline{u}_\Delta = \underline{\underline{a}}\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{f}_\Pi \tag{5.88}$$

donde

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \tag{5.89}$$

o de forma compacta se escribe como

$$\left(\underline{\underline{aS}} - \underline{\underline{Sj}}\right) \underline{u}_\Delta = \underline{f}_\Delta - \left(\underline{u}_p\right)_\Delta . \tag{5.90}$$

Por todo lo anterior, los algoritmos desarrollados quedan escritos de manera explícita como:

1. **Formulación del Algoritmo del Complemento de Schur** (PRIMAL#1) —véase ecuación (13.4) en la sección (13.1.1)—:

   "Encontrar a $\underline{u}_\Delta \in W_\Delta$ tal que

   $$\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta = \underline{f}_\Delta - \left(\underline{u}_p\right)_\Delta \tag{5.91}$$

   sujeto a $\underline{\underline{j}}\underline{u}_\Delta = 0$". O en su forma desarrollada

   $$\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta = \underline{f}_\Delta - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{f}_\Pi . \tag{5.92}$$

2. **Formulación Dual del Problema Neumann-Neumann** (DUAL#1) —véase la ecuación (13.11) de la sección (13.1.2)—:

   "Dada $\underline{f}_{\Delta} \in W_{\Delta}$, buscar a $\underline{\lambda} \in W_{\Delta}$ tal que

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_{\Delta} = \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \left(\underline{u}_{p}\right)_{\Delta}\right) \tag{5.93}$$

   sujeto a $\underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_{\Delta} = 0$". O en su forma desarrollada

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_{\Delta} = \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right). \tag{5.94}$$

3. **Formulación Primal del Problema Neumann-Neumann** (PRIMAL#2) —véase ecuación (13.21) en la sección (13.1.3)—:

   "Dada $\underline{f}_{\Delta} \in W_{\Delta}$, encontrar $\underline{v}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ tal que

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{v}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \left(\underline{u}_{p}\right)_{\Delta}\right) \tag{5.95}$$

   sujeto a $\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{v}_{\Delta} = 0$". O en su forma desarrollada

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{v}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right). \tag{5.96}$$

4. **Formulación Dual del Problema Neumann-Neumann** (DUAL#2) —véase la ecuación (13.29) de la sección (13.1.4)—:

   "Dada $\underline{f}_{\Delta} \in W_{\Delta}$, sea $\underline{\mu}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ tal que

$$\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\mu}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \left(\underline{u}_{p}\right)_{\Delta}\right) \tag{5.97}$$

   sujeto a $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_{\Delta} = 0$". O en su forma desarrollada

$$\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\mu}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right). \tag{5.98}$$

5. **Formulación Precondicionada del Algoritmo BDDC** (PRIMAL#1) —véase la ecuación (13.30) en la sección (13.2.1)—:

"Buscar a $\underline{u}_\Delta \in W_\Delta$ tal que

$$\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \left(\underline{u}_p\right)_\Delta\right) \tag{5.99}$$

sujeto a $\underline{\underline{j}}\underline{u}_\Delta = 0$". O en su forma desarrollada

$$\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_\Pi\right). \tag{5.100}$$

6. **Formulación Precondicionada del Algoritmo FETI-DP** (DUAL#1) —véase la ecuación (13.36) en la sección (13.2.2)—:

   "Dada $\underline{f}_\Delta \in W_\Delta$, sea $\underline{\lambda}_\Delta \in W_\Delta$ tal que

   $$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta = \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \left(\underline{u}_p\right)_\Delta\right) \tag{5.101}$$

   sujeto a $\underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_\Delta = 0$". O en su forma desarrollada

   $$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta = \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_\Pi\right) \tag{5.102}$$

   donde una vez calculada $\underline{\lambda}_\Delta$ entonces $\underline{u}_\Delta$ es obtenida mediante

   $$\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\lambda}_\Delta\right). \tag{5.103}$$

7. **Formulación Primal Precondicionada del Problema Neumann-Neumann DVS-PRIMAL** (PRIMAL#2) —véase la ecuación (13.43) en la sección (13.2.3)—:

   "Dada $\underline{f}_\Delta \in W_\Delta$, buscar $\underline{v} \in W_\Delta$ tal que

   $$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{v}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \left(\underline{u}_p\right)_\Delta\right) \tag{5.104}$$

   sujeto a $\underline{\underline{aS}}\underline{v}_\Delta = 0$". O en su forma desarrollada

   $$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{v}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_\Pi\right) \tag{5.105}$$

   donde una vez calculada $\underline{v}_\Delta$ entonces $\underline{u}_\Delta$ es obtenida mediante

   $$\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{v}_\Delta\right). \tag{5.106}$$

8. **Formulación Dual Precondicionada del Problema Neumann-Neumann DVS-DUAL** (DUAL#2) —véase la ecuación (13.50) en la sección (13.2.4)—:

   "Dada $\underline{f}_{\Delta} \in W_{\Delta}$, sea $\underline{\mu}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ tal que

$$\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\mu}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \left(\underline{u}_{p}\right)_{\Delta}\right) \tag{5.107}$$

   sujeto a $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_{\Delta} = 0$". O en su forma desarrollada

$$\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\mu}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right) \tag{5.108}$$

   donde una vez calculada $\underline{\mu}_{\Delta}$ entonces $\underline{u}_{\Delta}$ es obtenida mediante

$$\underline{u}_{\Delta} = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} + \underline{\mu}_{\Delta}\right). \tag{5.109}$$

5.4.3 Implementación Numérica de DVS

La implementación numérica de por ejemplo, el algoritmo DVS-BDDC (PRIMAL#1) puesto en su forma operacional, Ec.(5.100) es

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_{\Delta} = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right) \tag{5.110}$$

en la cual define el sistema lineal virtual a resolver

$$\underline{\underline{M}}\underline{u}_{\Delta} = \underline{b} \tag{5.111}$$

donde

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}} \quad \text{y} \quad \underline{b} = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right) \tag{5.112}$$

entonces el sistema lineal virtual puede ser implementado mediante el método de Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES, dependiendo del tipo de matriz que sea $\underline{\underline{S}}$. Si $\underline{\underline{S}}$ es simétrica y definida positiva, entonces $\underline{\underline{S}}^{-1}$ también será simétrica y definida positiva y por tanto se usaría el método de Gradiente Conjugado, en caso contrario se usaría el método de GMRES o algún otro.

Nótese que, en los métodos iterativos, la selección adecuada de $\underline{u}^0$ puede ser tan costosa —computacionalmente hablando— como encontrar la solución $\underline{u}$, pues tomar una $\underline{u}^0$ no adecuada, generalmente ocasiona realizar más iteraciones para converger en el método que tomar $\underline{u}^0 = 0$.

5.4.4 Implementación para Matrices Simétricas

Suponiendo que $\underline{\underline{S}}$ es simétrica y definida positiva, la formulación $\underline{\underline{M}}\underline{u}_{\Delta} = \underline{b}$ puede ser implementada como el método de Gradiente Conjugado —véase sección (11.2.1)— usando el algoritmo dado en la Ec.(11.14) en el cual se usa el producto interior según corresponda:

- $\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}$ será simétrico con respecto al producto interior definido por

$$\langle \underline{u}, \underline{w} \rangle = \underline{u} \cdot \underline{w} \tag{5.113}$$

- $\underline{\underline{Sj}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}$ será simétrico con respecto al producto interior definido por

$$\langle \underline{u}, \underline{w} \rangle = \underline{\underline{S}}\underline{u} \cdot \underline{w} \tag{5.114}$$

La implementación del algoritmo se inicia tomando $\underline{u}^0$, una elección común es tomar a $\underline{u}^0 = 0$, si este es el caso, entonces

$$\underline{r}^0 = \underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right), \qquad \underline{p}^0 = \underline{r}^0 \tag{5.115}$$

y la parte iterativa[27] queda como:

$$\begin{aligned}
&\text{Para } n = 1, 2, ...\{ \\
&\quad \alpha^n = \frac{\langle \underline{p}^n, \underline{\underline{S}}\underline{p}^n \rangle}{\langle \underline{p}^n, \underline{\underline{Sa}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{p}^n \rangle} \\
&\quad \underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \alpha^n \underline{p}^n \\
&\quad \underline{r}^{n+1} = \underline{r}^n - \alpha^n \underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{p}^n \\
&\quad < \text{Prueba de convergencia} > \\
&\quad \beta^n = \frac{\langle \underline{r}^{n+1}, \underline{\underline{S}}\underline{r}^{n+1} \rangle}{\langle \underline{r}^n, \underline{\underline{S}}\underline{r}^n \rangle} \\
&\quad \underline{p}^{n+1} = \underline{r}^{n+1} + \beta^n \underline{p}^n \\
&\}
\end{aligned} \tag{5.116}$$

[27] En este caso se usa el producto interior definido por $\langle \underline{u}, \underline{w} \rangle = \underline{\underline{S}}\underline{u} \cdot \underline{w}$.

5.4.5 Implementación para Matrices no Simétricas e Indefinidas

Suponiendo que $\underline{\underline{S}}$ es no simétrica o indefinida, la formulación $\underline{\underline{M}}\underline{u}_{\Delta} = \underline{b}$ puede ser implementada como el método de GMRES —véase sección (11.2.3)— usando el algoritmo dado en la Ec.(5.100), en cual se inicia tomando $\underline{u}^0$, una elección común es tomar a $\underline{u}^0 = 0$, si este es el caso, entonces

$$\underline{r}^0 = \underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{aA}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}\right), \beta^0 = \left\|r^0\right\|, \underline{v}^1 = \underline{r}^0/\beta^0 \tag{5.117}$$

y la parte iterativa queda como:

$$\begin{array}{l}
\text{Para } n = 1, 2, ..., \text{Mientras } \beta^n < \tau\beta^0 \ \{ \\
\quad \underline{w}_0^{n+1} = \underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{v}^n \\
\quad \text{Para } l = 1 \text{ hasta } n \ \{ \\
\qquad h_{l,n} = \left\langle \underline{w}_l^{n+1}, \underline{v}^l \right\rangle \\
\qquad \underline{w}_{l+1}^{n+1} = \underline{w}_l^{n+1} - h_{l,n}\underline{v}^l \\
\quad \} \\
\quad h_{n+1,n} = \left\|\underline{w}_{n+1}^{n+1}\right\| \\
\quad \underline{v}^{n+1} = \underline{w}_{n+1}^{n+1}/h_{n+1,n} \\
\quad \text{Calcular } \underline{y}^n \text{ tal que } \beta n = \left\|\beta^0\underline{e}_1 - \underline{\underline{\hat{H}}}_n\underline{y}^y\right\| \text{ es mínima} \\
\}
\end{array} \tag{5.118}$$

donde $\underline{\underline{\hat{H}}}_n = [h_{ij}]_{1\leq i\leq n+1, 1\leq j\leq n}$ y la solución aproximada será $\underline{u}^n = \underline{u}^0 + \underline{\underline{V}}_n\underline{y}^n$, el vector residual será

$$\underline{r}^n = \underline{r}^0 - \underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aSV}}_k y^n = \underline{\underline{V}}_{n+1}\left(\beta^0\underline{e}_1 - \underline{\underline{\hat{H}}}_n\underline{y}^n\right). \tag{5.119}$$

5.4.6 Evaluación de los Operadores Virtuales $\underline{\underline{S}}$ y $\underline{\underline{S}}^{-1}$

Para implementar cualesquiera de los ocho algoritmos desarrollados, sin importar si las matrices involucradas son simétricas o no simétricas; y como se mostró en las implementaciones de los algoritmos en la sección anterior, estos requieren por un lado, la evaluación de $\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{f}_{\Pi}$ y por otro la evaluación de los operadores virtuales $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{v}$ y $\underline{\underline{S}}\underline{v}$, en los tres casos, ninguna de estas matrices es construida pues resultarían matrices densas con el consiguiente costo computacional de su manejo. Para mostrar como hacer su evaluación

óptima, primero nótese que el sistema lineal virtual $\underline{\underline{A}}$ a partir del cual se deriva el esquema DVS, esta definido como

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{II} & \underline{\underline{A}}_{I\pi} & \underline{\underline{A}}_{I\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\pi I} & \underline{\underline{A}}_{\pi\pi} & \underline{\underline{A}}_{\pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta I} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \tag{5.120}$$

donde

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{II} & \underline{\underline{A}}_{I\pi} \\ \underline{\underline{A}}_{\pi I} & \underline{\underline{A}}_{\pi\pi} \end{pmatrix} \qquad \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{I\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\pi\Delta} \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Delta I} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\pi} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{5.121}$$

entonces el operador $\underline{\underline{S}}$ de los nodos duales queda definido por

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} \right)^{-1} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \tag{5.122}$$

y este es formado por $\underline{\underline{S}} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{S}}^{\alpha}$, donde $\underline{\underline{S}}^{\alpha}$ esta formada por el complemento de Schur local

$$\underline{\underline{S}}^{\alpha} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi} \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi} \right)^{-1} \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta}. \tag{5.123}$$

En el apéndice A se detalla la forma de realizar todas las operaciones involucradas en los métodos DVS, aquí, bajo el supuesto de que se tienen construidas las matrices locales $\underline{\underline{A}}^{i}_{II}, \underline{\underline{A}}^{i}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{i}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{i}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{i}_{\pi\Delta}$ y $\underline{\underline{A}}^{i}_{\Delta\Delta}$ en cada uno de los subdominios de la partición. Entonces, para resolver $\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} \right)^{-1} \underline{u}$, donde $\underline{u} \in W_{\Pi}$, se puede reescribir como

$$\begin{pmatrix} \underline{w}_I \\ \underline{w}_\pi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{II} & \underline{\underline{A}}_{I\pi} \\ \underline{\underline{A}}_{\pi I} & \underline{\underline{A}}_{\pi\pi} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \underline{u}_I \\ \underline{u}_\pi \end{pmatrix} \tag{5.124}$$

i.e. se necesita resolver $\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} \underline{w} = \underline{u}$,la cual se expresa como

$$\begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{II} & \underline{\underline{A}}_{I\pi} \\ \underline{\underline{A}}_{\pi I} & \underline{\underline{A}}_{\pi\pi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{w}_I \\ \underline{w}_\pi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{u}_I \\ \underline{u}_\pi \end{pmatrix} \tag{5.125}$$

entonces, $\underline{w}_\pi \in W_\Pi$ es solución de

$$\left(\underline{\underline{A}}_{\pi\pi} - \underline{\underline{A}}_{\pi I}\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_{I\pi}\right)\underline{w}_\pi \equiv \underline{\underline{S}}_\pi \underline{w}_\pi = \underline{u}_\pi - \underline{\underline{A}}_{\pi I}\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\underline{u}_I \tag{5.126}$$

mientras

$$\underline{w}_I = \left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1}\left(\underline{u}_I - \underline{\underline{A}}_{I\pi}\underline{w}_\pi\right) \tag{5.127}$$

donde

$$\left(\underline{\underline{A}}_{II}\right)^{-1} = \sum_{i=1}^{N}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}. \tag{5.128}$$

Por último, para evaluar $\underline{\underline{S}}\underline{v}$ se aplica el procedimiento similar al detallado en la sección (14.2) y para evaluar $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{v}$ se aplica el procedimiento detallado en la sección (14.3).

De las evaluaciones indicadas en esta sección, una gran parte de ellas es posible realizar en paralelo, y como se mostrará más tarde, la granularidad[28] paralela es gruesa, la cual es ideal para implementarse en equipos de cómputo paralelos como los Clusters, esto se demuestra mediante ejemplos en el capítulo de Análisis de Rendimiento (véase [64], [68] y [67]).

[28] La granularidad de un conjunto de tareas paralelas es la cantidad de trabajo que se puede hacer de forma independiente de otros cálculos.

6 Implementación Computacional Secuencial y Paralela de DDM

A partir de los modelos matemáticos y los modelos numéricos , en este capítulo se describe el modelo computacional contenido en un programa de cómputo orientado a objetos en el lenguaje de programación C++ en su forma secuencial y en su forma paralela en C++ usando la interfaz de paso de mensajes (MPI) bajo el esquema Maestro-Esclavo.

Esto no sólo nos ayudará a demostrar que es factible la construcción del propio modelo computacional a partir del modelo matemático y numérico para la solución de problemas reales. Además, se mostrarán los alcances y limitaciones en el consumo de los recursos computacionales, evaluando algunas de las variantes de los métodos numéricos con los que es posible implementar el modelo computacional y haremos el análisis de rendimiento sin llegar a ser exhaustivo.

También exploraremos los alcances y limitaciones de cada uno de los métodos implementados (MDF, FEM, DDM secuencial y paralelo) y como es posible optimizar los recursos computacionales con los que se cuente.

Primero hay que destacar que el paradigma de programación orientada a objetos es un método de implementación de programas, organizados como colecciones cooperativas de objetos. Cada objeto representa una instancia de alguna clase y cada clase es miembro de una jerarquía de clases unidas mediante relaciones de herencia, contención, agregación o uso.

Esto nos permite dividir en niveles la semántica de los sistemas complejos tratando así con las partes, que son más manejables que el todo, permitiendo su extensión y un mantenimiento más sencillo. Así, mediante la herencia, contención, agregación o uso nos permite generar clases especializadas que manejan eficientemente la complejidad del problema. La programación orientada a objetos organiza un programa en torno a sus datos (atributos) y a un conjunto de interfases bien definidas para manipular estos datos (métodos dentro de clases reusables) esto en oposición a los demás paradigmas de programación.

El paradigma de programación orientada a objetos sin embargo sacrifica algo de eficiencia computacional por requerir mayor manejo de recursos computacionales al momento de la ejecución. Pero en contraste, permite mayor flexibilidad al adaptar los códigos a nuevas especificaciones. Adicionalmente, disminuye notoriamente el tiempo invertido en el mantenimiento y búsqueda

de errores dentro del código. Esto tiene especial interés cuando se piensa en la cantidad de meses invertidos en la programación comparado con los segundos consumidos en la ejecución del mismo.

Para empezar con la implementación computacional, primero definiremos el problema a trabajar. Este, pese a su sencillez, no pierde generalidad permitiendo que el modelo mostrado sea usado en muchos sistemas de la ingeniería y la ciencia.

6.1 El Operador de Laplace y la Ecuación de Poisson

Consideramos como modelo matemático el problema de valor en la frontera (BVP) asociado con el operador de Laplace en dos dimensiones, el cual en general es usualmente referido como la ecuación de Poisson, con condiciones de frontera Dirichlet, definido en Ω como:

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u &= f_\Omega \text{ en } \Omega \\ u &= g_{\partial\Omega} \text{ en } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Se toma esta ecuación para facilitar la comprensión de las ideas básicas. Es un ejemplo muy sencillo, pero gobierna los modelos de muchos sistemas de la ingeniería y de la ciencia, entre ellos el flujo de agua subterránea a través de un acuífero isotrópico, homogéneo bajo condiciones de equilibrio y es muy usada en múltiples ramas de la física. Por ejemplo, gobierna la ecuación de la conducción de calor en un sólido bajo condiciones de equilibrio.

En particular consideramos el problema con Ω definido en:

$$\Omega = [-1, 1] \times [0, 1] \tag{6.2}$$

donde

$$f_\Omega = 2n^2\pi^2 \sin(n\pi x) * \sin(n\pi y) \quad \text{y} \quad g_{\partial\Omega} = 0 \tag{6.3}$$

cuya solución es

$$u(x, y) = \sin(n\pi x) * \sin(n\pi y). \tag{6.4}$$

Para las pruebas de rendimiento en las cuales se evalúa el desempeño de los programas realizados se usa $n = 10$, pero es posible hacerlo con $n \in \mathbb{N}$ grande. Por ejemplo para $n = 4$, la solución es $u(x, y) = \sin(4\pi x) * \sin(4\pi y)$, cuya gráfica se muestra a continuación:

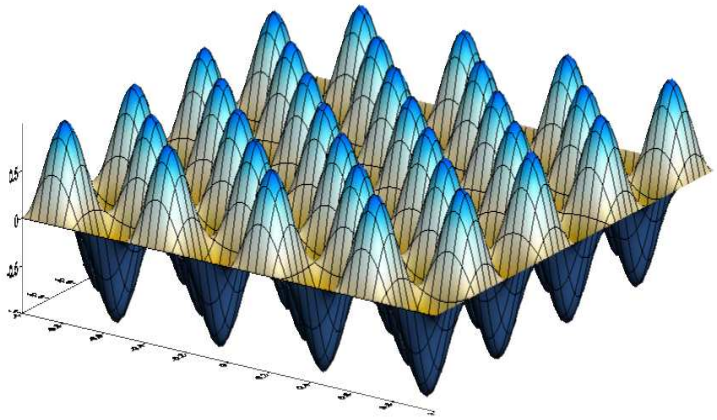


Figura 7: Solución a la ecuación de Poisson para n=4.

Hay que hacer notar que al implementar la solución numérica por el método de Diferencias Finitas, Elemento Finito y el método de Subestructuración secuencial en un procesador, un factor limitante para su operación es la cantidad de memoria disponible en la computadora, ya que el sistema algebraico de ecuaciones asociado a este problema crece muy rápido (del orden de n^2), donde n es el número de nodos en la partición. Es por ello que la elección de un buen manejador de matrices será determinante en la eficiencia alcanzada por las distintas implementaciones de los programas.

Actualmente existen múltiples bibliotecas que permiten manipular operaciones de matrices tanto en forma secuencial como en paralelo (hilos y Pipeline) para implementarlas tanto en procesadores con memoria compartida como distribuida. Pero no estan presentes en todas las arquitecturas y sistemas operativos. Por ello en este trabajo se implementaron todas las operaciones necesarias usando clases que fueron desarrolladas sin usar ninguna biblioteca externa a las proporcionadas por el compilador de C++ de GNU, permitiendo la operación de los programas desarrollados en múltiples sistemas operativos del tipo Linux, Unix y Windows.

En cuanto a las pruebas de rendimiento que mostraremos, se uso en la parte secuencial un equipo con las siguientes características:

- Computadora Pentium IV HT a 2.8 GHtz con 1 GB de RAM corriendo bajo el sistema operativo Linux Debian Stable con el compilador g++ de GNU.

Para las corridas en paralelo se usaron dos Clusters con las siguientes características:

- Cluster homogéneo de 10 nodos duales Xeon a 2.8 GHtz con 1 GB de RAM por nodo, unidos mediante una red Ethernet de 1 Gb, corriendo bajo el sistema operativo Linux Debian Stable con el compilador mpiCC de MPI de GNU.
- Cluster heterogéneo con el nodo maestro Pentium IV HT a 3.4 GHtz con 1 GB de RAM y 7 nodos esclavos Pentium IV HT a 2.8 GHtz con 0.5 GB de RAM por nodo, unidos mediante una red Ethernet de 100 Mb, corriendo bajo el sistema operativo Linux Debian Stable con el compilador mpiCC de MPI de GNU.

A estos equipos nos referiremos en lo sucesivo como equipo secuencial, cluster homogéneo y cluster heterogéneo respectivamente.

El tiempo dado en los resultados de las distintas pruebas de rendimiento de los programas y mostrado en todas las tablas y gráficas fue tomado como un promedio entre por lo menos 5 corridas, redondeando el resultado a la siguiente unidad. En todos los cálculos de los métodos numéricos usados para resolver el sistema lineal algebraico asociado se usó una tolerancia mínima de 1×10^{-10}.

Ahora, veremos la implementación del método de Diferencias Finitas secuencial para después continuar con el método de descomposición de dominio secuencial como paralelo para poder analizar en cada caso los requerimientos de cómputo, necesarios para correr eficientemente un problema en particular.

6.2 Método de Diferencias Finitas Secuencial

A partir de la formulación del método de Diferencias Finitas, la implementación computacional que se desarrolló tiene la siguiente jerarquía de clases:

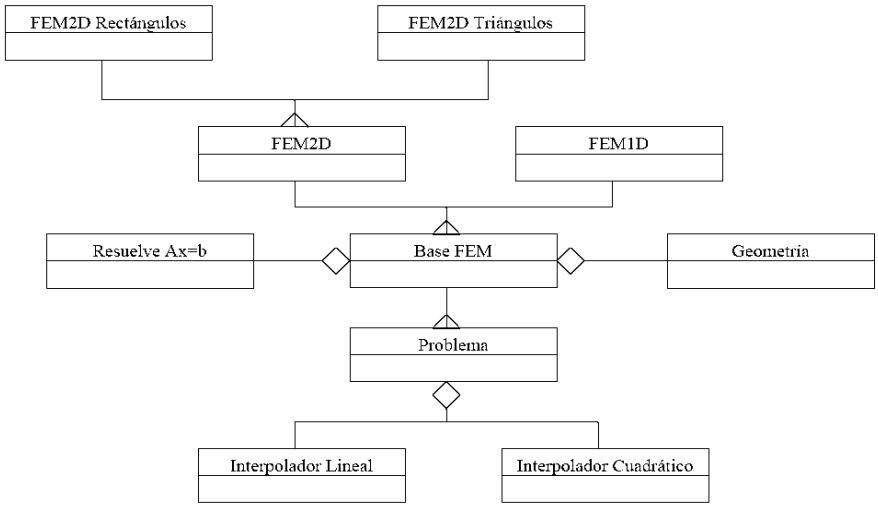


Figura 8: Jerarquía de clases para el método de elemento finito

Donde las clases participantes en *F_M2D Rectángulos* son:

La clase *Interpolador* define los interpoladores usados por el método.

La clase *Problema* define el problema a tratar, es decir, la ecuación diferencial parcial, valores de frontera y dominio.

La clase *Base F_M* ayuda a definir los nodos al usar la clase *Geometría* y mantiene las matrices generadas por el método y a partir de la clase *Resuelve Ax=B* se dispone de diversas formas de resolver el sistema lineal asociado al método.

La clase *F_M2D* controla lo necesario para poder hacer uso de la geometría en 2D y conocer los nodos interiores y de frontera, y con ellos poder montar la matriz de rigidez y ensamblar la solución.

La clase *F_M2D Rectángulos* permite calcular la matriz de rigidez para generar el sistema algebraico de ecuaciones asociado al método.

Notemos que esta misma jerarquía permite trabajar problemas en una y dos dimensiones, en el caso de dos dimensiones podemos discretizar usando rectángulos o triángulos, así como usar varias opciones para resolver el sistema lineal algebraico asociado a la solución de EDP.

Como ya se menciono, el método de Diferencias Finitas o Elemento Finito es un algoritmo secuencial, por ello se implementa para que use un solo procesador y un factor limitante para su operación es la cantidad de memoria disponible en la computadora, por ejemplo:

Resolver la Ec. (6.1) con una partición rectangular de 513×513 nodos, genera 262144 elementos rectangulares con 263169 nodos en total, donde 261121 son desconocidos; así el sistema algebraico de ecuaciones asociado a este problema es de dimensión 261121×261121.

Usando el equipo secuencial, primero evaluaremos el desempeño del método de Diferencias Finitas con los distintos métodos para resolver el sistema algebraico de ecuaciones, encontrando los siguientes resultados:

Método Iterativo	Iteraciones	Tiempo Total
Jacobi	865037	115897 seg.
Gauss-Seidel	446932	63311 seg.
Gradiente Conjugado	761	6388 seg.

Como se observa el uso del método de gradiente conjugado es por mucho la mejor elección. En principio, podríamos quedarnos solamente con el método de gradiente conjugado sin hacer uso de precondicionadores por los buenos rendimientos encontrados hasta aquí, pero si se desea resolver un problema con un gran número de nodos, es conocido el aumento de eficiencia al hacer uso de precondicionadores.

Ahora, si tomamos ingenuamente el método de Diferencias Finitas en conjunto con el método de gradiente conjugado con precondicionadores a posteriori (los más sencillos de construir) para resolver el sistema algebraico de ecuaciones, encontraremos los siguientes resultados:

Precondicionador	Iteraciones	Tiempo Total
Jacobi	760	6388 seg.
SSOR	758	6375 seg.
Factorización Incompleta	745	6373 seg.

Como es notorio el uso del método de gradiente conjugado precondicionado con precondicionadores a posteriori no ofrece una ventaja significativa que compense el esfuerzo computacional invertido al crear y usar un

precondicionador en los cálculos por el mal condicionamiento del sistema algebraico. Existen también precondicionadores a priori para el método de Diferencias Finitas, pero no es costeable en rendimiento su implementación.

Finalmente, para el método de Diferencias Finitas las posibles mejoras de eficiencia para disminuir el tiempo de ejecución pueden ser:

- Al momento de compilar los códigos usar directivas de optimización (ofrece mejoras de rendimiento en ejecución de 30% aproximadamente en las pruebas realizadas).
- Usar la biblioteca Lapack++ de licencia GNU que optimiza las operaciones en el manejo de los elementos de la matriz usando punteros y haciendo uso de matrices bandadas (obteniéndose una mejora del rendimiento de 15% aproximadamente en las pruebas realizadas).
- Combinando las opciones anteriores se obtiene una mejora sustancial de rendimiento en la ejecución (de 45% aproximadamente en las pruebas realizadas).

Adicionalmente si se cuenta con un equipo con más de un procesador con memoria compartida es posible usar bibliotecas para la manipulación de matrices y vectores que paralelizan o usan Pipeline como una forma de mejorar el rendimiento del programa. Este tipo de mejoras cuando es posible usarlas disminuyen sustancialmente el tiempo de ejecución, ya que en gran medida el consumo total de CPU esta en la manipulación de matrices, pero esto no hace paralelo al método de Diferencias Finitas.

6.3 Método de Subestructuración Secuencial

A partir de la formulación del método de subestructuración visto en la sección (5.3) se generan las matrices locales $\underline{\underline{A}}_i^{II}, \underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}, \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}$ y $\underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma}$ y con ellas se construyen $\underline{\underline{S}}_i = \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma} - \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}\left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$ y $\underline{b}_i = \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}\left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\underline{b}_{I_i}$ que son problemas locales a cada subdominio Ω_i, con $i = 1, 2, ..., E$. Generando de manera virtual el sistema lineal $\underline{\underline{S}}\,\underline{u_\Sigma} = \underline{b}$ a partir de

$$\left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{S}}_i\right] \underline{u_\Sigma} = \left[\sum_{i=1}^{E} \underline{b}_i\right] \tag{6.5}$$

donde $\underline{\underline{S}} = \left[\sum_{i=1}^{E} \underline{\underline{S}}_i\right]$ y $\underline{b} = \left[\sum_{i=1}^{E} \underline{b}_i\right]$ podría ser construida sumando las $\underline{\underline{S}}_i$ y $\underline{b}_i$ respectivamente según el orden de los nodos globales versus los nodos locales a cada subdominio.

El sistema lineal virtual resultante

$$\underline{\underline{S}}\underline{u_\Sigma} = \underline{b} \tag{6.6}$$

es resuelto usando el método de gradiente conjugado visto en la sección (11.2.1), para ello no es necesario construir la matriz $\underline{\underline{S}}$ con las contribuciones de cada S_i correspondientes al subdominio i. Lo que hacemos es pasar a cada subdominio el vector $\underline{u_\Sigma}^i$ correspondiente a la i-ésima iteración del método de gradiente conjugado para que en cada subdominio se evalué $\underline{\tilde{u}_\Sigma}^i = \underline{\underline{S}}_i \underline{u_\Sigma}^i$ localmente y con el resultado se forma el vector $\underline{\tilde{u}_\Sigma} = \sum_{i=1}^{E} \underline{\tilde{u}_\Sigma}^i$ y se continué con los demás pasos del método.

La implementación computacional que se desarrolló tiene una jerarquía de clases en la cual se agregan las clases *F_M2D Rectángulos* y *Geometría*, además de heredar a la clase *Problema*. De esta forma se reusó todo el código desarrollado para *F_M2D Rectángulos*, la jerarquía queda como:

> La clase *DDM2D* realiza la partición gruesa del dominio mediante la clase *Geometría* y controla la partición de cada subdominio mediante un objeto de la clase de *F_M2D Rectángulos* generando la partición fina del dominio. La resolución de los nodos de la frontera interior se hace mediante el método de gradiente conjugado, necesaria para resolver los nodos internos de cada subdominio.

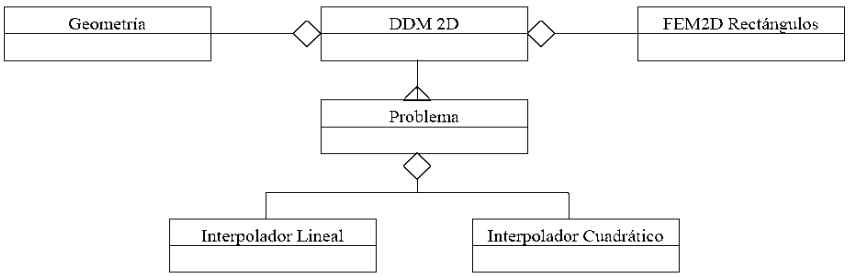


Figura 9: Jerarquía de clases para el método de subestructuración secuencial

Así, el dominio Ω es descompuesto en una descomposición gruesa de $n \times m$ subdominios y cada subdominio Ω_i se parte en $p \times q$ subdominios, generando la participación fina del dominio como se muestra en la figura:

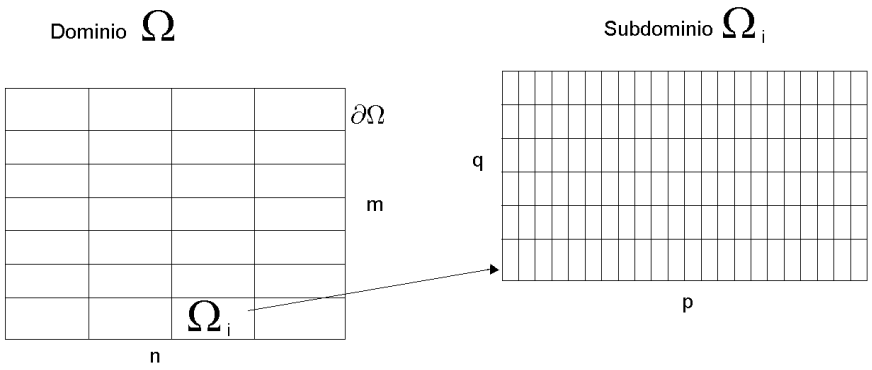


Figura 10: Descomposición del dominio Ω en $E = n \times m$ subdominios y cada subdominio Ω_i en $p \times q$ subdominios

El método de descomposición de dominio se implementó realizando las siguientes tareas:

A) La clase *DDM2D* genera la descomposición gruesa del dominio mediante la agregación de un objeto de la clase *Geometría* (supongamos particionado en $n \times m$ subdominios, generando $s = n * m$ subdominios Ω_i, $i = 1, 2, ..., E$).

B) Con esa geometría se construyen los objetos de *F_ M2D Rectángulos* (uno por cada subdominio Ω_i), donde cada subdominio es particionado (supongamos en $p \times q$ subdominios) y regresando las coordenadas de los nodos de frontera del subdominio correspondiente a la clase DDM2D.

C) Con estas coordenadas, la clase *DDM2D* conoce a los nodos de la frontera interior (son estos los que resuelve el método de descomposición de dominio). Las coordenadas de los nodos de la frontera interior se dan a conocer a los objetos *F_ M2D Rectángulos*, transmitiendo sólo aquellos que estan en su subdominio.

D) Después de conocer los nodos de la frontera interior, cada objeto *F_ M2D Rectángulos* calcula las matrices $\underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma}, \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}, \underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$

y $\underline{\underline{A}}_i^{II}$ necesarias para construir el complemento de Schur local $\underline{\underline{S}}_i = \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma} - \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}\left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$ sin realizar comunicación alguna. Al terminar de calcular las matrices se avisa a la clase *DDM2D* del termino de los cálculos.

E) Mediante la comunicación de vectores del tamaño del número de nodos de la frontera interior entre la clase *DDM2D* y los objetos *F_ M2D Rectángulos*, se prepara todo lo necesario para empezar el método de gradiente conjugado y resolver el sistema lineal virtual $\left[\sum_{i=1}^{E}\underline{\underline{S}}_i\right]\underline{u_\Sigma} = \left[\sum_{i=1}^{E}\underline{b}_i\right]$.

F) Para usar el método de gradiente conjugado, se transmite un vector del tamaño del número de nodos de la frontera interior para que en cada objeto se realicen las operaciones pertinentes y resolver así el sistema algebraico asociado, esta comunicación es de ida y vuelta entre la clase *DDM2D* y los objetos *F_ M2D Rectángulos* tantas veces como iteraciones haga el método. Resolviendo con esto los nodos de la frontera interior $\underline{u_{\Sigma_i}}$.

G) Al término de las iteraciones se pasa la solución $\underline{u_{\Sigma_i}}$ de los nodos de la frontera interior que pertenecen a cada subdominio dentro de cada objeto *F_ M2D Rectángulos* para que se resuelvan los nodos interiores $\underline{u_{I_i}} = \left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\left(\underline{b_{I_i}} - \underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}\underline{u_{\Sigma_i}}\right)$, sin realizar comunicación alguna en el proceso, al concluir se avisa a la clase *DDM2D* de ello.

I) La clase *DDM2D* mediante un último mensaje avisa que se concluya el programa, terminado así el esquema Maestro-Esclavo secuencial.

Por ejemplo, para resolver la Ec. (8.1), usando 513×513 nodos (igual al ejemplo de *F_ M2D Rectángulos* secuencial), podemos tomar alguna de las siguientes descomposiciones:

Descomposición	Nodos Interiores	Subdominios	Elementos Subdominio	Total Nodos Subdominio	Nodos Desconocidos Subdominio
2x2 y 256x256	260100	4	65536	66049	65025
4x4 y 128x128	258064	16	16384	16641	16129
8x8 y 64x64	254016	64	4096	4225	3969
16x16 y 32x32	246016	256	1024	1089	961
32x32 y 16x16	230400	1024	256	289	225

Cada una de las descomposiciones genera un problema distinto. Usando el equipo secuencial y evaluando el desempeño del método de subestructuración secuencial se obtuvieron los siguientes resultados:

Partición	Nodos Frontera Interior	Iteraciones	Tiempo Total
2x2 y 256x256	1021	139	5708 seg.
4x4 y 128x128	3057	159	2934 seg.
8x8 y 64x64	7105	204	1729 seg.
16x16 y 32x32	15105	264	1077 seg.
32x32 y 16x16	30721	325	1128 seg

Nótese que aún en un solo procesador es posible encontrar una descomposición que desminuya los tiempos de ejecución (la descomposición de 2x2 y 256x256 concluye en 5708 seg. versus los 6388 seg. en el caso de *F_M2D Rectángulos)*, ello es debido a que al descomponer el dominio en múltiples subdominios, la complejidad del problema es también disminuida y esto se ve reflejado en la disminución del tiempo de ejecución.

En la última descomposición, en lugar de disminuir el tiempo de ejecución este aumenta, esto se debe a que se construyen muchos objetos *F_M2D Rectángulos* (1024 en este caso), con los cuales hay que hacer comunicación resultando muy costoso computacionalmente.

Finalmente las posibles mejoras de eficiencia para el método de subestructuración secuencial para disminuir el tiempo de ejecución son las mismas que en el caso del método de Diferencias Finitas pero además se tiene que:

- Encontrar la descomposición pertinente entre las posibles descomposiciones que consuma el menor tiempo de cálculo.

Adicionalmente si se cuenta con un equipo con más de un procesador con memoria compartida es posible usar bibliotecas para la manipulación

de matrices y vectores que paralelizan o usan Pipeline como una forma de mejorar el rendimiento del programa. Este tipo de mejoras cuando es posible usarlas disminuyen sustancialmente el tiempo de ejecución, ya que en gran medida el consumo total de CPU esta en la manipulación de matrices, pero esto no hace paralelo al método de subestructuración secuencial.

6.4 Método de Subestructuración en Paralelo

La computación en paralelo es una técnica que nos permite distribuir una gran carga computacional entre muchos procesadores. Y es bien sabido que una de las mayores dificultades del procesamiento en paralelo es la coordinación de las actividades de los diferentes procesadores y el intercambio de información entre los mismos.

Para hacer una adecuada coordinación de actividades entre los diferentes procesadores, el programa que soporta el método de subestructuración paralelo, usa la misma jerarquía de clases que el método de subestructuración secuencial. Este se desarrolló para usar el esquema Maestro-Esclavo, de forma tal que el nodo maestro mediante la agregación de un objeto de la clase de *Geometría* genere la descomposición gruesa del dominio y los nodos esclavos creen un conjunto de objetos *F_M2D Rectángulos* para que en estos objetos se genere la participación fina y mediante el paso de mensajes (vía MPI) puedan comunicarse los nodos esclavos con el nodo maestro, realizando las siguientes tareas:

> A) El nodo maestro genera la descomposición gruesa del dominio (supongamos particionado en $n \times m$ subdominios) mediante la agregación de un objeto de la clase *Geometría*, esta geometría es pasada a los nodos esclavos.
>
> B) Con esa geometría se construyen los objetos *F_M2D Rectángulos* (uno por cada subdominio), donde cada subdominio es particionado (supongamos en $p \times q$ subdominios). Cada objeto de *F_M2D Rectángulos* genera la geometría solicitada, regresando las coordenadas de los nodos de frontera del subdominio correspondiente al nodo maestro.
>
> C) Con estas coordenadas, el nodo maestro conoce a los nodos de la frontera interior (son estos los que resuelve el método de descomposición de dominio). Las coordenadas de los nodos de la

frontera interior se dan a conocer a los objetos *F_ M2D Rectángulos* en los nodos esclavos, transmitiendo sólo aquellos que estan en su subdominio.

D) Después de conocer los nodos de la frontera interior, cada objeto *F_ M2D Rectángulos* calcula las matrices $\underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma}, \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}, \underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$ y $\underline{\underline{A}}_i^{II}$ necesarias para construir el complemento de Schur local $\underline{\underline{S}}_i = \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma} - \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}\left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$ sin realizar comunicación alguna. Al terminar de calcular las matrices se avisa al nodo maestro de la finalización de los cálculos.

E) Mediante la comunicación de vectores del tamaño del número de nodos de la frontera interior entre el nodo maestro y los objetos *F_ M2D Rectángulos*, se prepara todo lo necesario para empezar el método de gradiente conjugado y resolver el sistema lineal virtual $\left[\sum_{i=1}^{E}\underline{\underline{S}}_i\right]\underline{u_\Sigma} = \left[\sum_{i=1}^{E}\underline{b}_i\right]$.

F) Para usar el método de gradiente conjugado, se transmite un vector del tamaño del número de nodos de la frontera interior para que en cada objeto se realicen las operaciones pertinentes y resolver así el sistema algebraico asociado, esta comunicación se realiza de ida y vuelta entre el nodo maestro y los objetos *F_ M2D Rectángulos* tantas veces como iteraciones haga el método. Resolviendo con esto los nodos de la frontera interior $\underline{u_{\Sigma}}_i$.

G) Al término de las iteraciones se pasa la solución $\underline{u_{\Sigma}}_i$ de los nodos de la frontera interior que pertenecen a cada subdominio dentro de cada objeto *F_ M2D Rectángulos* para que se resuelvan los nodos interiores $\underline{u_I}_i = \left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\left(\underline{b_I}_i - \underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}\underline{u_\Sigma}_i\right)$, sin realizar comunicación alguna en el proceso, al concluir se avisa al nodo maestro de ello.

I) El nodo maestro mediante un último mensaje avisa que se concluya el programa, terminado así el esquema Maestro-Esclavo.

Del algoritmo descrito anteriormente hay que destacar la sincronía entre el nodo maestro y los objetos *F_ M2D Rectángulos* contenidos en los nodos esclavos, esto es patente en las actividades realizadas en los incisos A, B y C, estas consumen una parte no significativa del tiempo de cálculo.

Una parte importante del tiempo de cálculo es consumida en la generación de las matrices locales descritas en el inciso D que se realizan de forma independiente en cada nodo esclavo, esta es muy sensible a la discretización particular del dominio usado en el problema.

Los incisos E y F del algoritmo consumen la mayor parte del tiempo total del ejecución al resolver el sistema lineal que dará la solución a los nodos de la frontera interior. La resolución de los nodos interiores planteada en el inciso G consume muy poco tiempo de ejecución, ya que sólo se realiza una serie de cálculos locales previa transmisión del vector que contiene la solución a los nodos de la frontera interior.

Este algoritmo es altamente paralelizable ya que los nodos esclavos estan la mayor parte del tiempo ocupados y la fracción serial del algoritmo esta principalmente en las actividades que realiza el nodo maestro, estas nunca podrán ser eliminadas del todo pero consumirán menos tiempo del algoritmo conforme se haga más fina la malla en la descomposición del dominio.

Para resolver la Ec. (6.1), usando 513×513 nodos (igual al ejemplo de *F_M2D Rectángulos* secuencial), en la cual se toma una partición rectangular gruesa de 4×4 subdominios y cada subdominio se descompone en 128×128 subdominios.

Usando para los cálculos en un procesador el equipo secuencial y para la parte paralela el cluster heterogéneo resolviendo por el método de gradiente conjugado sin precondicionador, la solución se encontró en 159 iteraciones obteniendo los siguientes valores:

Procesadores	Tiempo	Factor de Aceleración	Eficiencia	Fracción Serial
1	2943 seg.			
2	2505 seg.	1.17485	0.58742	0.70234
3	1295 seg.	2.27258	0.75752	0.16004
4	1007 seg.	2.92254	0.73063	0.12289
5	671 seg.	4.38599	0.87719	0.03499
6	671 seg.	4.38599	0.73099	0.07359
7	497seg.	5.92152	0.84593	0.03035
8	497 seg.	5.92152	0.74019	0.05014
9	359 seg.	8.19777	0.91086	0.01223
10	359 seg.	8.19777	0.81977	0.02442
11	359 seg.	8.19777	0.74525	0.03441
12	359 seg.	8.19777	0.68314	0.04216
13	359 seg.	8.19777	0.63059	0.04881
14	359 seg.	8.19777	0.58555	0.05444
15	359 seg.	8.19777	0.54651	0.05926
16	359 seg.	8.19777	0.51236	0.06344
17	188 seg	15.65425	0.92083	0.00537

Estos resultados pueden ser apreciados mejor de manera gráfica como se muestra a continuación:

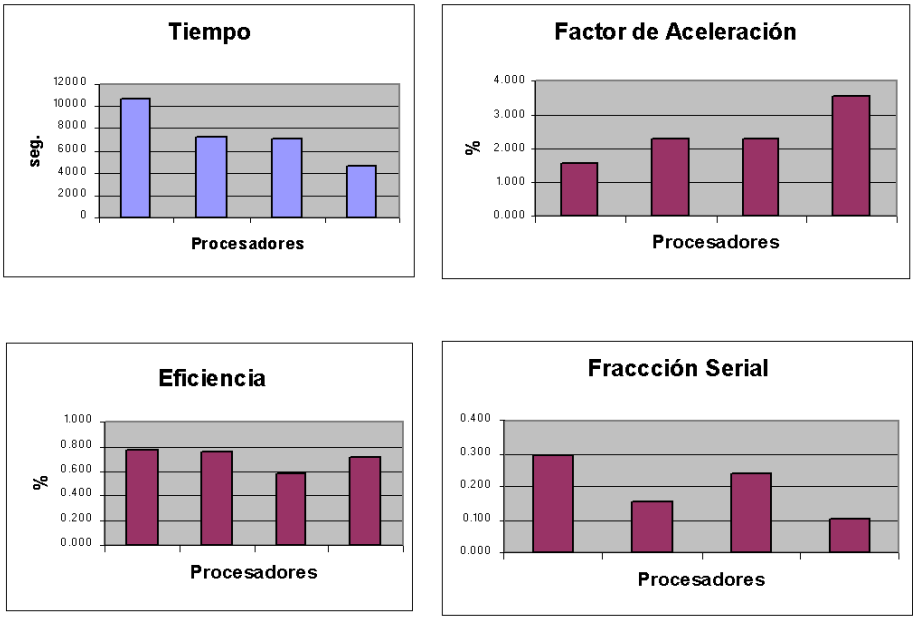


Figura 11: Métricas de desempeño de 2 a 17 procesadores

Primeramente notemos que existe mal balanceo de cargas. La descomposición adecuada del dominio para tener un buen balanceo de cargas se logra cuando se descompone en $n \times m$ nodos en la partición gruesa, generándose $n*m$ subdominios y si se trabaja con P procesadores (1 para el nodo maestro y $P-1$ para los nodos esclavos), entonces el balance de cargas adecuado será cuando $(P-1) \mid (n*m)$.

En nuestro caso se logra un buen balanceo de cargas cuando se tienen $2, 3, 5, 9, 17$ procesadores, cuyas métricas de desempeño se muestran a continuación:

En cuanto a las métricas de desempeño, obtenemos que el factor de aceleración en el caso ideal debería de aumentar de forma lineal al aumento del número de procesadores, que en nuestro caso no es lineal pero cumple bien este hecho si estan balanceadas las cargas de trabajo.

El valor de la eficiencia deberá ser cercano a uno cuando el hardware es usado de manera eficiente, como es en nuestro caso cuando se tiene un procesador por cada subdominio.

Y en la fracción serial su valor debiera de tender a cero en el caso ideal,

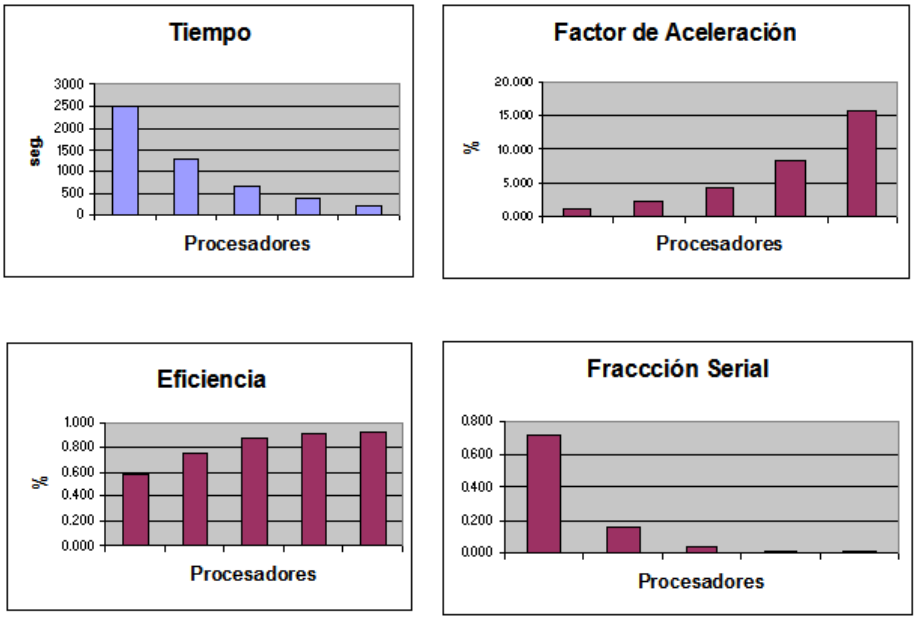


Figura 12: Métricas de desempeño mostrando sólo cuando las cargas están bien balanceadas (2, 3, 5, 9 y 17 procesadores).

siendo este nuestro caso si estan balanceadas las cargas de trabajo, de aquí se puede concluir que la granularidad del problema es gruesa, es decir, no existe una sobrecarga en los procesos de comunicación siendo el cluster una buena herramienta de trabajo para este tipo de problemas.

Finalmente las posibles mejoras de eficiencia para el método de subestructuración en paralelo para disminuir el tiempo de ejecución pueden ser:

- Balanceo de cargas de trabajo homogéneo.
- Al compilar los códigos usar directivas de optimización.
- Usar bibliotecas que optimizan las operaciones en el manejo de los elementos de la matriz usando punteros en las matrices densas o bandadas.
- El cálculo de las matrices que participan en el complemento de Schur pueden ser obtenidas en paralelo.

6.5 Método de Subestructuración en Paralelo Precondicionado

En este método a diferencia del método de subestructuración paralelo, se agrega un precondicionador al método de gradiente conjugado precondicionado visto en la sección (11.2.1) a la hora de resolver el sistema algebraico asociado al método de descomposición de dominio.

En este caso por el mal condicionamiento de la matriz, los precondicionadores a posteriori no ofrecen una ventaja real a la hora de solucionar el sistema lineal algebraico. Es por ello que usaremos los precondicionadores a priori. Estos son más particulares y su construcción depende del proceso que origina el sistema lineal algebraico.

Existe una amplia gama de este tipo de precondicionadores, pero son específicos al método de descomposición de dominio usado. Para el método de subestructuración usaremos el derivado de la matriz de rigidez, este no es el precondicionador óptimo para este problema, pero para fines demostrativos nos vasta.

La implementación de los métodos a priori, requieren de más trabajo tanto en la face de construcción como en la parte de su aplicación, la gran ventaja de este tipo de precondicionadores es que pueden ser óptimos, es decir, para ese problema en particular el precondicionador encontrado será el mejor precondicionador existente, llegando a disminuir el número de iteraciones hasta en un orden de magnitud.

Por ejemplo, al resolver la Ec. (6.1) usando 513×513 nodos en la cual se toma una partición rectangular gruesa de 4×4 subdominios y cada subdominio se descompone en 128×128 subdominios.

Usando para el cálculo en un procesador el equipo secuencial y para la parte paralela el cluster heterogéneo resolviendo por el método de gradiente conjugado con precondicionador la solución se encontró en 79 iteraciones (una mejora en promedio cercana al 50 % con respecto a no usar precondicionador 159 iteraciones) obteniendo los siguientes valores:

Procesadores	Tiempo	Factor de Aceleración	Eficiencia	Fracción Serial
1	2740 seg.			
2	2340 seg.	1.17094	0.58547	0.70802
3	1204 seg.	2.27574	0.75858	0.15912
4	974 seg.	2.81314	0.70328	0.14063
5	626 seg.	4.37699	0.87539	0.03558
6	626 seg.	4.37699	0.72949	0.07416
7	475 seg.	5.76842	0.82406	0.03558
8	475 seg.	5.76842	0.72105	0.05526
9	334 seg.	8.20359	0.91151	0.01213
10	334 seg.	8.20359	0.82035	0.02433
11	334 seg.	8.20359	0.74578	0.03408
12	334 seg.	8.20359	0.68363	0.04207
13	334 seg.	8.20359	0.63104	0.04872
14	334 seg.	8.20359	0.58597	0.05435
15	334 seg.	8.20359	0.54690	0.05917
16	334 seg.	8.20359	0.51272	0.06335
17	173 seg.	15.83815	0.93165	0.00458

Estos resultados pueden ser apreciados mejor de manera gráfica como se muestra a continuación:

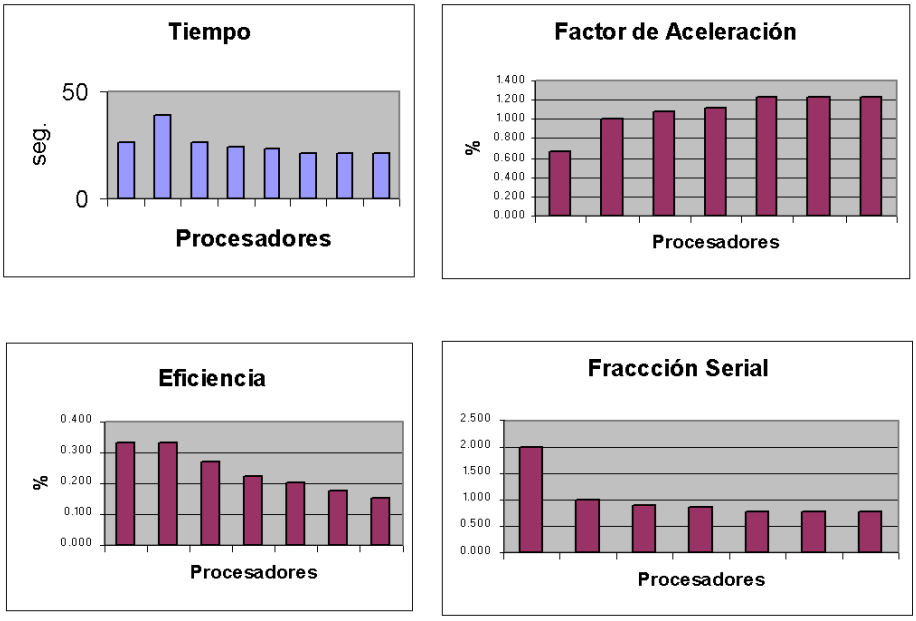


Figura 13: Métricas de desempeño de 2 a 17 procesadores

De las métricas de desempeño, se observa que el factor de aceleración, en el caso ideal debería de aumentar de forma lineal al aumentar el número de procesadores, que en nuestro caso no es lineal pero cumple bien este hecho si esta balanceada las cargas de trabajo.

En la eficiencia su valor deberá ser cercano a uno cuando el hardware es usado de manera eficiente, como es en nuestro caso cuando se tiene un procesador por cada subdominio. Y en la fracción serial su valor debiera de tender a cero en el caso ideal, siendo este nuestro caso si estan balanceadas las cargas de trabajo.

En este ejemplo, como en el caso sin precondicionador el mal balanceo de cargas esta presente y es cualitativamente igual, para este ejemplo se logra un buen balanceo de cargas cuando se tienen $2, 3, 5, 9, 17$ procesadores, cuyas métricas de desempeño se muestran a continuación:

Las mismas mejoras de eficiencia que para el método de subestructuración en paralelo son aplicables a este método, adicionalmente:

- Usar el mejor precondicionador a priori disponible para el problema en particular, ya que esto disminuye sustancialmente el

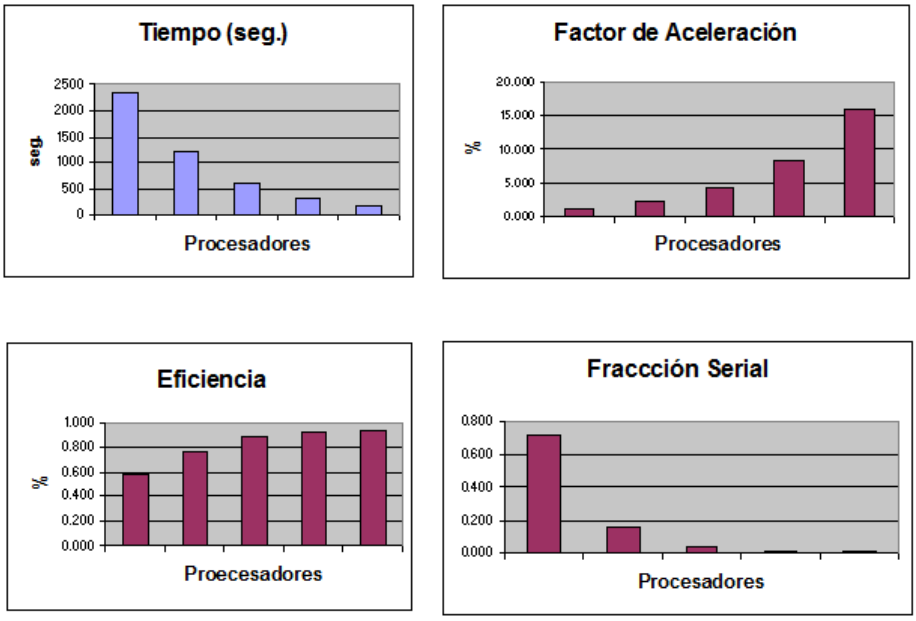


Figura 14: Métricas de desempeño mostrando sólo cuando las cargas están bien balanceadas (2, 3, 5, 9 y 17 procesadores).

número de iteraciones (hasta en un orden de magnitud cuando el precondicionador es óptimo).

7 Análisis de Rendimiento y Observaciones para el método DDM

Uno de los grandes retos del área de cómputo científico es poder analizar a priori una serie consideraciones dictadas por factores externos al problema de interés que repercuten directamente en la forma de solucionar el problema, estas consideraciones influirán de manera decisiva en la implementación computacional de la solución numérica. Algunas de estas consideraciones son:

- Número de Procesadores Disponibles
- Tamaño y Tipo de Partición del Dominio
- Tiempo de Ejecución Predeterminado

Siendo común que ellas interactúan entre si, de forma tal que normalmente el encargado de la implementación computacional de la solución numérica tiene además de las complicaciones técnicas propias de la solución, el conciliarlas con dichas consideraciones.

Esto deja al implementador de la solución numérica con pocos grados de libertad para hacer de la aplicación computacional una herramienta eficiente y flexible que cumpla con los lineamientos establecidos a priori y permita también que esta sea adaptable a futuros cambios de especificaciones –algo común en ciencia e ingeniería—.

En este capítulo haremos el análisis de los factores que merman el rendimiento de la aplicación y veremos algunas formas de evitarlo, haremos una detallada descripción de las comunicaciones entre el nodo principal y los nodos esclavos, la afectación en el rendimiento al aumentar el número de subdominios en la descomposición y detallaremos algunas consideraciones generales para aumentar el rendimiento computacional. También daremos las conclusiones generales a este trabajo y veremos las diversas ramificaciones que se pueden hacer en trabajos futuros.

7.1 Análisis de Comunicaciones

Para hacer un análisis de las comunicaciones entre el nodo principal y los nodos esclavos en el método de subestructuración es necesario conocer qué se trasmite y su tamaño, es por ello detallaremos en la medida de lo posible las comunicaciones existentes (hay que hacer mención que entre los nodos esclavos no hay comunicación alguna).

Tomando la descripción del algoritmo detallado en el método de subestructuración en paralelo visto en la sección (6.4), suponiendo una partición del dominio Ω en $n \times m$ y $p \times q$ subdominios, las comunicaciones correspondientes a cada inciso son:

A) El nodo maestro transmite 4 coordenadas (en dos dimensiones) correspondientes a la delimitación del subdominio.

B) $2{*}p{*}q$ coordenadas transmite cada objeto *F_ M2D Rectángulos* al nodo maestro.

C) A lo más $n * m * 2 * p * q$ coordenadas son las de los nodos de la frontera interior, y sólo aquellas correspondientes a cada subdominio son trasmitidas por el nodo maestro a los objetos *F_ M2D Rectángulos* siendo estas a lo más $2 * p * q$ coordenadas.

D) Sólo se envía un aviso de la conclusión del cálculo de las matrices.

E) A lo más $2 * p * q$ coordenadas son transmitidas a los objetos *F_ M2D Rectángulos* desde el nodo maestro y los nodos esclavos transmiten al nodo maestro esa misma cantidad información.

F) A lo más $2 * p * q$ coordenadas son transmitidas a los objetos *F_ M2D Rectángulos* en los nodos esclavos y estos retornan un número igual al nodo maestro por iteración del método de gradiente conjugado.

G) A lo más $2 * p * q$ valores de la solución de la frontera interior son transmitidas a los objetos *F_ M2D Rectángulos* desde el nodo maestro y cada objeto transmite un único aviso de terminación.

I) El nodo maestro manda un aviso a cada objeto *F_ M2D Rectángulos* para concluir con el esquema.

La transmisión se realiza mediante paso de arreglos de enteros y números de punto flotante que varían de longitud pero siempre son cantidades pequeñas de estos y se transmiten en forma de bloque, por ello las comunicaciones son eficientes.

7.2 Afectación del Rendimiento al Aumentar el Número de Subdominios en la Descomposición

Una parte fundamental a considerar es la afectación del rendimiento al aumentar el número de subdominios en descomposición, ya que el complemento de Schur local $\underline{\underline{S}}_i = \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma} - \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}\left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$ involucra el generar las matrices $\underline{\underline{A}}_i^{II}, \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma\Sigma}, \underline{\underline{A}}_i^{\Sigma I}, \underline{\underline{A}}_i^{I\Sigma}$ y calcular de alguna forma $\left(\underline{\underline{A}}_i^{II}\right)^{-1}$.

Si el número de nodos interiores en el subdominio es grande entonces obtener la matriz anterior será muy costoso computacionalmente, como se ha mostrado en el transcurso de las últimas secciones del capítulo anterior.

Al aumentar el número de subdominios en una descomposición particular, se garantiza que las matrices a generar y calcular sean cada vez más pequeñas y fáciles de manejar.

Pero hay un límite al aumento del número de subdominio en cuanto a la eficiencia de ejecución, este cuello de botella es generado por el esquema Maestro-Esclavo y es reflejado por un aumento del tiempo de ejecución al aumentar el número de subdominios en una configuración de hardware particular.

Esto se debe a que en el esquema Maestro-Esclavo, el nodo maestro deberá de atender todas las peticiones hechas por cada uno de los nodos esclavos, esto toma especial relevancia cuando todos o casi todos los nodos esclavos compiten por ser atendidos por el nodo maestro.

Por ello se recomienda implementar este esquema en un cluster heterogéneo en donde el nodo maestro sea más poderoso computacionalmente que los nodos esclavos. Si a éste esquema se le agrega una red de alta velocidad y de baja latencia, se le permitirá operar al cluster en las mejores condiciones posibles, pero este esquema se verá degradado al aumentar el número de nodos esclavos inexorablemente. Por ello hay que ser cuidadosos en cuanto al número de nodos esclavos que se usan en la implementación en tiempo de ejecución versus el rendimiento general del sistema al aumentar estos.

7.3 Descomposición Óptima para un Equipo Paralelo Dado.

Otra cosa por considerar es que normalmente se tiene a disposición un número fijo de procesadores, con los cuales hay que trabajar, así que es necesario

encontrar la descomposición adecuada para esta cantidad de procesadores. No es posible hacer un análisis exhaustivo, pero mediante pruebas podemos determinar cual es la mejor descomposición en base al tiempo de ejecución.

Para el análisis, consideremos pruebas con $3, 4, 5$ y 6 procesadores y veremos cual es la descomposición más adecuada para esta cantidad de procesadores tomando como referencia el resolver la Ec. (6.1), usando 513×513 nodos.

Usando para estos cálculos el cluster homogéneo, al resolver por el método de gradiente conjugado precondicionado para cada descomposición se obtuvieron los siguientes resultados:

Partición	Tiempo en 3 Procesadores	Tiempo en 4 Procesadores	Tiempo en 5 Procesadores	Tiempo en 6 Procesadores
2×2 y 256×256	2576 seg.	2084 seg.	1338 seg.	–
4×4 y 128×128	1324 seg.	1071 seg.	688 seg.	688 seg.
8×8 y 64×64	779 seg.	630 seg.	405 seg.	405 seg.
16×16 y 32×32	485 seg.	391 seg.	251 seg.	251 seg.

De estas pruebas se observa que el mal balanceo de cargas es reflejado en los tiempos de ejecución, pese a contar con más procesadores no hay una disminución del tiempo de ejecución.

Ahora para las mismas descomposiciones, usando el cluster heterogéneo para cada descomposición se obtuvieron los siguientes resultados:

Partición	Tiempo en 3 Procesadores	Tiempo en 4 Procesadores	Tiempo en 5 Procesadores	Tiempo en 6 Procesadores
2×2 y 256×256	2342 seg.	1895 seg.	1217 seg.	–
4×4 y 128×128	1204 seg.	974 seg.	626 seg.	626 seg.
8×8 y 64×64	709 seg.	573 seg.	369 seg.	369 seg.
16×16 y 32×32	441 seg.	356 seg.	229 seg.	229 seg.

Primeramente hay que destacar que los nodos esclavos de ambos clusters son comparables en poder de cómputo, pero aquí lo que hace la diferencia es que el nodo maestro del segundo ejemplo tiene mayor rendimiento. Es por ello que al disminuir la fracción serial del problema y atender mejor las comunicaciones que se generan en el esquema Maestro-Esclavo con todos los objetos *F_M2D Rectángulos* creados en cada uno de los nodos esclavos mejora sustancialmente el tiempo de ejecución.

En ambas pruebas el mal balanceo de cargas es un factor determinante del rendimiento, sin embargo el usó de un cluster en el que el nodo maestro sea más poderoso computacionalmente, hará que se tenga una mejora sustancial en el rendimiento.

Para evitar el mal balanceo de cargas se debe de asignar a cada nodo esclavo una cantidad de subdominios igual. La asignación mínima del número de nodos por subdominio queda sujeta a la velocidad de los procesadores involucrados para disminuir en lo posible los tiempos muertos, obteniendo así el máximo rendimiento.

La asignación máxima del número de nodos por subdominio a cada nodo esclavo, estará en función de la memoria que consuman las matrices que contienen cada uno de los objetos de *F_ M2D Rectángulos*. La administración de ellos y las comunicaciones no son un factor limitante y por ello se pueden despreciar.

Descomposición Fina del Dominio Supongamos ahora que deseamos resolver el problema de una descomposición fina del dominio Ω en 65537×65537 nodos, este tipo de problemas surgen cotidianamente en la resolución de sistemas reales y las opciones para implantarlo en un equipo paralelo son viables, existen y son actualmente usadas. Aquí las opciones de partición del dominio son muchas y variadas, y la variante seleccionada dependerán fuertemente de las características del equipo de cómputo paralelo del que se disponga, es decir, si suponemos que una descomposición de 1000×1000 nodos en un subdominio consume 1 GB de RAM y el consumo de memoria crece linealmente con el número de nodos, entonces algunas posibles descomposiciones son:

Procesadores	Descomposición	Nodos Subdominio	RAM Mínimo
5	2×2 y 32768×32768	32768×32768	≈33.0 GB
257	16×16 y 4096×4096	4096×4096	≈4.0 GB
1025	32×32 y 2048×2048	2048×2048	≈2.0 GB
4097	64×64 y 1024×1024	1024×1024	≈1.0 GB

Notemos que para las primeras particiones, el consumo de RAM es excesivo y en las últimas particiones la cantidad de procesadores en paralelo necesarios es grande (pero ya de uso común en nuestros días). Como en general, contar con equipos paralelos de ese tamaño es en extremo difícil, ¿es posible resolver este tipo de problemas con una cantidad de procesadores

menor al número sugerido y donde cada uno de ellos tiene una memoria muy por debajo de lo sugerido?, la respuesta es si.

Primero, notemos que al considerar una descomposición del tipo 64×64 y 1024×1024 subdominios requerimos aproximadamente 1.0 GB de RAM mínimo por nodo, si suponemos que sólo tenemos unos cuantos procesadores con memoria limitada (digamos 2 GB), entonces no es posible tener en memoria de manera conjunta a las matrices generadas por el método.

Una de las grandes ventajas de los métodos de descomposición de domino es que los subdominios son en principio independientes entre si y que sólo estan acoplados a través de la solución en la interfaz de los subdominios que es desconocida.

Como sólo requerimos tener en memoria la información de la frontera interior, es posible bajar a disco duro todas las matrices y datos complementarios (que consumen el 99% de la memoria del objeto *F_M2D Rectángulos*) generados por cada subdominio que no se requieran en ese instante para la operación del esquema maestroesclavo.

Recuperando del disco duro solamente los datos del subdominio a usarse en ese momento (ya que el proceso realizado por el nodo maestro es secuencial) y manteniéndolos en memoria por el tiempo mínimo necesario. Así, es posible resolver un problema de una descomposición fina, usando una cantidad de procesadores fija y con una cantidad de memoria muy limitada por procesador.

En un caso extremo, la implementación para resolver un dominio Ω descompuesto en un número de nodos grande es posible implementarla usando sólo dos procesos en un procesador, uno para el proceso maestro y otro para el proceso esclavo, en donde el proceso esclavo construiría las matrices necesarias por cada subdominio y las guardaría en disco duro, recuperándolas conforme el proceso del nodo maestro lo requiera. Nótese que la descomposición del domino Ω estará sujeta a que cada subdominio Ω_i sea soportado en memoria conjuntamente con los procesos maestro y esclavo.

De esta forma es posible resolver un problema de gran envergadura usando recursos computacionales muy limitados, sacrificando velocidad de procesamiento en aras de poder resolver el problema. esta es una de las grandes ventajas de los métodos de descomposición de dominio con respecto a los otros métodos de discretización tipo diferencias finitas.

El ejemplo anterior nos da una buena idea de las limitantes que existen en la resolución de problemas con dominios que tienen una descomposición fina y nos pone de manifiesto las características mínimas necesarias del equipo

paralelo para soportar dicha implantación.

7.4 Consideraciones para Aumentar el Rendimiento

Algunas consideraciones generales para aumentar el rendimiento son:

a) Balanceo de cargas de trabajo homogéneo, si se descompone en $n \times m$ subdominios en la partición gruesa se y si se trabaja con P procesadores, entonces el balance de cargas adecuado será cuando $(P-1) \mid (n*m)$.), ya que de no hacerlo el rendimiento se ve degradado notoriamente.

b) Usar el mejor precondicionador a priori disponible para el problema en particular, ya que esto disminuye sustancialmente el número de iteraciones (hasta en un orden de magnitud cuando el precondicionador es óptimo).

c) Usar la biblioteca Lapack++ de licencia GNU que optimiza las operaciones en el manejo de los elementos de la matriz usando punteros en donde se usan matrices densas y bandadas.

d) Si se cuenta con un equipo en que cada nodo del cluster tenga más de un procesador, usar bibliotecas (PLAPACK por ejemplo) que permitan paralelizar mediante el uso de procesos con memoria compartida, Pipeline o hilos, las operaciones que involucren a vectores y matrices; como una forma de mejorar el rendimiento del programa.

e) Siempre usar al momento de compilar los códigos, directivas de optimización (estas ofrecen mejoras de rendimiento en la ejecución de 30% aproximadamente en las pruebas realizadas), pero existen algunos compiladores con optimizaciones especificas para ciertos procesadores (Intel compiler para 32 y 64 bits) que pueden mejorar aun más este rendimiento (más de 50%).

Todas estas mejoras pueden ser mayores si se usa un nodo maestro del mayor poder computacional posible aunado a una red en el cluster de de 1 Gb o mayor y de ser posible de baja latencia, si bien las comunicaciones son pocas, estas pueden generar un cuello de botella sustancial.

Por otro lado, hay que hacer notar que es posible hacer usó de múltiples etapas de paralelización que pueden realizarse al momento de implantar el

método de descomposición de dominio, estas se pueden implementar conforme se necesite eficiencia adicional, pero implica una cuidadosa planeación al momento de hacer el análisis y diseño de la aplicación y una inversión cuantiosa en tiempo para implantarse en su totalidad, estas etapas se describen a continuación:

- El propio método de descomposición de dominio ofrece un tipo particular y eficiente de paralelización al permitir dividir el dominio en múltiples subdominios independientes entre si, interconectados sólo por la frontera interior.
- A nivel subdominio otra paralelización es posible, específicamente en el llenado de las matrices involucradas en el método de descomposición de dominio, ya que varias de ellas son independientes.
- A nivel de los cálculos, entre matrices y vectores involucrados en el método también se pueden paralelizar de manera muy eficiente.
- A nivel del compilador es posible generar el ejecutable usando esquemas de paralelización automático y opciones para eficientizar la ejecución.

Por lo anterior es posible usar una serie de estrategias que permitan realizar estas etapas de paralelización de manera cooperativa y aumentar la eficiencia en una factor muy significativo, pero esto implica una programación particular para cada una de las etapas y poder distribuir las tareas paralelas de cada etapa en uno o más procesadores distintos a los de las otras etapas.

Notemos finalmente que si se toma el programa de Diferencias Finitas y se paraleliza usando sólo directivas de compilación, el aumento del rendimiento es notorio pero este se merma rápidamente al aumentar del número de nodos (esto es debido al aumento en las comunicaciones para mantener y acceder a la matriz del sistema algebraico asociado al método). Pero es aun más notorio cuando el método de descomposición de dominio serial usando las mismas directivas de compilación se paraleliza (sin existir merma al aumentar el número de nodos siempre y cuando las matrices generadas esten el la memoria local del procesador).

Esto se debe a que en el método de Diferencias Finitas la matriz estará distribuida por todos los nodos usando memoria distribuida, esto es muy costoso en tiempo de cómputo ya que su manipulación requiere de múltiples

comunicaciones entre los procesadores, en cambio el el método de descomposición de dominio ya estan distribuidas las matrices en los nodos y las operaciones sólo involucran transmisión de un vector entre ellos, minimizando las comunicaciones entre procesadores.

Pero aún estos rendimientos son pobres con respecto a los obtenidos al usar el método de descomposición de dominio paralelizado conjuntamente con bibliotecas para manejo de matrices densas y dispersas en equipos con nodos que cuenten con más de un procesador, en donde mediante el uso de memoria compartida se pueden usar el resto de los procesadores dentro del nodo para efectuar en paralelo las operaciones en donde esten involucradas las matrices.

7.5 Observaciones

A lo largo del presente trabajo se ha mostrado que al aplicar métodos de descomposición de dominio conjuntamente con métodos de paralelización es posible resolver una gama más amplia de problemas de ciencias e ingeniería que mediante las técnicas tradicionales del tipo Diferencias Finitas.

La resolución del sistema algebraico asociado es más eficiente cuando se hace uso de precondicionadores a priori conjuntamente con el método de gradiente conjugado precondicionado o Residual mínimo generalizado al implantar la solución por el método de descomposición de dominio.

Y haciendo uso del análisis de rendimiento, es posible encontrar la manera de balancear las cargas de trabajo que son generadas por las múltiples discretizaciones que pueden obtenerse para la resolución de un problema particular, minimizando en la medida de lo posible el tiempo de ejecución y adaptándolo a la arquitectura paralela disponible, esto es especialmente útil cuando el sistema a trabajar es de tamaño considerable.

Adicionalmente se vieron los alcances y limitaciones de esta metodología, permitiendo tener cotas tanto para conocer las diversas descomposiciones que es posible generar para un número de procesadores fijo, como para conocer el número de procesadores necesarios en la resolución de un problema particular. También se vio una forma de usar los métodos de descomposición de dominio en casos extremos en donde una partición muy fina, genera un problema de gran envergadura y como resolver este usando recursos computacionales muy limitados, sacrificando velocidad de procesamiento en aras de poder resolver el problema.

Así, podemos afirmar de manera categórica que conjuntando los métodos

de descomposición de dominio, la programación orientada a objetos y esquemas de paralelización que usan el paso de mensajes, es posible construir aplicaciones que coadyuven a la solución de problemas en dos o más dimensiones concomitantes en ciencia e ingeniería, los cuales pueden ser de tamaño considerable.

Las aplicaciones desarrolladas bajo este paradigma serán eficientes, flexibles y escalables; a la vez que son abiertas a nuevas tecnologías y desarrollos computacionales y al ser implantados en clusters, permiten una codificación ordenada y robusta, dando con ello una alta eficiencia en la adaptación del código a nuevos requerimientos, como en la ejecución del mismo.

De forma tal que esta metodología permite tener a disposición de quien lo requiera, una gama de herramientas flexibles y escalables para coadyuvar de forma eficiente y adaptable a la solución de problemas en medios continuos de forma sistemática.

8 Implementación Computacional Secuencial y Paralela de DVS

La implementación computacional de los métodos de descomposición de dominio sin traslape en general (véase [10], [5], [6] y [7]) y de los métodos de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados (DVS) en particular (véase [68] y [67]), en los cuales cada subdominio genera sus matrices locales y el método que resuelve el sistema global virtual —CGM o GMRES— es tal que necesita sólo una porción de la información que generan los subdominios, queda fácilmente estructurado mediante el esquema Maestro-Esclavo, tanto para la implementación del código secuencial como paralela.

El esquema Maestro-Esclavo parece ser un forma óptima[29] de dividir la carga computacional requerida para solucionar un problema de descomposición de dominio sin traslapes, en el cual, uno o más subdominios son asignados a un nodo esclavo, tanto en su implementación secuencial —donde cada nodo esclavo es un objeto— como en su implementación paralela —donde cada nodo esclavo esta asignado a un procesador—, en el cual el nodo maestro de forma síncrona controla las tareas que requiere el esquema DVS, las cuales son llevadas a cabo por los nodos esclavos, donde la comunicación sólo se da entre el nodo maestro y cada nodo esclavo —no existiendo comunicación entre los nodos esclavos—, optimizando así las comunicaciones.

8.1 Esquema Maestro-Esclavo como una Forma de Implementación

El esquema Maestro-Esclavo permite que en los nodos esclavos se definan uno o más subdominios —en los cuales se generen y manipulen las matrices locales de cada subdominio— y que el maestro controle las actividades necesarias para implementar cualquiera de los métodos desarrollados. En particular la implementación del método de resolución del sistema lineal virtual $\underline{\overline{M}u}_\Delta = \underline{b}$ esquematizados por los algoritmos descritos en la Ec.(5.116 ó 5.118), donde el nodo maestro controlará a cada uno de sus nodos esclavos

[29] El esquema Maestro-Esclavo esta intrínseco a la definición de los métodos de descomposición de dominio tipo subestructuración, ya que las tareas implementadas por los subdominios son pensados como procesos esclavos los cuales son controlados por el maestro que implementa la solución de los nodos de frontera interior (véase [68] y [67]).

mediante comunicaciones entre este y los esclavos, pero no entre esclavos, como se muestra en la figura.

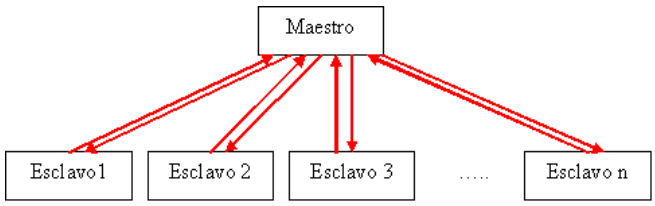


Figura 15: Esquema del Maestro-Esclavo

Esta forma de descomponer el problema dentro del esquema Maestro-Esclavo, permite hacer la implementación del código tanto para la parte secuencial como su paralelización de manera fácil y eficientemente, donde tomando en cuenta la implementación en estrella del Cluster o equipo multiCore, el modelo de paralelismo de MPI y las necesidades propias de comunicación del programa, el nodo maestro tendrá comunicación sólo con cada nodo esclavo, esto reducirá las comunicaciones y optimizará el paso de mensajes (véase [21], [19] y [20]).

Además el esquema de paralelización Maestro-Esclavo permite sincronizar fácilmente por parte del nodo maestro las tareas que realizan en paralelo los nodos esclavos, éste modelo puede ser explotado de manera eficiente si existe poca comunicación entre el maestro y los esclavos; y los tiempos consumidos en realizar las tareas asignadas son mayores que los períodos involucrados en las comunicaciones para la asignación de dichas tareas. De esta manera se garantiza que la mayoría de los procesadores estarán siendo usados de forma eficiente y existirán pocos tiempos muertos, aumentando así la eficiencia global de la implementación de los métodos de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados bajo el esquema Maestro-Esclavo.

8.2 Análisis, Diseño y Programación Orientada a Objetos

Desde el inicio del proyecto para la implementación computacional de los métodos de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados se planteó la necesidad de que el código desarrollado fuera orientado a objetos, que su implementación computacional debería de correr en equipos

secuenciales y paralelos para dominios en dos y tres dimensiones. Por ello se optó por usar el lenguaje de programación C++ y la paralelización se haría usando la biblioteca de paso de mensajes MPI.

Dentro de las consideraciones básicas en el análisis orientado a objetos es que el código debería de correr tanto en equipos secuenciales como en paralelos, con un mínimo de cambios y que la interdependencia de la parte paralela no debería afectar la parte secuencial. Para que cualquier cambio en el código de los métodos desarrollados no requiera grandes cambios en el código paralelo. Esto se logra mediante la programación orientada a objetos haciendo uso de clases abstractas[30] o contenedores.

Esto permitió desarrollar un código que fuera robusto y flexible, además de que la escritura, depuración y optimización se hace desde cualquier Notebook y su ejecución puede ser hecha en cualquier computadora personal o Clusters sin ningún cambio en el código.

Por ejemplo, en el uso de los métodos numéricos tanto directos como iterativos para resolver sistemas lineales en los cuales la matriz es real —existe como tal— o es virtual —esta dispersa por los distintos subdominios— se creo una jerarquía de clases que implementa mediante herencia a la clase abstracta, la cual usan los algoritmos que requerían solucionar un sistema lineal, esta clase abstracta se llama Solvable —véase apéndice 11—. La jerarquía[31] de clases mostrada en la figura (16) permite contener a cualquiera de los métodos numéricos de solución de sistemas lineales actuales y cualquier implementación futura y es independiente de si se usa para generar código secuencial o paralelo.

Nótese que, en general, el paradigma de programación orientada a objetos sacrifica algo de eficiencia computacional por requerir mayor manejo de recursos computacionales al momento de la ejecución. Pero en contraste, permite mayor flexibilidad a la hora adaptar los códigos a nuevas especificaciones. Adicionalmente, disminuye notoriamente el tiempo invertido en el mantenimiento y búsqueda de errores dentro del código, además de hacer el código extensible y reutilizable. Esto tiene especial interés cuando se piensa

[30] En general las clases abstractas que definen comportamientos virtuales pueden no ser eficientes si son llamadas una gran cantidad de veces durante la ejecución del programa. Para el caso del esquema DVS, en el cual se usa CGM o GMRES para resolver el sistema lineal virtual, este sólo se llama una sola vez; y el proceso de solución del sistema lineal asociado consume la mayoría del tiempo de ejecución, por eso se considera eficiente.

[31] Las jerarquías de clases de herencia mostradas en las figuras fueron generadas usando Doxygen documentation (véase [72]) a partir del código fuente en C++.

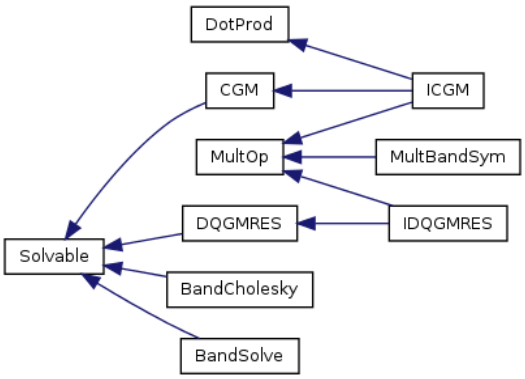


Figura 16: Jerarquía de clases para la implementación de los métodos de resolución de sistemas lineales.

en la cantidad de meses invertidos en la programación comparada con los segundos consumidos en la ejecución del mismo.

8.2.1 Implementación Secuencial en C++

Usando la filosofía del manejo de clases abstractas desde el análisis y durante el diseño de la implementación computacional de los ocho métodos de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados, se pensó en usar una jerarquía de clases que especializarían a una clase abstracta llamada DPMethod, la cual permite implementar uno o más de los métodos de descomposición de dominio desarrollados; y dada una ecuación o sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, se usaría el método iterativo —Gradiente Conjugado o el método Residual Mínimo Generalizado o cualquier otro— dependiendo de que la matriz global virtual fueran simétrica o no simétrica; su jerarquía de clases se muestra en la figura (17).

De esta forma, es posible implementar uno o más de los algoritmos desarrollados de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados sin realizar cambios en la base del código, permitiendo especializar el código para alguna necesidad particular sin cargar con código no requerido en la resolución de un problema específico, pero en caso de evaluar el desempeño de cada uno de los métodos ante un problema determinado, se pueda realizar sin afectación del código.

Además de la flexibilidad anteriormente comentada, también se reutiliza

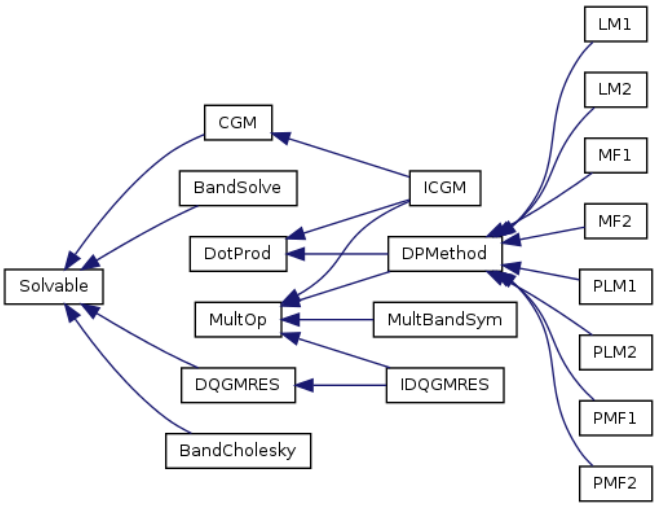


Figura 17: Jerarquía de clases para la implementación secuencial

la jerarquía de clases para la resolución de sistemas lineales, permitiendo que cualquier cambio o refinamiento a estas clases redunde en el desempeño global del sistema, permitiendo que en un futuros se agreguen y refinen métodos que manejen con eficiencia la solución de los sistemas lineales asociados al método de descomposición de dominio DVS.

8.2.2 Implementación Paralela en C++ Usando MPI

Para poder intercomunicar al nodo maestro con cada uno de los nodos esclavos se usa la interfaz de paso de mensajes —Message Passing Interface (MPI)—, una biblioteca de comunicación para procesamiento en paralelo. MPI ha sido desarrollado como un estandar para el paso de mensajes y operaciones relacionadas. Este enfoque es adoptado por usuarios e implementadores de bibliotecas, en la cual se proveen a los programas de procesamiento en paralelo de portabilidad y herramientas necesarias para desarrollar aplicaciones que puedan usar el cómputo paralelo de alto desempeño.

El modelo de paso de mensajes posibilita a un conjunto de procesos —que tienen solo memoria local— la comunicación con otros procesos usando Bus o red, mediante el envío y recepción de mensajes. El paso de mensajes posibilita transferir datos de la memoria local de un proceso a la memoria local de cualquier otro proceso que lo requiera.

En el modelo de paso de mensajes mediante MPI para equipos con uno o más Cores, los procesos se ejecutan en paralelo, teniendo direcciones de memoria separada para cada proceso, la comunicación ocurre cuando una porción de la dirección de memoria de un proceso es copiada mediante el envío de un mensaje dentro de otro proceso en la memoria local mediante la recepción del mismo.

Las operaciones de envío y recepción de mensajes es cooperativa y ocurre sólo cuando el primer proceso ejecuta una operación de envío y el segundo proceso ejecuta una operación de recepción, los argumentos base de estas funciones son:

- Para el que envía, la dirección de los datos a transmitir y el proceso destino al cual los datos se enviarán.

  Send(dir, lg, td, dest, etiq, com)
  $\{dir, lg, td\}$ describe cuántas ocurrencias lg de elementos del tipo de dato td se transmitirán empezando en la dirección de memoria dir; $\{des, etiq, com\}$ describe el identificador etq de destino des asociado con la comunicación com.

- Para el que recibe, debe de tener la dirección de memoria donde se pondrán los datos recibidos, junto con la dirección del proceso del que los envío.

  Recv(dir, mlg, td, fuent, etiq, com, st)
  $\{dir, lg, td\}$ describe cuántas ocurrencias lg de elementos del tipo de dato td se transmitirán empezando en la dirección de memoria dir; $\{fuent, etiq, com, est\}$ describe el identificador etq de la fuente $fuent$ asociado con la comunicación com y el estado st.

El conjunto básico de directivas (en este caso sólo se usan estas) en C++ de MPI son:

MPI::Init	Inicializa al MPI
MPI::COMM_WORLD.Get_size	Busca el número de procesos existentes
MPI::COMM_WORLD.Get_rank	Busca el identificador del proceso
MPI::COMM_WORLD.Send	Envía un mensaje
MPI::COMM_WORLD.Recv	Recibe un mensaje
MPI::Finalize	Termina al MPI

La estructura básica del programa bajo el esquema Maestro-Esclavo codificada en C++ y usando MPI es:

```
main(int argc, char *argv[])
{
      MPI::Init(argc,argv);
      ME_id = MPI::COMM_WORLD.Get_rank();
      MP_np = MPI::COMM_WORLD.Get_size();
      if (ME_id == 0) {
          // Operaciones del Maestro
      } else {
          // Operaciones del esclavo con identificador ME_id
      }
      MPI::Finalize();
}
```

En este único programa se deberá de codificar todas las tareas necesarias para el nodo maestro y cada uno de los nodos esclavos, así como las formas de intercomunicación entre ellos usando como distintivo de los distintos procesos a la variable *ME_id* (véase [19] y [20]).

La jerarquía de clases del esquema Maestro-Esclavo en su implementación paralela permite repartir la carga de varias maneras en uno o más Cores. Reutilizando toda la jerarquía de clases de la implementación secuencial de los algoritmos DVS y sólo es necesario agregar clase que especializa algunos comportamientos que requieren hacer uso de las comunicaciones, mediante la biblioteca de paso de mensajes MPI. La jerarquía de clases es mostrada en la figura siguiente:

La reutilización de toda la jerarquía de clases generada para la implementación secuencial permite que el código paralelo soporte una gran cantidad de cambios sin afectación a la implementación paralela, teniendo así, un código robusto, flexible, modular y de fácil mantenimiento (véase [21]).

8.3 Alcances y Limitaciones del Esquema Maestro-Esclavo

El esquema Maestro-Esclavo es eficiente cuando se tiene una carga casi homogénea en cada nodo esclavo y se manejan una cantidad moderada de ellos. Un factor limitante en el esquema Maestro-Esclavo, es que el nodo maestro deberá de atender todas las peticiones hechas por todos y cada uno de los

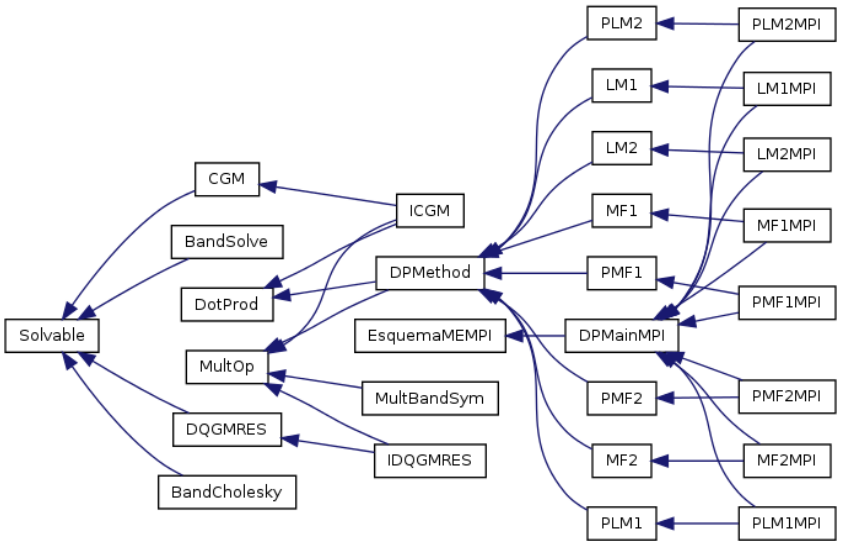


Figura 18: Jerarquía de clases para la implementación paralela rehusando toda la jerarquía de la implementación secuencial y de resolución de sistemas lineales

nodos esclavos, esto toma especial relevancia cuando todos o casi todos los nodos esclavos compiten por ser atendidos por el nodo maestro.

Una opción para optimizar el esquema Maestro-Esclavo es contar con un nodo maestro lo suficientemente poderoso para atender simultáneamente la mayor cantidad de las tareas síncronas del método de descomposición de dominio en el menor tiempo posible. Pero los factores limitantes del esquema Maestro-Esclavo son de tres tipos, a saber:

1. Los inherentes al método de descomposición de dominio.
2. Los inherentes al propio esquema Maestro-Esclavo.
3. Los inherentes al equipo de cómputo en paralelo en el que se ejecute el programa.

En el primer caso, en cuanto a los inherentes al método de descomposición de dominio destacan:

- El método de descomposición de dominio es síncrono, es decir, si un nodo esclavo acaba la tarea asignada y avisa al nodo maestro, este no

podrá asignarle otra tarea hasta que todos los nodos esclavos concluyan la suya, y se realicen las operaciones necesarias para asignar las nuevas tareas a los nodos esclavos.

- El nodo maestro sólo realiza tareas de control y sincronización pero no conoce o realiza cálculos relacionados con los sistemas lineales locales a cada uno de los subdominios que estan asignados a los nodos esclavos.
- Por lo anterior, el esquema Maestro-Esclavo no es eficiente si sólo se usan dos procesos o Cores —uno para el nodo maestro y otro para el nodo esclavo—, por otro lado, cuando se realiza el análisis de rendimiento en P Cores, hay que tomar en cuenta que los únicos nodos que manipulan los sistemas lineales asociados al método de descomposición de dominio son los esclavos $(P-1)$ y el nodo maestro sólo realiza el control y sincronización de las tareas del los métodos DVS.

En el segundo caso, en cuanto a los inherentes al propio esquema Maestro-Esclavo destacan:

- El nodo maestro deberá distribuir las tareas a los nodos esclavos acorde al número de subdominios existentes en la descomposición y la malla fina de cada subdominio, de tal forma que cada nodo esclavo tenga una carga computacional equivalente a los demás nodos esclavos.
- En el caso de una carga homogénea en cada subdominio, si se usan P Cores en el equipo paralelo y la descomposición del dominio tiene E subdominios, tal que $(P-1) \nmid E$, esa descomposición de dominio no es adecuada para trabajar en dicha cantidad de Cores. En este caso, el número de procesadores P que se usen para tener buen balance de cargas es conocido a priori cuando el dominio Ω se descompone en $n \times m$ —$n \times m \times o$— subdominios homogéneos, entonces se generarán $E = n * m$ —$E = n * m * o$— subdominios Ω_α, teniendo un buen balanceo de cargas si $(P-1) \mid E$.
- Pese al buen balanceo de la carga en los nodos esclavos, es común que, un gran número de nodos esclavos envíen simultáneamente datos al nodo maestro saturando su canal de comunicación; y este en algún momento tendrá que tratar atender las múltiples comunicaciones, degradando su rendimiento al aumentar el número de nodos esclavos involucrados en la descomposición.

En el caso de generar desbalance de la carga en los nodos esclavos o una saturación de comunicaciones en el nodo maestro, se propicia a que algunos procesadores terminen antes que otros, generando tiempos muertos de ejecución en dichos Cores; propiciando una notoria degradación en la eficiencia global en el procesamiento, es por esto que, en algunos casos al aumentar el número de procesadores no se aprecia una disminución sustancial del tiempo de ejecución y en casos extremos puede ocasionar un aumento en el tiempo.

En el tercer caso, en cuanto a los inherentes al equipo de cómputo en paralelo en el que se ejecute el programa destacan:

- El programa se diseño para correr en cualquier cantidad de procesos o Cores y no hay límite establecido en cuanto al número de subdominios que soporta el programa, pero el equipo en el que se ejecute tiene un número predeterminado de Cores y cada uno de ellos tiene asignado una cantidad limitada de RAM, es por ello que, las dimensiones del problema que es posible correr en un equipo paralelo dado esta determinado por estas limitantes.
- En los equipos paralelos, el cuello de botella en cuanto a la eficiencia global de la ejecución, lo presentan las comunicaciones, entre más comunicaciones necesite el programa, es imperante el contar con una infraestructura que permita la mejor velocidad de comunicaciones entre el nodo maestro y los nodos esclavos; además de que esta cuente con la menor latencia posible en las comunicaciones. Por otro lado, el acceso al disco duro es mínimo y no representa un costo significativo en las comunicaciones totales de la ejecución.

Para ejemplificar lo discutido anteriormente, se considera como modelo matemático el problema de valor en la frontera (BVP) asociado con la ecuación de Poisson, con condiciones de frontera Dirichlet, definido en Ω como:

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u &= f_\Omega \text{ en } \Omega \\ u &= g_{\partial\Omega} \text{ en } \partial\Omega \end{aligned} \tag{8.1}$$

este ejemplo, gobierna los modelos de muchos sistemas de la ingeniería y de la ciencia, entre ellos el flujo de agua subterránea a través de un acuífero

isotrópico, homogéneo bajo condiciones de equilibrio y es muy usado en múltiples ramas de la física, por ejemplo, gobierna la ecuación de la conducción de calor en un sólido bajo condiciones de equilibrio.

En particular se considera el problema con Ω definido en:

$$\Omega = [-1, -1] \times [1, 1] \tag{8.2}$$

donde

$$f_\Omega = 2n^2\pi^2 \sin(n\pi x) * \sin(n\pi y) \quad \text{y} \quad g_{\partial\Omega} = 0 \tag{8.3}$$

cuya solución es

$$u(x, y) = \sin(n\pi x) * \sin(n\pi y) \tag{8.4}$$

Por ejemplo para $n = 4$, la solución es $u(x, y) = \sin(4\pi x) * \sin(4\pi y)$, cuya gráfica se muestra a continuación:

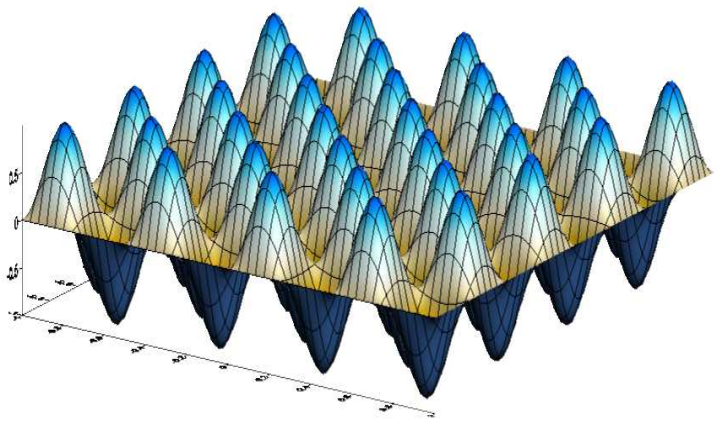


Figura 19: Solución a la ecuación de Poisson para n=4.

Para las pruebas de rendimiento[32] en las cuales se evalúa el desempeño de los programas realizados se usa $n = 100$, pero es posible hacerlo con $n \in \mathbb{N}$ grande.

[32] En todos los ejemplos del presente trabajo no se realiza una análisis de comunicación de forma independiente al tiempo de cálculo, ya que los Clusters a los que se obtuvo acceso carecen de herramientas que permitan realizar dicho análisis, pero si se realizaron algunas pruebas con XMPI (véase [73]) y Vampir (véase [74]) para algunos ejemplos representativos en los cuales se muestra que se tiene granularidad gruesa (véase [68]).

Supóngase que se desea resolver el dominio Ω usando 1024×1024 nodos —$1,048,576$ grados de libertad— mediante el algoritmo precondicionado PRIMAL#2 , de manera inmediata surgen las siguientes preguntas: ¿cuáles son las posibles descomposiciones posibles? y ¿en cuántos procesadores se pueden resolver cada descomposición?. Para este ejemplo en particular, sin hacer la tabla exhaustiva, se tiene:

Partición	Subdominios	Procesadores
2x2 y 512x512	4	2,3,5
4x4 y 256x256	16	2,3,5,9,17
8x8 y 128x128	64	2,3,5,9,17,33,65
16x16 y 64x64	256	2,3,5,9,17,33,65,129,257
32x32 y 32x32	1024	2,3,5,9,17,33,65,129,..,1025
64x64 y 16x16	4096	2,3,5,9,17,33,65,129,...,4097
128x128 y 8x8	16384	2,3,5,9,17,33,65,129,...,16385
256x256 y 4x4	65536	2,3,5,9,17,33,65,129,...,65537
512x512 y 2x2	262144	2,3,5,9,17,33,65,129,...,262145

De esta tabla es posible seleccionar las descomposiciones que se adecuen a las necesidades particulares del equipo paralelo con que se cuente, para evaluar el tiempo de ejecución de este ejemplo se usó la PC Antipolis Intel Xeon a 2.33 GHtz de 64 bits con 8 Cores y 32 GB de RAM, obteniendo los siguientes resultados para una tolerancia de 10^{-6} usando norma infinita en todos los casos (tiempo en segundos):

	1 Core	2 Cores	3 Cores	4 Cores	5 Cores	6 Cores	7 Cores	8 Cores
Partición	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo
2x2 y 512x512	16465	10659	7207	7105	4641			
4x4 y 256x256	2251	5063	2252	2103	1643	1233	1068	947
8x8 y 128x128	855	885	482	395	314	311	283	272
16x16 y 64x64	321	348	190	149	121	125	118	117
32x32 y 32x32	26	39	26	24	23	21	21	21
64x64 y 16x16	205	595	485	477	481	461	469	469
128x128 y 8x8	1026	5453	5352	5431	5633	5843	5843	5903
256x256 y 4x4	8544	26167	25892	25902	25939	25950	25969	26003
512x512 y 2x2	34845	64230	63293	63308	63389	63475	63502	63693

De estos resultados, se desprende que:

1. Dependiendo del tamaño de la malla gruesa —número de subdominios a trabajar— y de la malla fina, es siempre posible encontrar una descomposición de dominio —32×32 y 32×32— en que el tiempo de cálculo sea mínimo:
   - Al usar un solo Core (programa secuencial 26 seg.).
   - Al usar múltiples Cores interconectados mediante MPI (6 Cores en 21 seg.).
2. Es notorio el efecto que genera el mal balanceo de carga[33], el cual se refleja en que no disminuye el tiempo de ejecución al aumentar el número de procesadores y en algunos casos el tiempo aumenta conforme se agregan más Cores.

En contraste con los 110 segundos en que se resolvió el mismo problema usando los métodos de Elemento Finito y Diferencias Finitas, usando en ambos casos Factorización Cholesky para resolver el sistema lineal asociado.

8.4 Afectación del Rendimiento al Refinar la Descomposición

Una parte fundamental al trabajar con problemas reales usando una descomposición fina es conocer a priori que factores afectan el rendimiento de la aplicación ante las posibles elecciones en la descomposición de dominio, la afectación se da por:

1. En el caso de contar con un gran número de subdominios que esten asignados a distintos nodos esclavos, la afectación se da por la saturación del nodo maestro con una gran cantidad de comunicaciones simultáneas por parte de los nodos esclavos que el nodo maestro deberá de atender y la velocidad de comunicación del canal usado para ello. Esto es especialmente importante en la implementación paralela en la cual la interconexión del equipo paralelo se hace mediante un canal de comunicación lento u ocupado por otros procesos.

[33] Por ejemplo, al usar una descomposición gruesa de $64 \times 64 = 4096$ subdominios repartidos en $3, 5, 6, 7$ nodos esclavos.

2. En el caso de realizar una descomposición muy fina en cada subdominio, la afectación del rendimiento se da al aumentar el número de nodos involucrados en el complemento de Schur local $\underline{\underline{S}}^i$, ya que esto significa, por un lado generar matrices locales más grandes

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\pi} \text{ y } \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{8.5}$$

además de resolver el sistema $y = \left(\underline{\underline{A}}^{i}_{II}\right)^{-1} x$ de alguna forma. Si el número de nodos interiores en el subdominio es grande entonces solucionar el complemento de Schur local será costoso computacionalmente.

Para el primer caso, el uso de algunos cientos o miles de subdominios no afectan de manera considerable el desempeño del Esquema Maestro-Esclavo si la red es relativamente rápida (de un Gigabit por segundo o más), y como los avances en las comunicaciones son vertiginosos, en un corto tiempo se tendrá acceso a redes de mayor velocidad reduciendo el efecto de manipular un gran número de subdominios simultáneamente.

Para el segundo caso, al resolver el complemento de Schur local, se puede emplear diversos métodos de solución, la selección del método más adecuado al problema en particular depende por un lado de las capacidades computacionales del equipo donde se implemente la ejecución y las características propias de los sistemas lineales asociados al problema. Así, para solucionar el sistema $y = \left(\underline{\underline{A}}^{i}_{II}\right)^{-1} x$ correspondiente al complemento de Schur local $\underline{\underline{S}}^i$ se puede usar por ejemplo: Factorización LU, Factorización Cholesky, Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES, pero deberá de usarse aquel método que proporcione la mayor velocidad en el cálculo o que consuma la menor cantidad de memoria —ambas condicionantes son mutuamente excluyentes— , por ello la decisión de que método usar deberá de tomarse al momento de tener que resolver un problema particular en un equipo dado y básicamente el condicionante es el tamaño del la matriz $\underline{\underline{A}}^{i}_{II}$ versus el método numérico usado para resolver el sistema lineal asociado —todas esas opciones estan implementadas en el código y pueden seleccionarse conforme sean requeridos en la ejecución, mediante directivas de compilación—

Por lo visto en el ejemplo anterior, si el problema involucra una gran cantidad de nodos interiores y el equipo —secuencial o paralelo— en el que se implantará la ejecución del programa tiene una cantidad de memoria reducida, es recomendable en los procesos locales a los subdominios usar métodos iterativos —Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES—, estos

consume una cantidad de memoria pequeña comparada con los métodos directos —Factorización LU o Cholesky— pero requieren una gran cantidad de iteraciones para obtener la misma precisión que los directos.

Hay que tomar en cuenta que al aumentar el número de subdominios en una descomposición particular, se garantiza que las matrices a generar y calcular sean cada vez más pequeñas y fáciles de manejar. Pero hay un límite al aumento del número de subdominio y disminución del tamaño de las matrices a generar por subdominio; y esto se refleja en una pérdida de eficiencia en el tiempo de ejecución, esto es generado por la gran cantidad de subdominios que es necesario crear y manejar por el nodo maestro, incrementando sustancialmente las comunicaciones y por otro lado, cada subdominio manejará cada vez matrices más pequeñas con el consecuente aumento de los tiempos muertos, al invertir mucho más tiempo en comunicaciones que en cálculos.

Para mitigar los factores limitantes inherente al propio esquema Maestro-Esclavo, es posible implementar algunas operaciones del nodo maestro en paralelo, usando uno o más Cores distintos a los asignados a los nodos esclavos. Para la parte inherente al método de descomposición de dominio, la parte medular la da el balanceo de cargas. Es decir, cada nodo esclavo debe tener una carga de trabajo equivalente al resto de los nodos.

Tomando en cuenta lo discutido, para un problema particular y la descomposición del dominio Ω en la implementación paralela, hay que tomar en cuenta lo siguiente:

- Buscar que la descomposición de malla gruesa y su asociada malla fina, en la que cada nodo esclavo —asociado a un procesador— tenga una carga casi homogénea con respecto a los demás nodos esclavos, .i.e. buscar que en su conjunto, todos los subdominios Ω_α de la malla gruesa y su descomposición fina de cada uno de ellos, que esten asignados a cada nodo esclavo sean computacionalmente equivalentes.

- Elegir el método numérico local a cada subdominio para garantizar el uso de la menor cantidad de memoria posible y/o la mayor velocidad de ejecución versus la precisión global esperada del método de descomposición de dominio.

- Elegir de las distintas descomposiciones balanceadas del dominio Ω y las diferentes opciones de los métodos numéricos usados localmente en cada subdominio, aquella que presente el mejor rendimiento computa-

cional acorde al equipo paralelo en el cual se implemente la solución del problema.

Nótese que el esquema Maestro-Esclavo paralelo lanza P procesos —uno para el nodo maestro y $P-1$ para los nodos esclavos—, estos en principio corren en un solo procesador pero pueden ser lanzados en múltiples procesadores usando una directiva de ejecución, de esta manera es posible que en una sola máquina se programe, depure y sea puesto a punto el código usando mallas relativamente pequeñas —del orden de miles o millones de nodos— y cuando este listo para producción se puede mandar a cualquier equipo paralelo sin cambio alguno en el código.

8.5 Opciones para Soportar una Descomposición Fina del Dominio

Supóngase ahora que se necesita resolver el problema de una descomposición fina del dominio Ω, sin pérdida de generalidad, se puede suponer por ejemplo, que se usa una malla de 8192×8192 nodos, este tipo de problemas es común y surgen cotidianamente en la resolución de sistemas reales y las opciones para implantarlo en un equipo paralelo son viables, existen y son actualmente usadas. Aquí las opciones de partición del dominio son muchas y variadas, y la variante seleccionada dependerá fuertemente de las características del equipo de cómputo paralelo del que se disponga. Si se supone que una descomposición de 100×100 nodos en un subdominio consume 1 GB de RAM y que el consumo de memoria crece linealmente con el número de nodos, entonces algunas posibles descomposiciones son:

Procesadores	Descomposición	Nodos Subdominio	RAM Mínimo
5	2×2 y 4096×4096	4096×4096	≈40.0 GB
257	16×16 y 512×512	512×512	≈5.0 GB
1025	32×32 y 256×256	256×256	≈2.5 GB
4097	64×64 y 128×128	128×128	≈1.2 GB

Nótese que para las primeras particiones, el consumo de RAM es excesivo y en las últimas particiones la cantidad de procesadores en paralelo necesarios es grande —pero ya de uso común en nuestros días—. Como en general, contar con equipos paralelos de ese tamaño es en extremo difícil, ¿es posible resolver este tipo de problemas con una cantidad de procesadores fijo menor

al sugerido y donde cada uno de ellos tiene solo memoria suficiente para soportar uno o más subdominios?, la respuesta es si.

Primero, nótese que al considerar una descomposición fina del tipo 64×64 y 128×128 se requiere aproximadamente 1.2 GB de RAM por Core, si además se supone que sólo se tienen unos cuantos procesadores con poca memoria —por ejemplo 2 GB—, entonces no es posible tener en memoria de manera conjunta a las matrices generadas por el método.

Una de las grandes ventajas de los métodos de descomposición de domino es que los subdominios son en principio independientes entre si y que sólo estan acoplados a través de la solución en la interfase de los subdominios que es desconocida.

Como sólo se requiere tener en memoria la información de la frontera interior, es posible bajar a disco duro todas las matrices y datos complementarios generados en cada subdominio —que consumen el 99% de la memoria del objeto *RectSub*—, que no se requieran en ese instante para la operación del esquema Maestro-Esclavo.

Recuperando del disco duro solamente los datos del subdominio a usarse en ese momento —ya que el proceso realizado por el nodo maestro es secuencial— y manteniéndolos en memoria por el tiempo mínimo necesario. Así, es posible resolver un problema de una descomposición fina, usando una cantidad de procesadores fija y con una cantidad de memoria reducida por procesador.

En un caso extremo, la implementación para resolver un dominio Ω descompuesto en un número de nodos grande es posible implementarla usando sólo dos procesos en un procesador, uno para el proceso maestro y otro para el proceso esclavo, en donde el proceso esclavo construiría las matrices necesarias por cada subdominio y las guardaría en disco duro, recuperándolas conforme el proceso del nodo maestro lo requiera. Nótese que la descomposición del domino Ω estará sujeta a que cada subdominio Ω_i sea soportado en memoria conjuntamente con los procesos Maestro y Esclavo.

De esta forma es posible resolver un problema de gran envergadura usando recursos computacionales limitados, sacrificando velocidad de procesamiento en aras de poder resolver el problema. esta es una de las grandes ventajas de los métodos de descomposición de dominio con respecto a los otros métodos de discretización tipo Diferencias Finitas y Elemento Finito.

El ejemplo anterior da una buena idea de las limitantes que existen en la resolución de problemas con dominios que tienen una descomposición fina y pone de manifiesto las características mínimas necesarias del equipo paralelo

para soportar dicha implantación.

8.6 Otras Opciones de Paralelización

En la actualidad, casi todos los equipos de cómputo usados en estaciones de trabajo y Clusters cuentan con dos o más Cores, en ellos siempre es posible usar MPI para intercambiar mensajes entre procesos corriendo en el mismo equipo de cómputo, pero no es un proceso tan eficiente como se puede querer. En estas arquitecturas llamadas de memoria compartida es mejor usar OpenMP o cualquiera de sus variantes para trabajar en paralelo. Por otro lado es ya común contar con las cada vez más omnipresentes tarjetas NVIDIA, con los cada vez más numerosos Cores CUDA —que una sola tarjeta NVIDIA TESLA puede tener del orden de cientos de ellos— y que en un futuro serán cada vez más numerosos.

Para lograr obtener la mayor eficiencia posible de estos tres niveles de paralelización, se estan implementando procesos híbridos (véase [70] y [71]), en donde la intercomunicación de equipos con memoria compartida se realiza mediante MPI y la intercomunicación entre Cores que comparten la misma memoria se realiza con OpenMP, además las operaciones matriciales se le encargan a los numerosos Cores CUDA de las tarjetas NVIDIA.

Los métodos de descomposición de dominio sin traslape y en particular el esquema DVS con sus ocho algoritmos, pueden hacer uso de esta forma integradora de paralelismo. Para ello, la interconexión de equipos de memoria compartida se realizaría mediante MPI y en cada equipo de memoria compartida se manipularían uno o más subdominios mediante OpenMP —ya que cada subdominio es independiente de los demás— y la manipulación de matrices y operaciones entre matrices y vectores que requiere cada subdominio se realizarían en las tarjetas NVIDIA mediante los numerosos Cores CUDA sin salir a la RAM de la computadora.

Para integrar esta forma de paralelismo en los códigos, es necesario hacer cambios mínimos[34] al mismo, ya que sólo es necesario reimplementar los comportamientos locales que requieren otro tipo de paralelismo, ya que la jerarquía de clases del código desarrollado permite especializar los comportamientos que implementan las comunicaciones, esto queda de manifiesto al

[34] Ya se tiene una versión operacional del código en los cuales se han realizado algunas pruebas de rendimiento, pero los resultados son limitados por la complejidad de la programación de las tarjetas NVIDIA y la falta de herramientas y bibliotecas de código abierto que optimicen y depuren las implementaciones.

reutilizar toda la jerarquía de clases de la implementación secuencial en la implementación paralela como se aprecia en la figura (18).

Además, el esquema Maestro-Esclavo sólo requiere enviar un vector a cada subdominio en cada paso de la iteración del sistema lineal virtual —mediante el paso de mensajes usando MPI— el cual se coloca en la RAM de la memoria compartida, después este es copiado[35] a la RAM de la tarjeta NVIDIA según el subdominio que se este trabajando —se controla usando OpenMP—, aquí los múltiples Cores CUDA sin salir de su RAM local efectuarían las operaciones de multiplicación de matriz vector necesarias para regresar un único vector a la RAM de la memoria compartida y de ahí se enviaría por MPI al nodo maestro, concluyendo la iteración.

Permitiendo así, tener una creciente eficiencia de paralelización que optimizan en gran medida los recursos computacionales, ya que todas las matrices y vectores se generarían en la RAM de la tarjeta NVIDIA, véase figura (47).

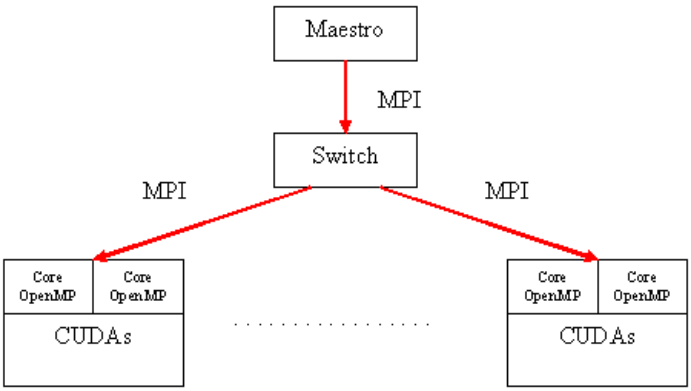


Figura 20: La intercomunicación de equipos con memoria compartida se rea-liza mediante MPI y la intercomunicación entre Cores que comparten la misma memoria se realiza con OpenMP, además las operaciones matriciales se le encargan a los numerosos Cores CUDA de las tarjetas NVIDIA.

[35] En tránsito de datos entre la RAM de la computadora y la RAM de los CUDAs, no es tan rápido como se requiere. Esto genera una baja de rendimiento considerable, que en ciertos problemas como los no lineales y con coeficientes variables es notorio.

De esta manera es posible adaptar el código para todos y cada uno de los métodos desarrollados, de forma tal que sea reutilizable y que pueda usarse en problemas en los que el número de grados de libertad sea grande, permitiendo hacer uso de equipos de cómputo cada vez más asequibles y de menor costo, pero con una creciente eficiencia computacional que podrán competir en un futuro con los grandes equipos de cómputo de alto desempeño.

9 Análisis de Rendimiento y Observaciones para el método DVS

La uniformidad de las fórmulas presentadas en la sección (5.4.2) para los métodos de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados (DVS), nos han permitido implementar de forma eficiente dichos algoritmos en múltiples equipos secuenciales y paralelos, aprovechando el hecho que los algoritmos derivados son capaces de obtener *la solución global por la resolución de problemas locales exclusivamente*.

El grupo de ocho algoritmos desarrollados —de los cuales cuatro son precondicionados— a los que nos referiremos como los *algoritmos DVS* (véase [64], [67]), operan exclusivamente sobre los nodos primales y duales en la frontera interior y estos se implementan eficientemente mediante el uso de métodos iterativos —CGM para el caso simétrico o GMRES para el caso no simétrico— para resolver el sistema algebraico virtual asociado.

En esta sección, se mostrará —mediante los resultados de algunos experimentos numéricos conspicuos en Ciencias de la Tierra e Ingeniería— la eficiencia del esquema DVS (véase [68]), para ello; primero, se muestra el rendimiento en problemas simétrico y no simétricos —en dos y tres dimensiones—; segundo, se muestra el rendimiento en problemas indefinidos; tercero, se muestra el rendimiento en problemas de Advección-Difusión; después, se muestra el análisis de rendimiento en equipos paralelos hasta con 1024 Cores y por último se muestra lo que se consideran como criterios integrales para evaluar métodos de descomposición de dominio sin traslape y en especial al esquema DVS.

Para los experimentos numéricos reportados en esta sección, sólo se muestran los resultados de los cuatro métodos precondicionados del esquema DVS; en donde el dominio Ω fue discretizado usando una malla estructurada uniforme. Y en todos los casos, se tomaron como nodos primales a los vértices de los subdominios de la partición gruesa en dos dimensiones y a las aristas de los subdominios de la partición gruesa para tres dimensiones. Además, la tolerancia usada para concluir los métodos iterativos de resolución de sistemas lineal virtual asociado es en norma infinita.

9.1 Análisis de Rendimiento para Problemas Simétricos y no Simétricos

Para realizar el análisis de rendimiento, se usa la ecuación elíptica

$$-a\nabla^2\underline{u} + \underline{b}\cdot\nabla\underline{u} + c\underline{u} = f \tag{9.1}$$

con condiciones de frontera Dirichlet cero, donde $a, c > 0$ son constantes, mientras que $\underline{b}$ es un vector constante de dimensión n. El dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ fue tomado con $n = 2, 3$ donde Ω es el cuadrado o cubo unitario según corresponda.

Las matrices generadas fueron obtenidas por discretización local en ambos casos —en dos y tres dimensiones— del problema con valores en la frontera descrito anteriormente, donde $a = 1$. La elección $\underline{b} = (1, 1)$ y $\underline{b} = (1, 1, 1)$ con $c = 0$ generan matrices no simétricas, escogiendo $c = 1$ y $\underline{b} = 0$ se obtienen matrices simétricas las cuales son usadas con propósitos de comparación. En todos los ejemplos se usa una tolerancia de $1e - 6$.

Problemas en Dos Dimensiones En la primera tabla se muestra la descomposición usada, los grados de libertad asociados al sistema y el número de vértices primales usados:

Ejemplo	Partición	Subdominios	Grados Libertad	Primales
1	2×2 y 2×2	4	9	1
2	4×4 y 4×4	16	225	9
3	6×6 y 6×6	36	1225	25
4	8×8 y 8×8	64	3969	49
5	10×10 y 10×10	100	9801	81
6	12×12 y 12×12	144	20449	121
7	14×14 y 14×14	196	38025	169
8	16×16 y 16×16	256	65025	225
9	18×18 y 18×18	324	104329	289
10	20×20 y 20×20	400	159201	361
11	22×22 y 22×22	484	233289	441
12	24×24 y 24×24	576	330625	529
13	26×26 y 26×26	676	455625	625
14	28×29 y 28×28	784	613089	729
15	30×30 y 30×30	900	808201	841

En la segunda tabla se muestra el número de iteraciones requeridas para satisfacer la tolerancia solicitada al método CGM para el caso simétrico:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#1	DUAL#1	DUAL#2
1	2	1	2	1
2	7	7	6	5
3	9	9	7	6
4	10	10	9	7
5	11	11	10	8
6	12	11	13	9
7	12	12	13	12
8	13	12	14	12
9	13	13	15	13
10	13	13	15	14
11	13	14	15	16
12	14	14	15	15
13	14	14	15	15
14	14	14	15	15
15	15	14	15	15

En la tercer tabla se muestra el número de iteraciones requeridas para satisfacer la tolerancia solicitada al método GMRES para el caso no simétrico:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	2	1	2	1
2	8	6	6	6
3	10	8	8	8
4	12	10	9	9
5	13	12	9	10
6	14	12	10	10
7	15	13	11	11
8	15	14	11	11
9	16	14	11	12
10	16	15	12	12
11	17	16	12	12
12	17	16	12	13
13	17	16	13	13
14	18	17	13	13
15	18	17	13	13

Cuando la eficiencia de los algoritmos para matrices simétricas y no simétricas son comparadas, se observa que el número de iteraciones son del mismo orden y comparables con los resultados para este mismo tipo de problemas (véase [61]).

Problemas en Tres Dimensiones En la primera tabla se muestra la descomposición usada, los grados de libertad asociados al sistema y el número de vértices primales usados:

Ejemplo	Partición	Subdominios	Grados Libertad	Primales
1	$2 \times 2 \times 2$ y $2 \times 2 \times 2$	8	27	7
2	$3 \times 3 \times 3$ y $3 \times 3 \times 3$	27	512	80
3	$4 \times 4 \times 4$ y $4 \times 4 \times 4$	64	3375	351
4	$5 \times 5 \times 5$ y $5 \times 5 \times 5$	125	13824	1024
5	$6 \times 6 \times 6$ y $6 \times 6 \times 6$	216	42875	2375
6	$7 \times 7 \times 7$ y $7 \times 7 \times 7$	343	110592	4752
7	$8 \times 8 \times 8$ y $8 \times 8 \times 8$	512	250047	8575
8	$9 \times 9 \times 9$ y $9 \times 9 \times 9$	729	512000	14336
9	$10 \times 10 \times 10$ y $10 \times 10 \times 10$	1000	970299	22599

En la segunda tabla se muestra el número de iteraciones requeridas para satisfacer la tolerancia solicitada al método CGM para el caso simétrico:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#1	DUAL#1	DUAL#2
1	2	2	2	2
2	4	4	3	3
3	5	5	4	3
4	6	5	4	3
5	6	6	4	4
6	7	6	4	4
7	8	7	5	6
8	8	8	7	7
9	8	8	8	8

En la tercer tabla se muestra el número de iteraciones requeridas para satisfacer la tolerancia solicitada al método GMRES para el caso no simétrico:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	3	2	2	2
2	6	4	4	4
3	7	6	5	5
4	8	7	5	5
5	10	7	6	6
6	11	8	6	6
7	11	9	7	7
8	12	10	8	8
9	13	11	9	9

Cuando la eficiencia de los algoritmos para matrices simétricas y no simétricas son comparadas, se observa que el número de iteraciones son del mismo orden y comparables con los resultados para este mismo tipo de problemas (véase [61]).

De estos resultados, se puede concluir que los métodos de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados desarrollados tanto para tratar problemas simétricos y no simétricos en experimentos numéricos en dos y tres dimensiones presentan una eficiencia del mismo orden (véase [61] y [23]). Además, el desarrollo de los códigos se simplifica, al poder tratar con problemas simétricos y no simétricos en un mismo código.

9.2 Análisis de Rendimiento para Problemas Indefinidos

Para los problemas indefinidos, como es en el caso de la ecuación de Helmholtz, interesa encontrar una malla —lo más gruesa posible— en la cual el problema sea soluble sin obtener un error considerable para valores grandes de k, que normalmente generan inestabilidad numérica en los métodos de discretización, las cuales siempre se eliminan al refinar adecuadamente la malla, la ecuación utilizada es:

$$-\Delta u - k^2 u = f \tag{9.2}$$

en este caso, la discretización se realizo mediante el método de Diferencias Finitas centradas, los ejemplos se resolvieron mediante el método de GMRES con una tolerancia de 10^{-6}, con fines de ejemplificación, aquí mostramos los resultados para $k = 10$.

Para el primer ejemplo, la ecuación utilizada es en 2D; $(x, y) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$, donde $u(x, y) = 0$ sobre $\partial\Omega$, los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio, se muestran en la siguiente tabla:

Partición	Grados de Libertad	Primales	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
6×6 y 6×6	1225	25	8	8	8	7
10×10 y 10×10	9801	81	16	13	16	13
14×14 y 14×14	38025	169	18	15	18	15
18×18 y 18×18	104329	289	21	16	20	16
22×22 y 22×22	233289	441	20	17	21	16
26×26 y 26×26	455625	625	21	17	20	17
30×30 y 30×30	808201	841	26	18	21	17

Para el segundo ejemplo, la ecuación utilizada es en 3D; $(x, y, z) \in [-1, 1]\times [-1, 1] \times [-1, 1]$, donde $u(x, y, z) = 0$ sobre $\partial\Omega$, los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio, se muestran en la siguiente tabla:

Partición	Grados de Libertad	Primales	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
$2\times2\times2$ y $2\times2\times2$	27	7	1	1	1	1
$3\times3\times3$ y $3\times3\times3$	512	80	4	4	4	3
$4\times4\times4$ y $4\times4\times4$	3375	351	5	4	4	3
$5\times5\times5$ y $5\times5\times5$	13824	1024	6	6	5	5
$6\times6\times6$ y $6\times6\times6$	42875	2375	7	7	6	5
$7\times7\times7$ y $7\times7\times7$	110592	4752	7	7	6	5
$8\times8\times8$ y $8\times8\times8$	250047	8575	8	8	6	5
$9\times9\times9$ y $9\times9\times9$	512000	14336	8	8	6	6
$10\times10\times10$ y $10\times10\times10$	970299	22599	9	6	6	6

De los resultados mostrados en esta sección, se puede concluir que el esquema de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados para problemas indefinidos presenta buenos resultados para distintos valores de k sin mostrar significativas inestabilidades numéricas en mallas burdas.

Además, haciendo los ajustes pertinentes al esquema de discretización de diferencias finitas —sin hacer cambio alguno al esquema DVS—, es posible resolver la ecuación de Helmholtz tal que no se introduzca error de truncamiento, consecuentemente se puede calcular la solución numérica exacta para la ecuación de Helmholtz para cualquier número de onda sin usar una malla fina (véase [55]).

9.3 Análisis de Rendimiento para Problemas de Advección-Difusión

En el caso de los problemas de Advección-Difusión interesa encontrar una malla —lo más gruesa posible— en la cual el problema sea soluble sin obtener un error considerable al usar valores de viscosidad pequeños que normalmente generan inestabilidad numérica en los métodos de discretización, las cuales siempre se eliminan al refinar adecuadamente la malla.

Para el primer ejemplo, la ecuación utilizada es:

$$-\nu\Delta u + \underline{b}\cdot\nabla u = 0 \tag{9.3}$$

en $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$, donde

$$u(x,y) = \begin{cases} 0, & (x,y) \in \xi_1 \\ 1, & (x,y) \in \xi_2 \end{cases} \tag{9.4}$$

y $\underline{b} = (1, 3)$, como se muestra en la figura:

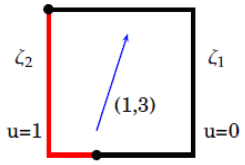


Figura 21: Dominio del problema

En este caso, la discretización se realizo mediante el método de Diferencias Finitas centradas y en la estabilización se usa el método de Difusión Artificial (véase [39]). Los ejemplos se resolvieron mediante el método de GMRES con una tolerancia de 10^{-6}, en una malla global de 512×512 (261,121 grados de libertad), para distintos valores de la viscosidad ν (véase [33]). Los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio usando el método BDDC[36] versus los algoritmos DVS, se muestran en la siguiente tabla:

[36] Ejemplo realizado conjuntamente con Alberto Rosas Medina (véase [39]).

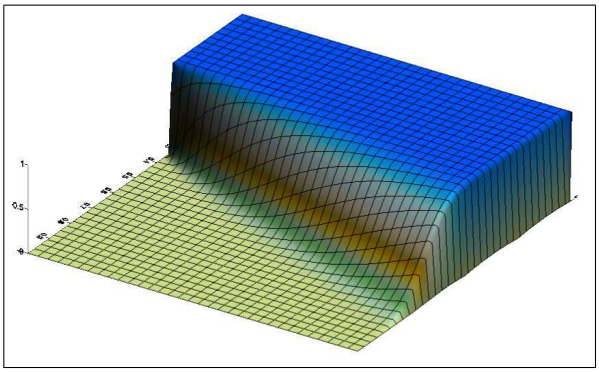


Figura 22: Solución del problema para $\nu = 0.01$

Partición	ν	BDDC	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
8×8 y 64×64	0.01	12	12	11	11	11
8×8 y 64×64	0.001	9	8	8	8	7
8×8 y 64×64	0.0001	9	7	7	7	7
8×8 y 64×64	0.00001	9	7	7	7	7
16×16 y 32×32	0.01	20	19	17	17	18
16×16 y 32×32	0.001	17	14	13	14	13
16×16 y 32×32	0.0001	15	13	13	13	13
16×16 y 32×32	0.00001	16	13	13	13	13
32×32 y 16×16	0.01	33	33	29	29	31
32×32 y 16×16	0.001	30	26	25	25	25
32×32 y 16×16	0.0001	28	25	25	25	25
32×32 y 16×16	0.00001	29	25	25	25	26
64×64 y 8×8	0.01	52	53	53	52	59
64×64 y 8×8	0.001	53	46	46	46	47
64×64 y 8×8	0.0001	53	45	45	47	47
64×64 y 8×8	0.00001	54	45	45	47	48

Además se muestra el residual relativo de decaimiento para la malla gruesa 16×16 y varias mallas finas en las cuales se ve que la mejor convergencia se obtiene cuando la malla fina se incrementa y la convergencia es lenta cuando el subdominio tiene una pequeña cantidad de grados de libertad.

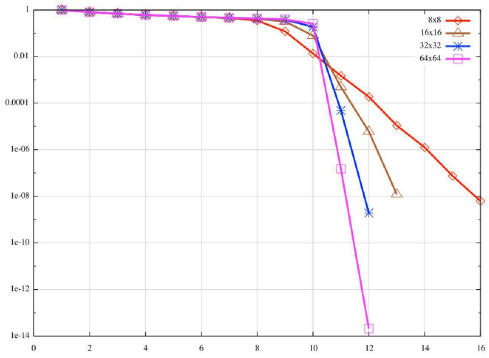


Figura 23: Residual relativo para la malla local de 16×16,en este caso $\underline{b} = (1, 3)$ y $\nu = 0.00001$ que corresponde a un valor de $Pe = 3.16e + 5$.

Para el segundo ejemplo, la ecuación a trabajar es

$$-\nu\Delta u + \underline{b} \cdot \nabla u + cu = 0 \tag{9.5}$$

en $(x, y) \in [-1, 1] \times [0 - 1, 1]$, donde

$$\begin{aligned} u(x,y) &= 1 \begin{cases} y = -1, & 0 < x \leq 1 \\ y = 1, & 0 < x \leq 1 \\ x = 1, & -1 \leq y \leq 1 \end{cases} \\ u(x,y) &= 0, \qquad \text{en cualquier otro caso} \end{aligned} \tag{9.6}$$

el coeficiente advectivo esta dado por $\underline{b} = (y, -x)$, el valor de $c = 10^{-4}$.

En este caso, la discretización se realizo mediante el método de Diferencias Finitas centradas y en la estabilización se usa el método de Difusión Artificial (véase [39]). Los ejemplos se resolvieron mediante el método de GMRES con una tolerancia de 10^{-6}, en una malla global de 32×32 (961 grados de libertad), para distintos valores de la viscosidad ν (véase [45]), cuya solución es mostrada en la gráfica:

Los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio usando el método FETI[37] versus los algoritmos DVS, se muestran en la siguiente tabla:

[37] Ejemplo realizado conjuntamente con Alberto Rosas Medina (véase [39]).

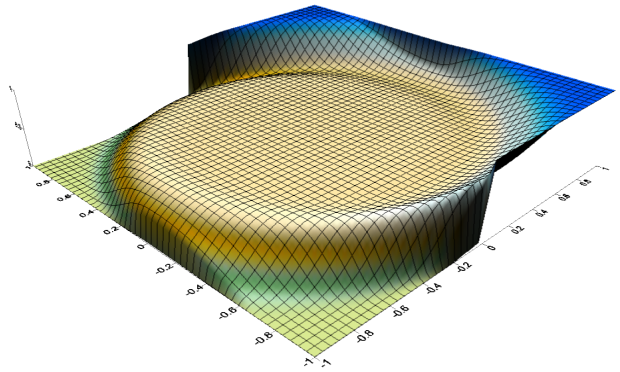


Figura 24: Solución del problema para $\nu = 0.01$

Partición	ν	FETI-DP	PRIMAL#1	DUAL#1	PRIMAL#2	DUAL#2
4×4 y 8×8	1	11	9	8	8	8
4×4 y 8×8	0.01	12	11	8	10	9
4×4 y 8×8	0.001	23	20	16	20	16
4×4 y 8×8	0.0001	45	24	19	24	18
4×4 y 8×8	0.00001	69	24	19	24	18
8×8 y 4×4	1	10	9	8	8	8
8×8 y 4×4	0.01	11	16	9	10	13
8×8 y 4×4	0.001	27	24	21	24	22
8×8 y 4×4	0.0001	68	32	25	30	26
8×8 y 4×4	0.00001	111	33	24	29	27
16×16 y 2×2	1	9	8	6	6	6
16×16 y 2×2	0.01	16	26	8	9	21
16×16 y 2×2	0.001	63	47	23	28	41
16×16 y 2×2	0.0001	176	48	29	34	42
16×16 y 2×2	0.00001	200	48	30	34	42

Para el tercer ejemplo, la ecuación a trabajar es

$$-\nu\Delta u + \underline{b} \cdot \nabla u + cu = 0 \tag{9.7}$$

en $(x, y) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$, donde

$$\begin{aligned} u(x,y) &= 1 \begin{cases} x = -1, & -1 < y \leq 1 \\ y = 1, & -1 \leq x \leq 1 \end{cases} \\ u(x,y) &= 0, \qquad y = -1, -1 \leq x \leq 1 \\ u(x,y) &= \frac{1+y}{2}, \qquad x = 1, -1 \leq y \leq 1 \end{aligned} \tag{9.8}$$

el coeficiente advectivo esta dado por $\underline{b} = \left(\frac{1+y}{2}, 0\right)$, el valor de $c = 10^{-4}$.

En este caso, la discretización se realizo mediante el método de Diferencias Finitas centradas y en la estabilización se usa el método de Difusión Artificial (véase [39]), Los ejemplos se resolvieron mediante el método de GMRES con una tolerancia de 10^{-6} en la norma infinita en una malla global de 32×32 (961 grados de libertad), para distintos valores de la viscosidad ν (véase [45]) , cuya solución es mostrada en la gráfica:

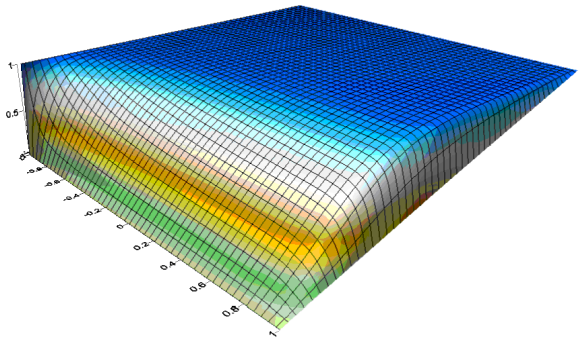


Figura 25: Solución del problema para $\nu = 0.01$

Los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio usando el método FETI-DP[38] versus los algoritmos DVS, se muestran en la siguiente tabla:

Partición	ν	FETI-DP	PRIMAL#1	DUAL#1	PRIMAL#2	DUAL#2
4×4 y 8×8	1	13	10	10	8	8
4×4 y 8×8	0.01	13	11	10	8	7
4×4 y 8×8	0.001	9	8	9	6	6
4×4 y 8×8	0.0001	10	10	10	4	4
4×4 y 8×8	0.00001	11	9	10	3	4
4×4 y 8×8	0.000001	11	9	9	2	3
8×8 y 4×4	1	44	9	9	8	8
8×8 y 4×4	0.01	34	15	14	10	10
8×8 y 4×4	0.001	16	15	15	10	10
8×8 y 4×4	0.0001	16	27	28	9	9
8×8 y 4×4	0.00001	16	32	32	8	8
8×8 y 4×4	0.000001	16	25	25	6	5
16×16 y 2×2	1	159	8	8	6	5
16×16 y 2×2	0.01	98	22	21	9	8
16×16 y 2×2	0.001	38	37	37	18	18
16×16 y 2×2	0.0001	33	48	48	23	22
16×16 y 2×2	0.00001	46	42	41	20	20
16×16 y 2×2	0.000001	51	37	36	15	15

[38] Ejemplo realizado conjuntamente con Alberto Rosas Medina (véase [39]).

De los resultados mostrados en esta sección, se puede concluir que el esquema de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados para problemas de Advección-Difusión presenta una eficiencia del mismo orden y en algunos casos mejoran la mostrada por los métodos FETI y BDD (véase [33] y [45]).

9.4 Análisis de Rendimiento para Sistemas de Ecuaciones

En esta sección se muestra como usar el esquema DVS para resolver problemas con condiciones de frontera Dirichlet donde los desplazamientos son cero sobre la frontera del cuerpo elástico que ocupa el dominio Ω del espacio físico, donde sobre cada subdominio Ω_i que forma la partición gruesa del dominio Ω es resuelto el problema local usando el Método de Diferencias Finitas.

En el caso de sistemas de ecuaciones, se resolvió[39] un sistema de ecuaciones diferenciales parciales en tres dimensiones que corresponde a la ecuación de elasticidad lineal

$$(\lambda + \mu)\,\nabla\nabla\cdot\underline{u} + \mu\Delta\underline{u} = \underline{f}_{\Omega},\ \text{en}\ \Omega \tag{9.9}$$

la cual es sujeta a las condiciones de frontera Dirichlet

$$\underline{u} = 0,\ \text{en}\ \partial\Omega \tag{9.10}$$

el dominio Ω para los experimentos numéricos es un cubo unitario homogéneo isotrópico lineal elástico. En todos nuestros experimentos los nodos primales fueron localizados en las aristas de los subdominios de la partición gruesa, lo cual es suficiente para que la matriz $\underline{\underline{A}}^t$ no sea singular.

Considerando λ y μ iguales a uno, La solución analítica de este problema se escribe como

$$\underline{u} = (\sin\pi x \sin\pi y \sin\pi z, \sin\pi x \sin\pi y \sin\pi z)\,. \tag{9.11}$$

En este caso el operador es simétrico y positivo definido, por ello se usa el método iterativo de Gradiente Conjugado para resolver el sistema lineal de ecuaciones que se genera en el esquema DVS, con una tolerancia de 10^{-7} (véase [69]). Los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio usando el cluster Olintlali se muestran en la siguiente tabla:

[39] Ejemplo realizado conjuntamente con Iván Contreras Trejo (véase [69]).

Partición	Subdominios	DOF	PRIMAL#1	DUAL#1	PRIMAL#2	DUAL#2
5×5×5 y 5×5×5	125	41472	8	7	9	9
6×6×6 y 6×6×6	216	128625	8	8	10	10
7×7×7 y 7×7×7	343	331776	8	8	11	11
8×8×8 y 8×8×8	512	750141	8	8	12	12

Nótese que, el código desarrollado y usado para problemas escalares que originalmente se desarrollo para resolver una sola ecuación usando en la discretización al método de Diferencias Finitas, fue extendido para resolver problemas con el método de Elemento Finito para resolver sistemas de ecuaciones.

9.5 Análisis de Rendimiento en Equipos Paralelos

Para conocer el análisis de rendimiento en equipos paralelos de los métodos desarrollados de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados, se realizaron varias pruebas con la finalidad de conocer la eficiencia y escalabilidad de los códigos y por ende de los métodos en distintos equipos paralelos a los que se tuvo acceso, estos incluyen equipos con 8, 22, 104 y 1024 Cores.

Primeramente, es menester fundamental el encontrar la mejor descomposición de dominio para el problema a trabajar al usar la implementación secuencial y paralela acorde al equipo del que se disponga en aras de obtener la más alta eficiencia posible, después cuando el caso lo permite, se muestran las distintas métricas utilizables y sus limitaciones al aplicarlas en problemas de descomposiciones finas; por último se muestra la escalabilidad del esquema DVS usando hasta 1024 Cores.

9.5.1 Selección Óptima de una Descomposición del Dominio

Para comenzar con la selección óptima de la descomposición del dominio Ω, se toma el problema dado por la Ec.(8.1) como caso particular de la Ec.(9.1) en dos dimensiones con una descomposición fina de 1024×1024 nodos — $1,048,576$ grados de libertad— del dominio Ω, donde por ejemplo se toma sin pérdida de generalidad el algoritmo PRIMAL#1, calculado los tiempos de ejecución en los cuales se usa de uno a ocho Cores de la PC Antipolis

y probando las diferentes descomposiciones[40] del dominio —que van desde 2×2 y 512×512 hasta 512×512 y 2×2— se muestran en la siguiente tabla:

	1 Core	2 Cores	3 Cores	4 Cores	5 Cores	6 Cores	7 Cores	8 Cores
Partición	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo
2x2 y 512x512	16465	10659	7207	7105	4641			
4x4 y 256x256	2251	5063	2252	2103	1643	1233	1068	947
8x8 y 128x128	855	885	482	395	314	311	283	272
16x16 y 64x64	321	348	190	149	121	125	118	117
32x32 y 32x32	26	39	26	24	23	21	21	21
64x64 y 16x16	205	595	485	477	481	461	469	469
128x128 y 8x8	1026	5453	5352	5431	5633	5843	5843	5903
256x256 y 4x4	8544	26167	25892	25902	25939	25950	25969	26003
512x512 y 2x2	34845	64230	63293	63308	63389	63475	63502	63693

Por ejemplo, suponiendo que se quiere resolver una descomposición de 2×2 y 512×512 y usar la menor cantidad de Cores posible, entonces se tienen algunas opciones para mantener un buen balanceo de cargas —en este caso se tienen 4 subdominios— usando 3 ó 5 Cores:

- Si se desea usar 1 Core para el nodo maestro y 2 Cores para los nodos esclavos —dos subdominios por Core—, entonces el factor de aceleración[41] es

$$S(3) = T(1)/T(3) = 16465/7207 = 2.28,$$

[40] Para las corridas secuenciales usando métodos de descomposición de dominio, el mejor tiempo de ejecución se obtuvo en una descomposición de 32×32 y 32×32 en 26 segundos —el tiempo de ejecución para el programa secuencial de elemento finito que resuelve el sistema lineal algebraico asociado mediante factorización Cholesky fue de 111 segundos—. Para las corridas en paralelo se obtuvo el mejor tiempo de ejecución en una descomposición de 32×32 y 32×32 con un tiempo de 21 segundos usando 6 Cores —uno para el maestro y 5 para los esclavos—.

[41] El factor de aceleración S es tal que $1 \leq S(n) \leq n$, la eficiencia E es tal que $1/n \leq E(n) \leq 1$ y la fracción serial F es tal que $0 \leq F(n) \leq 1$.

Se considera que en el caso ideal, el factor de aceleración debería aumentar linealmente al aumentar el número de procesadores $S(p) \simeq p$; por su parte la eficiencia debería de ser cercana a la unidad cuando el hardware se está usando de forma eficiente y en caso contrario se desaprovecha este; por último la fracción serial debería tender a cero y cualquier aumento indica una sobrecarga en los procesos de comunicación.

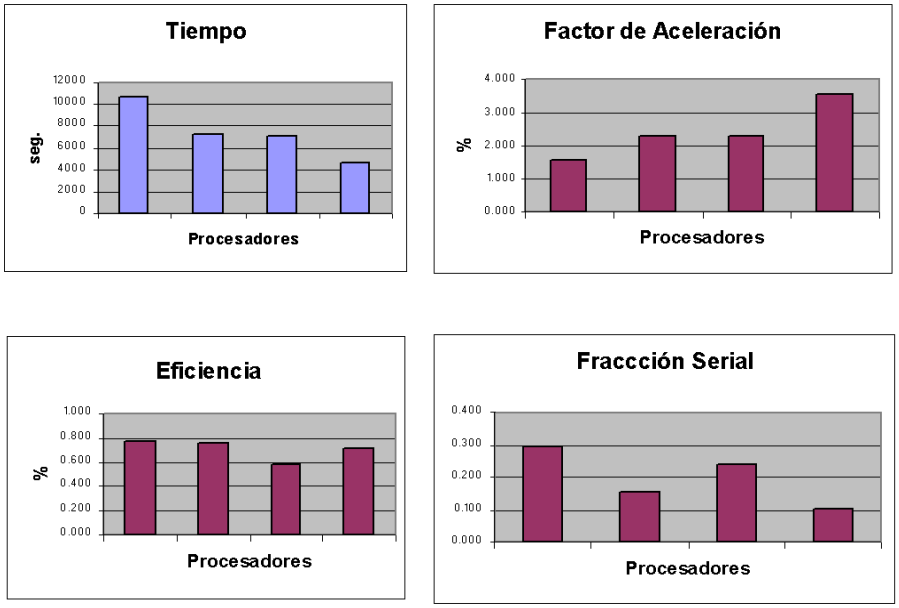


Figura 26: Métricas para la descomposición 2×2 y 512×512

la eficiencia es

$$E(3) = T(1)/\left(3 * T(3)\right) = 16465/(3 * 7207) = 0.761,$$

y la fracción serial es

$$F(3) = \frac{\frac{1}{S(3)} - \frac{1}{3}}{1 - \frac{1}{3}} = 0.158.$$

- Si se desea usar 1 Core para el nodo maestro y 4 Cores para los nodos esclavos —un subdominio por Core—, entonces el factor de aceleración es

  $$S(5) = T(1)/T(5) = 16465/4641 = 3.548,$$

  la eficiencia es

  $$E(5) = T(1)/\left(5 * T(5)\right) = 16465/(5 * 4641) = 0.709$$

  y la fracción serial es

  $$F(5) = \frac{\frac{1}{S(5)} - \frac{1}{5}}{1 - \frac{1}{5}} = 0.102.$$

En otro ejemplo, suponiendo que se quiere resolver una descomposición de 32×32 y 32×32 y usar la menor cantidad de Cores posible, entonces se tienen algunas opciones para mantener un buen balanceo de cargas —en este caso se tienen 1024 subdominios— usando 3 ó 5 Cores:

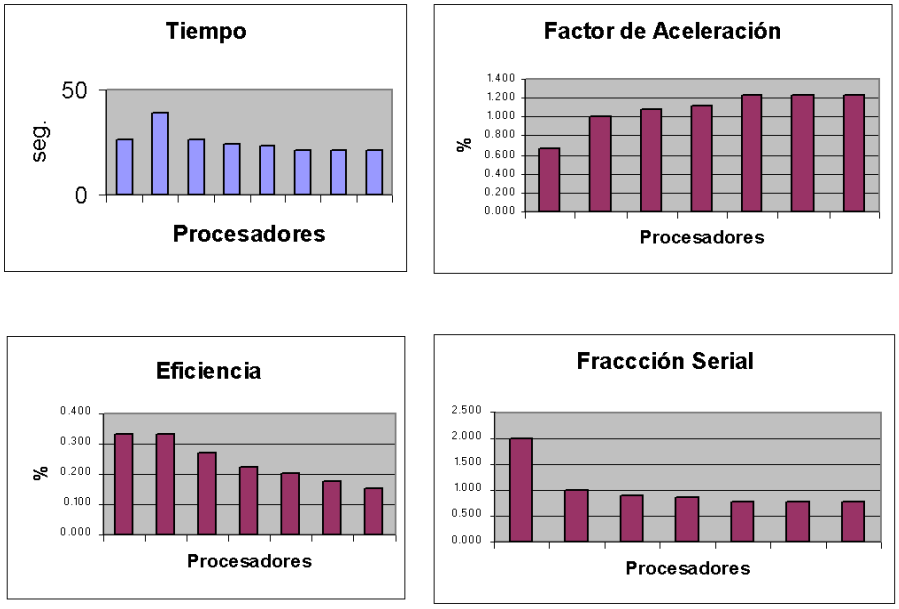


Figura 27: Métricas para la descomposición 32×32 y 32×32

- Si se desea usar 1 Core para el nodo maestro y 2 Cores para los nodos esclavos —512 subdominios por Core—, entonces el factor de aceleración es

$$S(3) = T(1)/T(3) = 26/26 = 1,$$

la eficiencia es

$$E(3) = T(1)/\left(3 * T(3)\right) = 26/(3 * 26) = 0.333$$

y la fracción serial es

$$F(3) = \frac{\frac{1}{S(3)} - \frac{1}{3}}{1 - \frac{1}{3}} = 1.$$

- Si se desea usar 1 Core para el nodo maestro y 4 Cores para los nodos esclavos —256 subdominios por Core—, entonces el factor de aceleración es

$$S(5) = T(1)/T(5) = 26/23 = 1.130,$$

la eficiencia es

$$E(5) = T(1)/\left(5 * T(5)\right) = 26/(5 * 23) = 0.377,$$

y la fracción serial es

$$F(5) = \frac{\frac{1}{S(5)} - \frac{1}{5}}{1 - \frac{1}{5}} = 0.856.$$

Nótese que la descomposición usada en el primer ejemplo dista mucho de ser la óptima[42], ya que la descomposición de 32×32 y 32×32 usada en el segundo ejemplo genera el mejor tiempo de ejecución tanto en secuencial como en paralelo, pero las métricas no reflejan esta mejora, aunque el tiempo de ejecución es mínimo. Por ello es necesario siempre hacer corridas de prueba buscando la descomposición que presente el menor tiempo de ejecución posible para el equipo paralelo con el que se cuente. Estas pruebas dependen fuertemente de la capacidad computacional de cada Core y de la red usada para interconectar los Cores que forman parte del equipo paralelo.

Observación 4 *Nótese que esta forma de medir la eficiencia, el factor de aceleración y la fracción serial tiene un detalle fino, ya que el tiempo de ejecución tomado en un procesador —para este caso es de* 16465 *segundos en la descomposición* 2×2 *y* 512×512*— dista mucho de ser el mejor tiempo posible para el problema global de* 1024 *nodos —*26 *segundos—. Esto puede ser una limitante para obtener valores adecuados en las métricas; y medir la eficiencia al usar equipo paralelo cuando se trabaja con la resolución de dominios en los cuales se realiza una descomposición fina; particularmente cuando las descomposiciones son adecuadas para cientos de Cores, pues las pruebas en un Core o en pocos Cores no son posibles de realizar por el consumo excesivo de recursos computacionales y por que no son conmensurables con las corridas secuenciales.*

[42] En la descomposición de 2×2 y 512×512 el tiempo de ejecución secuencial es 16,465 seg., en paralelo usando 3 Cores es de 7,207 seg. y en 5 Cores es de 4,641 seg. Mientras que para la descomposición de 32×32 y 32×32, el tiempo de ejecución secuencial es de 26 seg., en paralelo usando 3 Cores es de 26 seg. y en 5 Cores es de 23 seg.

Además, de los datos de las corridas mostradas en la tabla, es notorio el efecto del mal balanceo de carga, nótese que:

- Para la malla de 32×32 y 32×32 el mejor tiempo de ejecución se obtiene en 6 Cores —21 segundos— y al aumentar el número de Cores en la corrida, no hay disminución del tiempo de cálculo.
- Para la malla de 512×512 y 2×2 el aumento en el número de procesadores sólo incide en un aumento en el tiempo de ejecución.
- En particular, para la malla de 2×2 y 512×512 al usar 3 Cores —sólo dos son usados realmente para el cálculo ya que el tercer Core se usa para la asignación de tareas y el control de los nodos esclavos— el factor de aceleración 2.28 es el esperado para el esquema Maestro-Esclavo.

9.5.2 Análisis de Rendimiento Usando Métricas

En esta sección se muestra mediante particiones relativamente pequeñas del dominio, el uso de las métricas —aceleración, eficiencias y fracción serial— en las cuales es posible obtener una alta eficiencia computacional cuando se proporciona una descomposición del dominio adecuada para el equipo paralelo con el que se cuente.

Haciendo uso del Cluster Pohualli de 104 Cores, a continuación se presentan varias tablas en las cuales se muestran las métricas para diferentes descomposiciones del dominio Ω.

1) Para una descomposición de 4×4 y 150×150 —$360,000$ grados de libertad— se obtiene

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	267			
3	146	1.82	0.60	0.32
5	85	3.14	0.62	0.14
9	56	4.76	0.52	0.11
17	33	8.09	0.47	0.06

2) Para una descomposición de 4×4 y 200×200 —$640,000$ grados de libertad— se obtiene

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	1082			
3	391	2.76	0.92	0.04
5	216	5.0	1.00	0.00
9	146	7.41	0.82	0.02
17	82	13.19	0.77	0.01

3) Para una descomposición de 4×4 y 250×250 —$1,000,000$ grados de libertad— se obtiene

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	2628			
3	946	2.77	0.92	0.039
5	539	4.87	0.97	0.006
9	329	7.98	0.88	0.015
17	184	14.20	0.83	0.012

4) Para una descomposición de 4×4 y 300×300 —$1,440,000$ grados de libertad— se obtiene

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	5295			
3	2538	2.08	0.69	0.218
5	1391	3.80	0.76	0.078
9	804	6.58	0.73	0.045
17	441	12.00	0.70	0.025

De estas tablas se desprende que seleccionando la descomposición adecuada se pueden tener excelentes resultados en la eficiencia como es el caso de la descomposición 4×4 y 200×200. Además se muestra una gama de otras eficiencias según el número de procesadores usado y la descomposión seleccionada. Nótese que en todos los casos la fracción serial disminuye sustancialmente con el aumento del número de procesadores.

Otros ejemplos interesantes en los cuales se muestra el efecto de mandar descomposiciones no adecuadas y que se reflejan en una baja eficiencia computacional sin importar el aumento del número de procesadores, pero en todos los casos el tiempo de ejecución siempre disminuye:

i) Para una descomposición de 8×8 y 250×250 —$4,000,000$ grados de libertad— en el Cluster Kanbalam se obtiene

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	11366			
3	5541	2.05	0.68	0.23
5	3011	3.77	0.75	0.08
9	1855	6.12	0.68	0.05
17	1031	11.02	0.64	0.03
33	595	19.10	0.57	0.02
65	375	30.30	0.46	0.01

ii) Para una descomposición de 10×9 y 250×250 —$5,625,000$ grados de libertad— en el Cluster Pohualli se obtiene

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	19387			
6	4777	4.05	0.67	0.09
11	2702	7.17	0.65	0.05
46	801	24.20	0.52	0.02
91	509	38.08	0.41	0.01

De todos estos ejemplos se desprende que buscando la adecuada descomposición es posible encontrar eficiencias altas para el esquema DVS, pero siempre se tiene que tener en cuenta el buscar el menor tiempo de ejecución —véase sección anterior— antes que una alta eficiencia con un mayor tiempo de ejecución.

Por otro lado, pese a que Kanbalam es más eficiente[43] que los otros Clusters a los que se tuvo acceso —en particular Pohualli—, es posible encontrar una descomposición del dominio que mejore el tiempo de ejecución, aún en equipos con recursos inferiores, para ello es necesario aprovechar las características propias del Hardware del Cluster haciendo una adecuada selección de la descomposición del dominio. Para mostrar esto, se toma una descomposición de 32×32 y 150×150 —$23,040,000$ grados de libertad— en ambos Clusters con los siguientes resultados:

[43] El Cluster Kanbalam esta formado de procesadores AMD Opteron a 2.6 GHtz de 64 bits, cada 4 Cores con 8 GB de RAM interconectados con un switch de 10 Gbps de baja latencia.

El Cluster Pohualli esta formado de procesadores Intel Xeon a 2.33 GHtz de 64 bits, cada 8 Cores cuentan con 32 GB de RAM interconectados con un switch de 1 Gbps.

Cores	Pohualli	Kanbalam
16	9158 seg	ND
32	5178 seg	5937 seg
64	3647 seg	4326 seg
100	2661 seg	
128		2818 seg

Como se muestra en la tabla, en todos los casos el Cluster Pohualli usando como máximo 100 Cores obtiene un tiempo de cálculo inferior al que requiere Kanbalam usando a lo más los 128 Cores.

Haciendo uso de las métricas de aceleración y eficiencia relativa[44] se tiene que para el Cluster Kanbalam $S_{128}^{32} = 5937/2818 = 2.10$ donde lo esperado sería $S_{128}^{32} = 32/128 = 4.00$, para el caso de la eficiencia $E_{128}^{32} = (32/128) * (5937/2818) = 0.52$.

En el caso del Cluster Pohualli se tiene que $S_{100}^{16} = 9158/2661 = 3.44$ donde lo esperado sería $S_{100}^{16} = 16/100 = 6.35$, para el caso de la eficiencia $E_{100}^{16} = (16/100) * (9158/2661) = 0.55$.

Haciendo uso del mismo número de Cores base para Pohualli que para Kanbalam, se tiene que $S_{100}^{32} = 5178/2661 = 1.94$ donde lo esperado sería $S_{100}^{16} = 32/100 = 3.12$, para el caso de la eficiencia $E_{100}^{16} = (32/100) * (5178/2661) = 0.62$;

De todo lo anterior, se desprende que el Cluster Pohualli obtiene valores de una aceleración y eficiencias relativas ligeramente mejores que el Cluster Kanbalam, pero esto no se refleja en la disminución de casi 6% del tiempo de ejecución y del uso de 28 Cores menos.

Además, el costo computacional[45] $C_p = P * T_p$, que para el caso del cluster Kanbalam es $C_{128} = 360,704$ y en Pohualli es $C_{100} = 266,100$ que representa una disminución de 27%; además de un factor muy importante, el Cluster Pohualli tuvo un costo monetario mucho menor con respecto del Cluster Kanbalam.

[44] Aceleración relativa es $S_p^{p'} = \frac{T_{p'}}{T_p}$ para $p \geq p'$, en la cual se espera que $S_p^{p'} \simeq \frac{p}{p'}$ y eficiencia relativa es $E_p^{p'} = \frac{p'}{p} S_p^{p'} = \frac{p'}{p} \frac{T_{p'}}{T_p}$.

[45] El costo o trabajo de resolver un problema en paralelo es el producto del tiempo de cálculo en paralelo T_p por el número de procesadores usado P y se representa por $C_p = P * T_p$.

9.5.3 Escalabilidad del Esquema DVS

Por último, se realizaron pruebas[46] con el Cluster Kanbalam, mediante una petición especial para tener acceso a los 1024 Cores del Cluster, a la cual el Comité Técnico del mismo dio acceso después de concluir un reparación mayor del equipo que obligo a apagar el Cluster, este acceso sólo se dio por unas horas y de forma exclusiva, lo cual agradezco enormemente, ya que el Cluster tiene una gran demanda dentro y fuera de la UNAM.

Las pruebas realizadas se hicieron usando desde 32 hasta 1024 Cores, para las descomposiciones de 31×33 y 150×150 —$23,017,500$ grados de libertad—, 31×33 y 200×200 —$40,920,000$ grados de libertad— y 31×33 y 250×250 —$63,937,500$ grados de libertad— se obtienen los siguientes tiempos de ejecución.

Subdominio	Cores					
	32	64	128	256	512	1024
31×33 y 150×150	7315 s	4016 s	2619 s	1941 s	1541 s	1298 s
31×33 y 200×200	ND	16037 s	4916 s	3166 s	2688 s	2295 s
31×33 y 250×250	ND	ND	26587 s	8716 s	6388 s	ND

En donde si usamos las métricas de aceleración y eficiencia relativas obtenemos los siguientes resultados

Subdominio	Aceleración	Aceleración esperada	Eficiencia
31×33 y 150×150	$S_{512}^{32} = 4.7$	$S_{512}^{32} = 32$	$E_{512}^{32} = 0.2$
31×33 y 200×200	$S_{512}^{64} = 5.9$	$S_{512}^{32} = 8$	$E_{512}^{64} = 0.7$
31×33 y 250×250	$S_{512}^{128} = 4$	$S_{512}^{32} = 4$	$E_{512}^{128} = 1.0$

De esta última tabla —$E_{512}^{128} = 1.0$ para la descomposición 31×33 y 250×250—, se desprende que los algoritmos desarrollados son altamente escalables en equipos paralelos, ya que es posible obtener una alta eficiencia al encontrar descomposiciones adecuadas al Hardware. Y que pueden usarse para resolver problemas que involucren una gran cantidad de grados de libertad.

[46] No todas las pruebas que se plantearon fueron posibles de realizar, en algunos casos la limitante fue las características físicas de los equipos computacionales, en otros es el acceso limitado y de corta duración —para el uso de 256, 512 y 1024 Cores en el Cluster Kanbalam sólo se dispuso de unas cuantas horas de cómputo y en las cuales, varios Cores del Cluster presentaron fallas de hardware por lo que algunas corridas no se concluyeron de forma satisfactoria—.

9.6 Criterios Integrales para Evaluar el Esquema DVS

En el desarrollo e implementación numérica de los distintos métodos de descomposición de dominio, es necesario medir de alguna forma la eficiencia de los diversos métodos entre sí, algunos criterios comúnmente usados son:

1. Dado un dominio Ω y una descomposición fija, usar el número de iteraciones como criterio de eficiencia.

2. Dado un dominio Ω y haciendo refinamientos de la partición, usar el número de iteraciones como criterio de eficiencia.

3. Dado un dominio Ω y una descomposición del mismo, buscar aquella partición en la que el tiempo de ejecución sea mínimo al variar las particiones posibles.

En principio, estas formas de medir la eficiencia de los diversos métodos no deberían de ser excluyentes entre sí, por el contrario, juntas dan un criterio robusto de la eficiencia de un método de descomposición de dominio para un problema en particular implementado en un equipo de cómputo en las cuales ciertas descomposiciones son posibles —ya sea por limitaciones fenomenológicas o por cuestiones computacionales—.

Para mostrar las implicaciones de las distintas formas de medir la eficiencia, se hace un análisis de las diversas opciones para cada uno de los casos.

1.- Dado un dominio Ω y una descomposición fija, usar el número de iteraciones como criterio de eficiencia En este caso, se usa la Ec.(9.1) como simétrica, tomando una descomposición del dominio Ω en tres dimensiones en la cual se toma una malla gruesa$10 \times 10 \times 10$ que genera $10,000$ subdominios y en la que cada subdominio es descompuesto en $10 \times 10 \times 10$ elementos, los grados de libertad asociados al sistema son $970,299$, donde el número de vértices primales usados es de $22,599$. Obteniendo los siguientes resultados:

	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
Iteraciones:	8	8	8	8

Aquí, lo único que se observa, es que todos los métodos obtienen la misma eficiencia global en cuanto al número de iteraciones, pero nada dice de los tiempos involucrados en la ejecución. Si ahora se toma en cuenta los tiempos de ejecución en un procesador se obtiene:

	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
Tiempo:	1,380s	1,387s	1,490s	1,520s

Y si se usan varios procesadores de un Cluster —en este ejemplo se usó el Cluster Pohualli— se obtiene:

Cores	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
3	966s	965s	930s	953s
11	184s	186s	175s	181s
101	28s	29s	27s	27s

Esta forma integral de medir la eficiencia, da una idea más realista de la eficiencia de los métodos, pero nuevamente hay que tomar en cuenta que los tiempos de ejecución dependen directamente de la arquitectura de cómputo en la que se realicen las pruebas, en especial del balanceo de la carga de trabajo, de la infraestructura de red que interconecten los nodos del Cluster y si estos son Cores virtuales o reales.

2.- Dado un dominio Ω y haciendo refinamientos de la partición, usar el número de iteraciones como criterio de eficiencia En este caso, se usa la Ec.(9.1) como simétrica, se toma una descomposición del dominio Ω en dos dimensiones, en la primer tabla se muestra la descomposición usada, el número de subdominios, los grados de libertad asociados al sistema y el número de vértices primales usados:

Ejemplo	Partición	Subdominios	Grados Libertad	Primales
1	22×22 y 22×22	484	233,289	441
2	24×24 y 24×24	576	330,625	529
3	26×26 y 26×26	676	455,625	625
4	28×29 y 28×28	784	613,089	729
5	30×30 y 30×30	900	808,201	841

En la segunda tabla se muestra el número de iteraciones requeridas para alcanzar la tolerancia solicitada al método:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	13	14	15	16
2	14	14	15	15
3	14	14	15	15
4	14	14	15	15
5	15	14	15	15

En la siguiente tabla se muestra el tiempo de ejecución en un procesador para concluir las iteraciones:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	8s	7s	14s	27s
2	13s	13s	21s	40s
3	19s	19s	33s	61s
4	25s	27s	44s	85s
5	36s	38s	61s	116s

En la última tabla se muestra el tiempo de ejecución en 4 procesadores para concluir las iteraciones:

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	2.9s	2.95s	2.93s	2.99s
2	4.80s	4.89s	4.81s	4.85s
3	7.2s	7.4s	7.3s	7.4s
4	8.92s	8.95s	8.91s	8.93s
5	13.02s	13.05s	13.02s	13.3s

Nuevamente, esta forma integral de medir la eficiencia, da una idea más realista de la eficiencia de los métodos, pero nuevamente hay que tomar en cuenta que los tiempos de ejecución dependen directamente de la arquitectura de cómputo en la que se realicen las pruebas, en especial del balanceo de la carga de trabajo, de la infraestructura de red que interconecten los nodos del Cluster y si estos son Cores virtuales o reales.

3.- Dado un dominio Ω y una descomposición del mismo, buscar aquella partición en la que el tiempo de ejecución sea mínimo al variar las particiones posibles Por último, supóngase que deseo resolver la Ec.(8.1) con un dominio Ω mediante una discretización de

1024×1024 nodos $(1,048,576$ grados de libertad) mediante el algoritmo NN-NP-PRIMAL#1 dado por la Ec.(13.21), de manera inmediata surgen las siguientes preguntas: ¿cuáles son las posibles descomposiciones validas? y ¿en cuántos procesadores se pueden resolver cada descomposición?. Para este ejemplo en particular, sin hacer la tabla exhaustiva, se tiene

Partición	Subdominios	Procesadores
2x2 y 512x512	4	2,3,5
4x4 y 256x256	16	2,3,5,9,17
8x8 y 128x128	64	2,3,5,9,17,33,65
16x16 y 64x64	256	2,3,5,9,17,33,65,129,257
32x32 y 32x32	1024	2,3,5,9,17,33,65,129,..,1025
64x64 y 16x16	4096	2,3,5,9,17,33,65,129,...,4097
128x128 y 8x8	16384	2,3,5,9,17,33,65,129,...,16385
256x256 y 4x4	65536	2,3,5,9,17,33,65,129,...,65537
512x512 y 2x2	262144	2,3,5,9,17,33,65,129,...,262145

De esta tabla es posible seleccionar las descomposiciones que se adecuen a las características del equipo paralelo con que se cuente, para evaluar el tiempo de ejecución de este ejemplo use la PC Antipolis, obteniendo resultados mostrados en la tabla de la sección (9.5.1).

De estos resultados, se desprende que, dependiendo del tamaño de la malla gruesa —número de subdominios a trabajar— y de la malla fina, es siempre posible encontrar una descomposición de dominio en que el tiempo de cálculo sea mínimo, tanto al usar un solo Core —programa secuencial 26 segundos—, como al usar múltiples Cores interconectados mediante la biblioteca de paso de mensajes MPI —el tiempo mínimo se obtuvo usando 6 Cores en 21 segundos—, pero es también notorio el efecto que genera el mal balanceo de carga, el cual se refleja en que no disminuye el tiempo de ejecución al aumentar el número de procesadores y en algunos casos el tiempo aumenta conforme se agregan más Cores.

Nótese que conforme la partición en los subdominios se hace más fina, se incrementa notablemente el tiempo de cálculo necesario para resolver los sistemas lineales asociados a los subdominios, en particular en la resolución del sistema lineal asociado a $\left(\underline{\underline{A}}_{\text{III}}\right)^{-1}$, si el número de nodos por subdominio es grande puede que exceda la cantidad de memoria que tiene a su disposición el Core y por el contrario, un número pequeño de nodos generarían una infrautilización del poder computacional de los nodos esclavos.

Por otro lado, el refinamiento de la malla gruesa, involucra un aumento considerable del número de objetos subdominio en los nodos esclavos, con los que el nodo maestro tendrá comunicación, incrementando la granularidad de las comunicaciones, con la consecuente degradación en la eficiencia.

De todo lo anterior se pueden hacer algunas observaciones importantes Para una evaluación objetiva e integra de la eficiencia de los diversos métodos de descomposición de dominio —en particular de los desarrollados— y su implementación computacional en una arquitectura de cómputo particular, es necesario tomar en cuanta los siguientes factores:

- Número de iteraciones para una descomposición dada.
- Número de iteraciones para diferentes particiones de una descomposición dada.
- Elección de la partición que genere el menor tiempo de ejecución para un problema en una arquitectura de cómputo específica.

Estas formas de medir la eficiencias en su conjunto, dan una idea realista de la eficiencia de los métodos, pero hay que tomar en cuenta que los tiempos de ejecución dependen directamente de la arquitectura de cómputo en la que se realicen las pruebas, en especial del balanceo de la carga de trabajo, de la infraestructura de red que interconecten los nodos del Cluster y si estos son Cores virtuales o reales.

9.7 Observaciones

A lo largo del presente trabajo se ha mostrado que al aplicar métodos de descomposición de dominio DDM y DVS conjuntamente con métodos de paralelización es posible resolver una gama más amplia de problemas de ciencias e ingeniería que mediante las técnicas tradicionales del tipo Diferencias Finitas.

La resolución del sistema algebraico asociado es más eficiente cuando se hace uso de precondicionadores a priori conjuntamente con el método de gradiente conjugado o Residual mínimo generalizado al implantar la solución por el método de descomposición de dominio.

Y haciendo uso del análisis de rendimiento, es posible encontrar la manera de balancear las cargas de trabajo que son generadas por las múltiples

discretizaciones que pueden obtenerse para la resolución de un problema particular, minimizando en la medida de lo posible el tiempo de ejecución y adaptándolo a la arquitectura paralela disponible, esto es especialmente útil cuando el sistema a trabajar es de tamaño considerable.

Adicionalmente se vieron los alcances y limitaciones de esta metodología, permitiendo tener cotas tanto para conocer las diversas descomposiciones que es posible generar para un número de procesadores fijo, como para conocer el número de procesadores necesarios en la resolución de un problema particular.

Así, podemos afirmar de manera categórica que conjuntando los métodos de descomposición de dominio, la programación orientada a objetos y esquemas de paralelización que usan el paso de mensajes, es posible construir aplicaciones que coadyuven a la solución de problemas en dos o más dimensiones concomitantes en ciencia e ingeniería, los cuales pueden ser de tamaño considerable.

Las aplicaciones desarrolladas bajo este paradigma serán eficientes, flexibles y escalables; a la vez que son abiertas a nuevas tecnologías y desarrollos computacionales y al ser implantados en clusters, permiten una codificación ordenada y robusta, dando con ello una alta eficiencia en la adaptación del código a nuevos requerimientos, como en la ejecución del mismo.

De forma tal que esta metodología permite tener a disposición de quien lo requiera, una gama de herramientas flexibles y escalables para coadyuvar de forma eficiente y adaptable a la solución de problemas en medios continuos de forma sistemática

10 Apéndice A: Expansión en Series de Taylor

Sea $f(x)$ una función definida en (a,b) que tiene hasta la $k-$ésima derivada, entonces la expansión de $f(x)$ usando series de Taylor alrededor del punto x_i contenido en el intervalo (a,b) será

$$f(x) = f(x_i) + \frac{(x-x_i)}{1!}\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{(x-x_i)^2}{2!}\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x_i} + ... + \frac{(x-x_i)^k}{k!}\left.\frac{d^kf}{dx^k}\right|_{\varepsilon} \tag{10.1}$$

donde $\varepsilon = x_i + \theta(x-x_i)$ y $0 < \theta < 1$.

10.1 Aproximación de la Primera Derivada

Existen distintas formas de generar la aproximación a la primera derivada, nos interesa una que nos de la mejor precisión posible con el menor esfuerzo computacional.

10.1.1 Diferencias Progresivas

Considerando la Ec.(10.1) con $k=2$ y $x = x_i + \Delta x$, tenemos

$$f(x_i+\Delta x) = f(x_i) + \Delta x\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!}\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{\varepsilon_p} \tag{10.2}$$

de esta ecuación obtenemos la siguiente expresión para la aproximación de la primera derivada

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i+\Delta x)-f(x_i)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!}\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{\varepsilon_p} \tag{10.3}$$

en este caso la aproximación de $f'(x)$ mediante diferencias progresivas es de primer orden, es decir $O(\Delta x)$. Siendo $O_p(\Delta x)$ el error local de truncamiento, definido como

$$O_p(\Delta x) = -\frac{\Delta x}{2!}\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{\varepsilon_p}. \tag{10.4}$$

Es común escribir la expresión anterior como

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i+\Delta x)-f(x_i)}{\Delta x} - O_p(\Delta x) \tag{10.5}$$

o

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \tag{10.6}$$

para simplificar la notación.

10.1.2 Diferencias Regresivas

Considerando la Ec.(10.1) con $k = 2$ y $x = x_i - \Delta x$, tenemos

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{\varepsilon_r} \tag{10.7}$$

de esta ecuación obtenemos la siguiente expresión para la aproximación de la primera derivada

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{\varepsilon_r} \tag{10.8}$$

en este caso la aproximación de $f'(x)$ mediante diferencias regresivas es de primer orden, es decir $O(\Delta x)$. Siendo $O_r(\Delta x)$ el error local de truncamiento, definido como

$$O_r(\Delta x) = \frac{\Delta x}{2!} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{\varepsilon_r}. \tag{10.9}$$

Es común escribir la expresión anterior como

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} + O_r(\Delta x) \tag{10.10}$$

o

$$f'(x_i) = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} \tag{10.11}$$

para simplificar la notación.

10.1.3 Diferencias Centradas

Considerando la Ec.(10.1) con $k = 3$ y escribiendo $f(x)$ en $x = x_i + \Delta x$ y $x = x_i - \Delta x$, tenemos

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{\varepsilon_p} \tag{10.12}$$

y

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} - \frac{\Delta x^3}{3!} \left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{\varepsilon_r} \tag{10.13}$$

restando la Ec.(10.12) de la Ec.(10.13), se tiene

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2\Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \left[\left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{\varepsilon_p} + \left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{\varepsilon_r} \right] \tag{10.14}$$

esta última expresión lleva a la siguiente aproximación de la primera derivada mediante diferencias centradas

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} + O_c(\Delta x^2) \tag{10.15}$$

con un error local de truncamiento de segundo orden $O_c(\Delta x^2)$, es decir

$$O_c(\Delta x^2) = \frac{\Delta x^2}{3!} \left[\left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{\varepsilon_p} + \left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{\varepsilon_r} \right] \tag{10.16}$$

comparado el error local de truncamiento de la aproximación anterior $O_c(\Delta x^2)$, con los obtenidos previamente para diferencias progresivas $O_p(\Delta x)$ Ec.(10.5) y regresivas $O_r(\Delta x)$ Ec.(10.10), se tiene que

$$\lim_{\Delta x \to 0} O_c(\Delta x^2) < \lim_{\Delta x \to 0} O_p(\Delta x). \tag{10.17}$$

Es común encontrar expresada la derivada[47]

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} \tag{10.18}$$

como

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \tag{10.19}$$

para simplificar la notación.

[47] En el caso de que la derivada sea usada en una malla no homogénea, es necesario incluir en la derivada a que Δx se refiere, por ejemplo en cada punto i, tenemos la Δx_{i-} (por la izquierda) y la Δx_{i+} (por la derecha), i.e. $\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f(x_i+\Delta x_{i-}) - f(x_i - \Delta x_{i+})}{(\Delta x_{i-}) + (\Delta x_{i+})}$.

10.2 Análisis de Convergencia

En el siguiente ejemplo se muestra la comparación errores de truncamiento para los esquemas de aproximación de diferencias finitas progresiva, regresiva y centrada. Además gráfica el error y el orden estimado de convergencia, para la función Seno y su derivada exacta (Coseno) en el punto 1:

Ejemplo 15 *% u(x) = sin(x) en x=1. Derivada exacta u'(1) = cos(1)*

```
clear; close all
h=1.0;
for k = 1:33,
a(k,1) = h;
a(k,2) = (sin(1 + h) - sin(1)) / h - cos(1);
a(k,3) = (sin(1) - sin(1 - h)) / h - cos(1);
a(k,4) = (sin(1 + h) - sin(1 - h)) / (2 * h) - cos(1);
h = h / 2;
end

format short e
a % Visualiza el resultado

a = abs(a); % Toma el valor absoluto
h1 = a(:,1); % Extrae la primer columna que es la de h
e1 = a(:,2); e2 = a(:,3); e3 = a(:,4);

loglog(h1, e1, h1, e2, h1, e3)
axis('square')
axis([1e-6 1e1 1e-6 1e1])
gtext('Esperada de adelante y atras =1')
gtext('Esperada de central = 2')
```

Generado la siguiente salida (La primera columna es h, las demás son los errores para los esquemas de aproximación de diferencias finitas progresiva, regresiva y centrada respectivamente):

```
1.0000e+00 -4.7248e-01 3.0117e-01 -8.5654e-02
5.0000e-01 -2.2825e-01 1.8379e-01 -2.2233e-02
2.5000e-01 -1.1025e-01 9.9027e-02 -5.6106e-03
1.2500e-01 -5.3929e-02 5.1118e-02 -1.4059e-03
```

6.2500e-02 -2.6639e-02 2.5936e-02 -3.5169e-04
3.1250e-02 -1.3235e-02 1.3059e-02 -8.7936e-05
1.5625e-02 -6.5958e-03 6.5519e-03 -2.1985e-05
7.8125e-03 -3.2925e-03 3.2815e-03 -5.4962e-06
3.9062e-03 -1.6449e-03 1.6421e-03 -1.3741e-06
1.9531e-03 -8.2209e-04 8.2141e-04 -3.4351e-07
9.7656e-04 -4.1096e-04 4.1079e-04 -8.5879e-08
4.8828e-04 -2.0546e-04 2.0542e-04 -2.1470e-08
2.4414e-04 -1.0272e-04 1.0271e-04 -5.3673e-09
1.2207e-04 -5.1361e-05 5.1358e-05 -1.3417e-09
6.1035e-05 -2.5680e-05 2.5679e-05 -3.3579e-10
3.0518e-05 -1.2840e-05 1.2840e-05 -8.3860e-11
1.5259e-05 -6.4199e-06 6.4199e-06 -2.2014e-11
7.6294e-06 -3.2100e-06 3.2100e-06 -1.8607e-13
3.8147e-06 -1.6050e-06 1.6050e-06 7.0899e-12
1.9073e-06 -8.0249e-07 8.0247e-07 -7.4620e-12
9.5367e-07 -4.0120e-07 4.0125e-07 2.1642e-11
4.7684e-07 -2.0062e-07 2.0055e-07 -3.6566e-11
2.3842e-07 -1.0050e-07 1.0020e-07 -1.5298e-10
1.1921e-07 -4.9746e-08 4.9906e-08 7.9849e-11
5.9605e-08 -2.5532e-08 2.4760e-08 -3.8581e-10
2.9802e-08 -1.0630e-08 1.1721e-08 5.4551e-10
1.4901e-08 -6.9051e-09 7.9961e-09 5.4551e-10
7.4506e-09 5.4551e-10 5.4551e-10 5.4551e-10
3.7253e-09 5.4551e-10 5.4551e-10 5.4551e-10
1.8626e-09 -2.9257e-08 -2.9257e-08 -2.9257e-08
9.3132e-10 -2.9257e-08 -2.9257e-08 -2.9257e-08
4.6566e-10 -2.9257e-08 -2.9257e-08 -2.9257e-08
2.3283e-10 -2.9257e-08 -2.9257e-08 -2.9257e-08

Cómo se nota en la anterior salida, la convergencia mejora conforme h se hace pequeña, hasta llegar a cierto valor en que por errores de truncamiento, el error en los esquemas de aproximación en la derivada comienza a incrementarse. Esto nos da una idea de los valores de h que podemos usar para los esquemas de aproximación de diferencias finitas progresiva, regresiva y centrada respectivamente.

Derivadas Usando Más Puntos Utilizando el valor de la función en más puntos se construyen fórmulas más precisas para las derivadas[48], algunos ejemplos son

$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \qquad (10.20)\\ f'(x_i) &= \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)\\ f'(x_i) &= \frac{2f_{i+1} + 3f_i - 6f_{i-1} + f_{i-2}}{6\Delta x} + O(\Delta x^3)\\ f'(x_i) &= \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)\\ f'(x_i) &= \frac{-25f_i + 48f_{i+1} - 36f_{i+2} + 16f_{i+3} - 3f_{i+4}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \end{aligned}$$

10.3 Derivadas de Ordenes Mayores

De forma análoga se construyen aproximaciones en diferencias finitas de orden mayor, aquí desarrollaremos la forma de calcular la derivada de orden dos en diferencias centradas.

10.3.1 Derivada de Orden Dos

Partiendo del desarrollo de Taylor

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x_i) + \frac{\Delta x^3}{3!} f'''(x_i) + \frac{\Delta x^4}{4!} f^{(4)}(\xi_p) \qquad (10.21)$$

y

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2!} f''(x_i) - \frac{\Delta x^3}{3!} f'''(x_i) + \frac{\Delta x^4}{4!} f^{(4)}(\xi_r) \qquad (10.22)$$

eliminando las primeras derivadas, sumando las ecuaciones anteriores y despejando se encuentra que

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} f^{(4)}(\xi_c) \qquad (10.23)$$

[48] Al usar estas derivadas en el método de diferencias finitas mostrado en la sección (4.1) las matrices generadas no serán tridiagonales.

así, la aproximación a la segunda derivada usando diferencias centradas con un error de truncamiento $O_c(\Delta x^2)$ es[49]

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta x^2} \tag{10.24}$$

Es común escribir la expresión anterior como

$$f''(x_i) = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x^2}$$

para simplificar la notación.

Derivadas Usando Más Puntos Utilizando el valor de la función en más puntos se construyen fórmulas más precisas para las derivadas, algunos ejemplos son

$$\begin{aligned} f''(x_i) &= \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x) \\ f''(x_i) &= \frac{-f_{i+3} + 4f_{i+2} - 5f_{i+1} + 2f_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \\ f''(x_i) &= \frac{-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4) \end{aligned} \tag{10.25}$$

10.3.2 Derivadas de Orden Tres y Cuatro

De forma análoga se construyen derivadas de ordenes mayores utilizando el valor de la función en más puntos, algunos ejemplos para terceras derivadas son

$$\begin{aligned} f'''(x_i) &= \frac{f_{i+3} - 3f_{i+2} + 3f_{i+1} - f_i}{\Delta x^3} + O(\Delta x) \\ f'''(x_i) &= \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2\Delta x^3} + O(\Delta x^2) \\ f'''(x_i) &= \frac{f_{i-3} - 8f_{i-2} + 13f_{i-1} - 13f_{i+1} + 8f_{i+2} - f_{i+3}}{8\Delta x^3} + O(\Delta x^4) \end{aligned} \tag{10.26}$$

[49] En el caso de que la derivada sea usada en una malla no homogénea, es necesario incluir en la derivada a que Δx se refiere, por ejemplo en cada punto i, tenemos la Δx_{i-} (por la izquierda) y la Δx_{i+} (por la derecha), i.e. $f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x_{i-}) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x_{i+})}{(\Delta x_{i-})(\Delta x_{i+})}$

Algunos ejemplos para cuartas derivadas son

$$
\begin{aligned}
f''''(x_i) &= \frac{f_{i+4} - 4f_{i+3} + 6f_{i+2} - 4f_{i+1} + f_i}{\Delta x^4} + O(\Delta x) \qquad (10.27)\\
f''''(x_i) &= \frac{f_{i+2} - 4f_{i+1} + 6f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{\Delta x^4} + O(\Delta x^2)\\
f''''(x_i) &= \frac{-f_{i+3} + 12f_{i+2} - 39f_{i+1} + 56f_i - 39f_{i-1} + 12f_{i-2} - f_{i-3}}{6\Delta x^4} + O(\Delta x^4)
\end{aligned}
$$

10.4 Derivadas en Dos y Tres Dimensiones

De forma análoga, se construyen aproximaciones en diferencias finitas de primer y segundo orden en dos y tres dimensiones.

10.4.1 Derivadas en Dos Dimensiones

Usando el teorema de Taylor para funciones en dos variables x y y, es posible escribir de forma exacta para el punto x_i y y_j

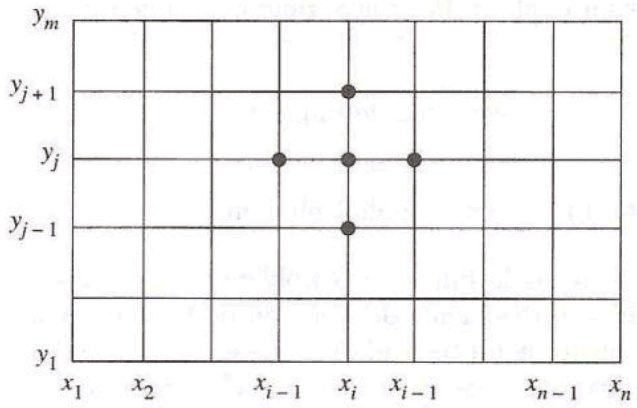


Figura 28: Discretización en un rectángulo.

$$
\begin{aligned}
f(x_i + \Delta x, y_j) &= f(x_i, y_j) + \Delta x \frac{\partial f\,(x_i, y_j)}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 f\,(x_i + \theta_1 \Delta x, y_j)}{\partial x^2} \qquad (10.28)\\
f(x_i, y_j + \Delta y) &= f(x_i, y_j) + \Delta y \frac{\partial f\,(x_i, y_j)}{\partial y} + \frac{\Delta y}{2} \frac{\partial^2 f\,(x_i, y_j + \theta_2 \Delta y)}{\partial y^2}.
\end{aligned}
$$

Así, la aproximación en diferencias hacia adelante de $\partial f/\partial x$ y $\partial f/\partial y$ es

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial x} & \simeq & \dfrac{f\left(x_i+\Delta x,y_j\right)-f\left(x_i,y_j\right)}{\Delta x} \\ \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial y} & \simeq & \dfrac{f\left(x_i,y_j+\Delta y\right)-f\left(x_i,y_j\right)}{\Delta y} \end{array} \tag{10.29}$$

o en su forma simplificada (asociamos $\Delta x = h$ y $\Delta y = k$), entonces tenemos

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial x} & \simeq & \dfrac{f_{i+1,j}-f_{i,j}}{h} \\ \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial y} & \simeq & \dfrac{f_{i,j+1}-f_{i,j}}{k}. \end{array} \tag{10.30}$$

La aproximación en diferencias hacia atrás de $\partial f/\partial x$ y $\partial f/\partial y$ es

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial x} & \simeq & \dfrac{f\left(x_i,y_j\right)-f\left(x_i-\Delta x,y_j\right)}{\Delta x} \\ \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial y} & \simeq & \dfrac{f\left(x_i,y_j\right)-f\left(x_i,y_j-\Delta y\right)}{\Delta y} \end{array} \tag{10.31}$$

o en su forma simplificada tenemos

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial x} & \simeq & \dfrac{f_{i,j}-f_{i-1,j}}{h} \\ \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial y} & \simeq & \dfrac{f_{i,j}-f_{i,j-1}}{k}. \end{array} \tag{10.32}$$

La aproximación en diferencias centradas de $\partial f/\partial x$ y $\partial f/\partial y$ es

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial x} & \simeq & \dfrac{f\left(x_i+\Delta x,y_j\right)-f\left(x_i-\Delta x,y_j\right)}{2\Delta x} \\ \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial y} & \simeq & \dfrac{f\left(x_i,y_j+\Delta y\right)-f\left(x_i,y_j-\Delta y\right)}{2\Delta y} \end{array} \tag{10.33}$$

o en su forma simplificada tenemos

$$\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial x} & \simeq & \dfrac{f_{i+1,j}-f_{i-1,j}}{2h} \\ \dfrac{\partial f\left(x_i,y_j\right)}{\partial y} & \simeq & \dfrac{f_{i,j+1}-f_{i,j-1}}{2k}. \end{array} \tag{10.34}$$

Por otro lado, la aproximación en diferencias centradas de $\partial^2 f/\partial x^2$ y $\partial^2 f/\partial y^2$ es

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(x_i,y_j)}{\partial x^2} &\simeq \frac{f(x_i-\Delta x,y_j)-2f(x_i,y_j)+f(x_i+\Delta x,y_j)}{\Delta x^2} \\ \frac{\partial^2 f(x_i,y_j)}{\partial y^2} &\simeq \frac{f(x_i,y_j-\Delta y)-2f(x_i,y_j)+f(x_i,y_j+\Delta y)}{\Delta y^2} \end{aligned} \tag{10.35}$$

o en su forma simplificada tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f(x_i,y_j)}{\partial x^2} &\simeq \frac{f_{i-1,j}-2f_{i,j}+f_{i+1,j}}{h^2} \\ \frac{\partial^2 f(x_i,y_j)}{\partial y^2} &\simeq \frac{f_{i,j-1}-2f_{i,j}+f_{i,j+1}}{k^2}. \end{aligned} \tag{10.36}$$

10.4.2 Derivadas en Tres Dimensiones

Usando el teorema de Taylor para funciones de tres variables x, y y z, es posible escribir de forma exacta para el punto x_i, y_j y z_k

$$f(x_i+\Delta x,y_j,z_k) = f(x_i,y_j,z_k)+\Delta x\frac{\partial f(x_i,y_j,z_k)}{\partial x}+\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 f(x_i+\theta_1\Delta x,y_j,z_k)}{\partial x^2} \tag{10.37}$$

$$f(x_i,y_j+\Delta y,z_k) = f(x_i,y_j,z_k)+\Delta y\frac{\partial f(x_i,y_j,z_k)}{\partial y}+\frac{\Delta y}{2}\frac{\partial^2 f(x_i,y_j+\theta_2\Delta y,z_k)}{\partial y^2}$$

$$f(x_i,y_j,z_k+\Delta z) = f(x_i,y_j,z_k)+\Delta z\frac{\partial f(x_i,y_j,z_k)}{\partial z}+\frac{\Delta z}{2}\frac{\partial^2 f(x_i,y_j,z_k+\theta_3\Delta z)}{\partial z^2}$$

Así, la aproximación en diferencias hacia adelante de $\partial f/\partial x, \partial f/\partial y$ y $\partial f/\partial z$ es

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_i,y_j,z_k)}{\partial x} &\simeq \frac{f(x_i+\Delta x,y_j,z_k)-f(x_i,y_j,z_k)}{\Delta x} \\ \frac{\partial f(x_i,y_j,z_k)}{\partial y} &\simeq \frac{f(x_i,y_j+\Delta y,z_k)-f(x_i,y_j,z_k)}{\Delta y} \\ \frac{\partial f(x_i,y_j,z_k)}{\partial z} &\simeq \frac{f(x_i,y_j,z_k+\Delta z)-f(x_i,y_j,z_k)}{\Delta z} \end{aligned} \tag{10.38}$$

o en su forma simplificada (para simplificar la notación, asociamos $\Delta x =$

$h, \Delta y = l$ y $\Delta z = m$), tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} &\simeq \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}{h} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y} &\simeq \frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j,k}}{l} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z} &\simeq \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k}}{m}. \end{aligned} \tag{10.39}$$

La aproximación en diferencias hacia atrás de $\partial f/\partial x, \partial f/\partial y$ y $\partial f/\partial z$ es

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} &\simeq \frac{f(x_i, y_j, z_k) - f(x_i - \Delta x, y_j, z_k)}{\Delta x} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y} &\simeq \frac{f(x_i, y_j, z_k) - f(x_i, y_j - \Delta y, z_k)}{\Delta y} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z} &\simeq \frac{f(x_i, y_j, z_k) - f(x_i, y_j, z_k - \Delta z)}{\Delta z} \end{aligned} \tag{10.40}$$

o en su forma simplificada tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} &\simeq \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{h} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y} &\simeq \frac{f_{i,j,k} - f_{i,j-1,k}}{l} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z} &\simeq \frac{f_{i,j,k} - f_{i,j,k-1}}{m}. \end{aligned} \tag{10.41}$$

La aproximación en diferencias centradas de $\partial f/\partial x, \partial f/\partial y$ y $\partial f/\partial z$ es

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} &\simeq \frac{f(x_i + \Delta x, y_j, z_k) - f(x_i - \Delta x, y_j, z_k)}{2\Delta x} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y} &\simeq \frac{f(x_i, y_j + \Delta y, z_k) - f(x_i, y_j - \Delta y, z_k)}{2\Delta y} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z} &\simeq \frac{f(x_i, y_j, z_k + \Delta z) - f(x_i, y_j, z_k - \Delta z)}{2\Delta z} \end{aligned} \tag{10.42}$$

o en su forma simplificada tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x} &\simeq \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i-1,j,k}}{2h} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y} &\simeq \frac{f_{i,j+1,k} - f_{i,j-1,k}}{2l} \\ \frac{\partial f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z} &\simeq \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2m}. \end{aligned} \tag{10.43}$$

Por otro lado, la aproximación en diferencias centradas de $\partial^2 f/\partial x^2, \partial^2 f/\partial y^2$ y $\partial^2 f/\partial z^2$ es

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x^2} &\simeq \frac{f(x_i - \Delta x, y_j, z_k) - 2f(x_i, y_j, z_k) + f(x_i + \Delta x, y_j, z_k)}{\Delta x^2} \\
\frac{\partial^2 f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y^2} &\simeq \frac{f(x_i, y_j - \Delta y, z_k) - f(x_i, y_j, z_k) + f(x_i, y_j + \Delta y, z_k)}{\Delta y^2} \\
\frac{\partial^2 f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z^2} &\simeq \frac{f(x_i, y_j, z_k - \Delta z) - f(x_i, y_j, z_k) + f(x_i, y_j, z_k + \Delta z)}{\Delta z^2}
\end{aligned} \tag{10.44}$$

o en su forma simplificada tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 f(x_i, y_j, z_k)}{\partial x^2} &\simeq \frac{f_{i-1,j,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i+1,j,k}}{h^2} \\
\frac{\partial^2 f(x_i, y_j, z_k)}{\partial y^2} &\simeq \frac{f_{i,j-1,k} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j+1,k}}{l^2} \\
\frac{\partial^2 f(x_i, y_j, z_k)}{\partial z^2} &\simeq \frac{f_{i,j,k-1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k+1}}{m^2}.
\end{aligned} \tag{10.45}$$

11 Apéndice B: Consideraciones Sobre la Implementación de Métodos de Solución de Grandes Sistemas de Ecuaciones Lineales

Los modelos matemáticos de muchos sistemas en Ciencia e Ingeniería y en particular una gran cantidad de sistemas continuos geofísicos requieren el procesamiento de sistemas algebraicos de gran escala. Es este trabajo se muestra como proceder para transformar un problema de ecuaciones diferenciales parciales en un sistema algebraico virtual de ecuaciones lineales; y así, poder hallar la solución a dicho problema al resolver el sistema lineal asociado al esquema DVS. La solución de este sistema virtual, involucra la solución acoplada de muchos sistemas lineales locales —uno por cada subdominio—, cada uno de estos sistemas lineales puede ser expresado en la forma matricial siguiente

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{u} = \underline{f} \tag{11.1}$$

donde la matriz $\underline{\underline{A}}$ es de tamaño $n \times n$ y generalmente bandada, cuyo tamaño de banda es b.

Los métodos de resolución del sistema algebraico de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\,\underline{u} = \underline{f}$ se clasifican en dos grandes grupos (véase [15]): los métodos directos y los métodos iterativos. En los métodos directos la solución $\underline{u}$ se obtiene en un número fijo de pasos y sólo estan sujetos a los errores de redondeo. En los métodos iterativos, se realizan iteraciones para aproximarse a la solución $\underline{u}$ aprovechando las características propias de la matriz $\underline{\underline{A}}$, tratando de usar un menor número de pasos que en un método directo (véase [11], [12], [13] y [15]).

Por lo general, es conveniente usar librerías[50] para implementar de forma eficiente a los vectores, matrices —bandadas y dispersas— y resolver los sistemas lineales locales asociados al método DVS, pero se decidió[51] hacer

[50] Algunas de las librerías más usadas para resolver sistemas lineales usando matrices bandadas y dispersar son PETCs, HYPRE, ATLAS, LAPACK++, LAPACK, EISPACK, LINPACK, BLAS, entre muchas otras alternativas, tanto para implementaciones secuenciales como paralelas y más recientemente para hacer uso de los procesadores CUDA en las GPU de nVidia.

[51] La variedad de librerías y las diferentes versiones que existen —muchas de ellas, difieren en la forma de programar entre versiones sucesivas— y pueden usarse es grande, pero cada una de ellas requiere de una implementación especifica en el programa y una configuración

una jerarquía de clases propia, que implementa los algoritmos necesarios para este trabajo, los cuales corren en cualquier equipo de cómputo que tenga un compilador de C++ y la librería de paso de mensajes MPI; y en caso de querer usar librerías para la manipulación de sistemas lineales, sólo es necesario especializar las clases desarrolladas con las implementaciones particulares de estas; y así, ocultar el uso de dichas librerías sin afectar al resto del código. Siendo sencillo, adaptar el código para usar una o más librerías o versiones de estas, según sea necesario para correr el programa en un equipo de cómputo particular.

Así, para poder operar con los diversos métodos numéricos directos o iterativos que resuelven sistemas lineales reales y virtuales, se implemento una jerarquía de clases, la cual se muestra a continuación:

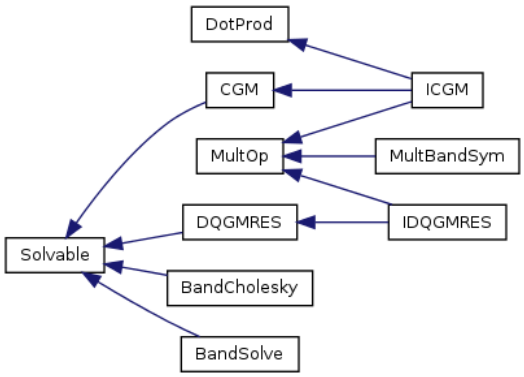


Figura 29: Jerarquía de clases para la resolución de sistemas lineales

Esta jerarquía permite que los métodos DVS le soliciten a la clase abstracta Solvable[52] que resuelva un determinado sistema lineal sin importar el método numérico subyacente —directos o iterativos—, si la matriz es real —existe como tal— o es virtual —esta dispersa en los distintos procesadores

particular del equipo. Esto restringe al código desarrollado a una plataforma y versión particular de la librería seleccionada.

[52]En general los comportamientos virtuales de las clases abstractas, pueden no ser eficientes si son llamadas una gran cantidad de veces durante la ejecución del programa. Para el caso del esquema DVS, en el cual se usa CGM o GMRES para resolver el sistema lineal virtual, este sólo se llama una sola vez; y el proceso de solución del sistema lineal asociado consume la mayoría del tiempo de ejecución, por eso se considera eficiente.

del Cluster— y es reutilizable tanto en la implementación secuencial como paralela. La clase Solvable tiene la siguiente estructura:

```
class Solvable
{
    private:
        int iter;
    public:
        virtual int getIter(void)=0;
        virtual void solve(double *x, double *y)=0;
};
```

11.1 Métodos Directos

En los métodos directos (véase [11] y [14]), la solución $\underline{u}$ se obtiene en un número fijo de pasos y sólo estan sujetos a errores de redondeo. Entre los métodos más importantes se puede considerar: Factorización LU —para matrices simétricas y no simétricas— y Factorización Cholesky —para matrices simétricas—. En todos los casos la matriz original $\underline{\underline{A}}$ es modificada y en caso de usar la Factorización LU el tamaño de la banda b crece a $2b+1$ si la factorización se realiza en la misma matriz.

11.1.1 Factorización LU

Sea $\underline{\underline{U}}$ una matriz triangular superior obtenida de $\underline{\underline{A}}$ por eliminación bandada. Entonces $\underline{\underline{U}} = \underline{\underline{L}}^{-1}\underline{\underline{A}}$, donde $\underline{\underline{L}}$ es una matriz triangular inferior con unos en la diagonal. Las entradas de $\underline{\underline{L}}^{-1}$ pueden obtenerse de los coeficientes $\underline{\underline{L}}_{ij}$ y pueden ser almacenados estrictamente en las entradas de la diagonal inferior de $\underline{\underline{A}}$ ya que estas ya fueron eliminadas. Esto proporciona una Factorización $\underline{\underline{LU}}$ de $\underline{\underline{A}}$ en la misma matriz $\underline{\underline{A}}$ ahorrando espacio de memoria, donde el ancho de banda cambia de b a $2b+1$.

En el algoritmo de Factorización LU, se toma como datos de entrada del sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$, a la matriz $\underline{\underline{A}}$, la cual será factorizada en la misma matriz, esta contendrá a las matrices $\underline{\underline{L}}$ y $\underline{\underline{U}}$ producto de la factorización, quedando

el método numérico esquemáticamente como:

$$\begin{array}{l} A_{ii} = 1, \text{ para } i = 1, ..., N \\ \text{Para } J = 1, 2, ..., N \ \{ \\ \quad \text{Para } i = 1, 2, ..., j \\ \quad\quad A_{ij} = A_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} A_{ik} A_{kj} \\ \quad \text{Para } i = j+1, j+2, ..., N \\ \quad\quad A_{ij} = \frac{1}{A_{jj}} \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} A_{ik} A_{kj} \right) \\ \} \end{array} \tag{11.2}$$

El problema original $\underline{\underline{A}}\,\underline{u} = \underline{f}$ se escribe como $\underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{U}}\,\underline{u} = \underline{f}$, donde la búsqueda de la solución $\underline{u}$ se reduce a la solución sucesiva de los sistemas lineales triangulares

$$\underline{\underline{L}}\,\underline{y} = \underline{f} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{U}}\,\underline{u} = \underline{y}. \tag{11.3}$$

i,.e.

$$\underline{\underline{L}}\,\underline{y} = \underline{f} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{c} y_1 = f_1/l_{11} \\ y_i = \frac{1}{A_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ii} y_i \right) \text{ para toda } i = 1, ..., n \end{array} \right. \tag{11.4}$$

y

$$\underline{\underline{U}}\,\underline{u} = \underline{y} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{c} x_n = y_n/u_{nn} \\ x_i = \frac{1}{A_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij} x_j \right) \text{ para toda } i = n-1, ..., 1 \end{array} \right. \tag{11.5}$$

La descomposición $\underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{U}}$ requiere $N^3/3$ operaciones aritméticas para la matriz llena, pero sólo Nb^2 operaciones aritméticas para la matriz con un ancho de banda de b siendo esto más económico computacionalmente.

Implementación LU Orientada a Objetos en C++ En este caso se desarrollo una jerarquía de clases para poder operar con matrices bandadas y dispersas, llamada BandSolve la cual se muestra a continuación:

```
class BandSolve: public Solvable
{
    private:
        double **AK;
    protect:
        factorLU(void);
    public:
        BanSolve(int n, double **A);
        BanSolve(int n, Matriz *A);
        void solve(double *x, double *y);
        void convertBand(void);
        int getIter(void);
};
```

11.1.2 Factorización Cholesky

Cuando la matriz es simétrica y definida positiva, se obtiene la descomposición $\underline{\underline{LU}}$ de la matriz $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{LDU}} = \underline{\underline{LDL}}^T$ donde $\underline{\underline{D}} = diag(\underline{\underline{U}})$ es la diagonal con entradas positivas.

En el algoritmo de Factorización Cholesky, se toma como datos de entrada del sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$, a la matriz $\underline{\underline{A}}$, la cual será factorizada en la misma matriz y contendrá a las matrices $\underline{\underline{L}}$ y $\underline{\underline{L}}^T$ producto de la factorización, quedando el método numérico esquemáticamente como:

$$\begin{aligned} &\text{para } i = 1, 2, ..., n \text{ y } j = i+1, ..., n \\ &A_{ii} = \sqrt{\left(A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} A_{ik}^2 \right)} \\ &A_{ji} = \left(A_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} A_{jk} A_{ik} \right) / A_{ii} \end{aligned} \tag{11.6}$$

El problema original $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ se escribe como $\underline{\underline{LL}}^T\underline{u} = \underline{b}$, donde la búsqueda de la solución $\underline{u}$ se reduce a la solución sucesiva de los sistemas lineales triangulares

$$\underline{\underline{L}}\underline{y} = \underline{f} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{L}}^T\underline{u} = \underline{y} \tag{11.7}$$

usando la formulación equivalente dada por las Ec.(11.4) y (11.5) para la descomposición LU.

La mayor ventaja de esta descomposición es que, en el caso en que es aplicable, el costo de cómputo es sustancialmente reducido, ya que requiere de $N^3/6$ multiplicaciones y $N^3/6$ sumas.

Implementación Cholesky Orientada a Objetos en C++ En este caso se desarrollo una jerarquía de clases para poder operar con matrices bandadas y dispersas, llamada BandCholesky la cual se muestra a continuación:

```
class BandCholesky: public Solvable
{
    private:
        double **AK;
    protect:
        factorLU(void);
    public:
        BanCholesky(int n, double **A);
        BanCholesky(int n, Matriz *A);
        void solve(double *x, double *y);
        void convertBand(void);
        int getIter(void);
};
```

11.2 Métodos Iterativos

En los métodos iterativos, se realizan iteraciones para aproximarse a la solución $\underline{u}$ aprovechando las características propias de la matriz $\underline{\underline{A}}$, tratando de usar un menor número de pasos que en un método directo (véase [11] y [14]).

En los métodos iterativos tales como Jacobi, Gauss-Seidel y de Relajación Sucesiva (SOR) en el cual se resuelve el sistema lineal

$$\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f} \tag{11.8}$$

comienza con una aproximación inicial $\underline{u}^0$ a la solución $\underline{u}$ y genera una sucesión de vectores $\left\{u^k\right\}_{k=1}^{\infty}$ que converge a $\underline{u}$. Los métodos iterativos traen consigo un proceso que convierte el sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$ en otro equivalente mediante la iteración de punto fijo de la forma $\underline{u} = \underline{\underline{T}}\underline{u} + \underline{c}$ para alguna matriz

fija $\underline{\underline{T}}$ y un vector $\underline{c}$. Luego de seleccionar el vector inicial $\underline{u}^0$ la sucesión de los vectores de la solución aproximada se genera calculando

$$\underline{u}^k = \underline{\underline{T}}\underline{u}^{k-1} + \underline{c} \quad \forall k = 1, 2, 3, ... \tag{11.9}$$

La convergencia a la solución la garantiza el siguiente teorema (véase [15]).

Teorema 12 *Si* $\left\|\underline{\underline{T}}\right\| < 1$, *entonces el sistema lineal* $\underline{u} = \underline{\underline{T}}\underline{u} + \underline{c}$ *tiene una solución única* $\underline{u}^*$ *y las iteraciones* $\underline{u}^k$ *definidas por la fórmula* $\underline{u}^k = \underline{\underline{T}}\underline{u}^{k-1} + \underline{c} \quad \forall k = 1, 2, 3, ...$ *convergen hacia la solución exacta* $\underline{u}^*$ *para cualquier aproximación inicial* $\underline{u}^0$.

Nótese que, mientras menor sea la norma de la matriz $\underline{\underline{T}}$, más rápida es la convergencia, en el caso cuando $\left\|\underline{\underline{T}}\right\|$ es menor que uno, pero cercano a uno, la convergencia es lenta y el número de iteraciones necesario para disminuir el error depende significativamente del error inicial. En este caso, es deseable proponer al vector inicial $\underline{u}^0$ de forma tal que sea mínimo el error inicial. Sin embargo, la elección de dicho vector no tiene importancia si la $\left\|\underline{\underline{T}}\right\|$ es pequeña, ya que la convergencia es rápida.

Como es conocido, la velocidad de convergencia de los métodos iterativos dependen de las propiedades espectrales de la matriz de coeficientes del sistema de ecuaciones, cuando el operador diferencial $\mathcal{L}$ de la ecuación del problema a resolver es auto-adjunto se obtiene una matriz simétrica y positivo definida y el número de condicionamiento de la matriz $\underline{\underline{A}}$, es por definición

$$cond(\underline{\underline{A}}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \geq 1 \tag{11.10}$$

donde $\lambda_{\max}$ y $\lambda_{\min}$ es el máximo y mínimo de los eigen-valores de la matriz $\underline{\underline{A}}$. Si el número de condicionamiento es cercano a 1 los métodos numéricos al solucionar el problema convergerá en pocas iteraciones, en caso contrario se requerirán muchas iteraciones.

Frecuentemente al usar el método de Elemento Finito, Diferencias Finitas, entre otros, se tiene una velocidad de convergencia de $O\left(\frac{1}{h^2}\right)$ y en el caso de métodos de descomposición de dominio sin precondicionar se tiene una velocidad de convergencia de $O\left(\frac{1}{h}\right)$, donde h es la máxima distancia de separación entre nodos continuos de la partición, es decir, que poseen una pobre velocidad de convergencia cuando $h \to 0$ (véase [9], [10], [11] y [15]).

Los métodos Jacobi, Gauss-Seidel y de Relajación Sucesiva (SOR) son usualmente menos eficientes que los métodos discutidos en el resto de esta

sección basados en el espacio de Krylov (véase [46] y [14]). Estos métodos minimizan, en la k-ésima iteración alguna medida de error sobre el espacio afín $\underline{x_0} + \mathcal{K}_k$, donde $\underline{x_0}$ es la iteración inicial y $\mathcal{K}_k$ es el k-ésimo subespacio de Krylov

$$\mathcal{K}_k = Generado\left\{\underline{r_0}, \underline{\underline{A}}\,\underline{r_0}, ..., \underline{\underline{A}}^{k-1}\underline{r_0}\right\} \text{ para } k \geq 1. \tag{11.11}$$

El residual es $\underline{r} = \underline{b} - \underline{\underline{A}}\,\underline{x}$, tal $\left\{\underline{r_k}\right\}_{k\geq 0}$ denota la sucesión de residuales

$$\underline{r_k} = \underline{b} - \underline{\underline{A}}\,\underline{x_k}. \tag{11.12}$$

Entre los métodos más usados definidos en el espacio de Krylov para el tipo de problemas tratados en el presente trabajo se puede considerar: Método de Gradiente Conjugado —para matrices simétricas— y GMRES —para matrices no simétricas—.

11.2.1 Método de Gradiente Conjugado

Si la matriz generada por la discretización es simétrica —$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}}^T$— y definida positiva —$\underline{u}^T\,\underline{\underline{A}}\,\underline{u} > 0$ para todo $\underline{u} \neq 0$—, entonces es aplicable el método de Gradiente Conjugado —Conjugate Gradient Method (CGM)—. La idea básica en que descansa el método del Gradiente Conjugado consiste en construir una base de vectores ortogonales espacio de Krylov $\mathcal{K}_n\left(\underline{\underline{A}}, \underline{v}^n\right)$ y utilizarla para realizar la búsqueda de la solución en forma lo más eficiente posible.

Tal forma de proceder generalmente no sería aconsejable porqué la construcción de una base ortogonal utilizando el procedimiento de Gram-Schmidt requiere, al seleccionar cada nuevo elemento de la base, asegurar su ortogonalidad con respecto a cada uno de los vectores construidos previamente. La gran ventaja del método de Gradiente Conjugado radica en que cuando se utiliza este procedimiento, basta con asegurar la ortogonalidad de un nuevo miembro con respecto al último que se ha construido, para que automáticamente esta condición se cumpla con respecto a todos los anteriores.

En el algoritmo de Gradiente Conjugado, se toma a la matriz $\underline{\underline{A}}$ como simétrica y positiva definida, y como datos de entrada del sistema

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{u} = \underline{f} \tag{11.13}$$

el vector de búsqueda inicial $\underline{u}^0$ y se calcula $\underline{r}^0 = \underline{f} - \underline{\underline{A}}\underline{u}^0$, $\underline{p}^0 = \underline{r}^0$, quedando el método numérico esquemáticamente como:

$$\begin{aligned}
&\alpha^n = \frac{\langle \underline{p}^n, \underline{p}^n \rangle}{\langle \underline{p}^n, \underline{\underline{A}}\underline{p}^n \rangle} \\
&\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + \alpha^n \underline{p}^n \\
&\underline{r}^{n+1} = \underline{r}^n - \alpha^n \underline{\underline{A}}\underline{p}^n \\
&\text{Prueba de convergencia} \\
&\beta^n = \frac{\langle \underline{r}^{n+1}, \underline{r}^{n+1} \rangle}{\langle \underline{r}^n, \underline{r}^n \rangle} \\
&\underline{p}^{n+1} = \underline{r}^{n+1} + \beta^n \underline{p}^n \\
&n = n + 1
\end{aligned} \tag{11.14}$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle = (\cdot, \cdot)$ será el producto interior adecuado al sistema lineal en particular, la solución aproximada será $\underline{u}^{n+1}$ y el vector residual será $\underline{r}^{n+1}$.

En la implementación numérica y computacional del método es necesario realizar la menor cantidad de operaciones posibles por iteración, en particular en $\underline{\underline{A}}\underline{p}^n$, una manera de hacerlo queda esquemáticamente como:

Dado el vector de búsqueda inicial $\underline{u}$, calcula $\underline{r} = \underline{f} - \underline{\underline{A}}\underline{u}$, $\underline{p} = \underline{r}$ y $\mu = \underline{r} \cdot \underline{r}$.

Para $n = 1, 2, ...,$Mientras $(\mu < \varepsilon)$ {
- $\underline{v} = \underline{\underline{A}}\underline{p}$
- $\alpha = \frac{\mu}{\underline{p} \cdot \underline{v}}$
- $\underline{u} = \underline{u} + \alpha \underline{p}$
- $\underline{r} = \underline{r} - \alpha \underline{v}$
- $\mu' = \underline{r} \cdot \underline{r}$
- $\beta = \frac{\mu'}{\mu}$
- $\underline{p} = \underline{r} + \beta \underline{p}$
- $\mu = \mu'$

}

La solución aproximada será $\underline{u}$ y el vector residual será $\underline{r}$.

Si se denota con $\{\lambda_i, V_i\}_{i=1}^N$ las eigen-soluciones de $\underline{\underline{A}}$, i.e. $\underline{\underline{A}}V_i = \lambda_i V_i$, $i = 0, 1, 2, ..., N$. Ya que la matriz $\underline{\underline{A}}$ es simétrica, los eigen-valores son reales y se pueden ordenar $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_N$. Se define el número de condición por $Cond(\underline{\underline{A}}) = \lambda_N / \lambda_1$ y la norma de la energía asociada a $\underline{\underline{A}}$ por $\|\underline{u}\|^2_{\underline{\underline{A}}} = \underline{u} \cdot \underline{\underline{A}}\underline{u}$ entonces

$$\left\| \underline{u} - \underline{u}^k \right\|_{\underline{\underline{A}}} \leq \left\| \underline{u} - \underline{u}^0 \right\|_{\underline{\underline{A}}} \left[\frac{1 - \sqrt{Cond(\underline{\underline{A}})}}{1 + \sqrt{Cond(\underline{\underline{A}})}} \right]^{2k}. \tag{11.15}$$

El siguiente teorema da idea del espectro de convergencia del sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$ para el método de Gradiente Conjugado.

Teorema 13 *Sea* $\kappa = cond(\underline{\underline{A}}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \geq 1$, *entonces el método de Gradiente Conjugado satisface la* $\underline{\underline{A}}-$*norma del error dado por*

$$\frac{\|e^n\|}{\|e^0\|} \leq \frac{2}{\left[\left(\frac{\sqrt{\kappa}+1}{\sqrt{\kappa}-1}\right)^n + \left(\frac{\sqrt{\kappa}+1}{\sqrt{\kappa}-1}\right)^{-n}\right]} \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^n \tag{11.16}$$

donde $\underline{e}^m = \underline{u} - \underline{u}^m$ *del sistema* $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$.

Nótese que para κ grande se tiene que

$$\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1} \simeq 1 - \frac{2}{\sqrt{\kappa}} \tag{11.17}$$

tal que

$$\|\underline{e}^n\|_{\underline{\underline{A}}} \simeq \left\|\underline{e}^0\right\|_{\underline{\underline{A}}} \exp\left(-2\frac{n}{\sqrt{\kappa}}\right) \tag{11.18}$$

de lo anterior se puede esperar un espectro de convergencia del orden de $O(\sqrt{\kappa})$ iteraciones (véase [15] y [46]).

Consideraciones sobre la Matriz y el producto punto en el CGM Es común al trabajar en métodos de descomposición de dominio que se requieran usar más de un producto interior $\langle \cdot, \cdot \rangle$ en distintas implementaciones del mismo algoritmo de Gradiente Conjugado. Por ello se diseña el algoritmo para soportar en forma de parámetro el objeto que implemente el producto punto.

```
class DotProd
{
    public:
        virtual double dot(double *x, double *y)=0;
};
```

En este caso, al usar el esquema DVS la matriz con la que trabajara el método de Gradiente Conjugado puede estar definida como tal o ser virtual; en el caso más general, puede estar en un procesador o en múltiples procesadores, por ello, en el diseño del algoritmo se decidió implementar un objeto el cual pueda realizar la multiplicación de la matriz por el vector, sin importar el tipo de matriz —real o virtual—.

```
class MultOp
{
    public:
        virtual void multOp(double *x, double *y)=0;
        virtual int getSize(void)=0;
};
```

Así, se diseña un solo método de Gradiente Conjugado robusto y flexible que soporta diferentes productos interiores y trabaja con matrices reales o virtuales, adaptándose sin ningún cambio a diversas necesidades de implementación tanto secuencial como paralela.

Implementación CGM Orientada a Objetos en C++ Dado el sistema lineal $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$, donde $\underline{\underline{A}}$ sea una matriz real o virtual. La entrada al método será una elección de $\underline{u}^0$ como condición inicial, $\varepsilon > 0$ como la tolerancia del método, N como el número máximo de iteraciones además de un objeto para realizar la multiplicación de la matriz por un vector y otro objeto para el producto interior, el algoritmo del método de Gradiente Conjugado orientado a objetos en C++ queda como:

```
class CGM: public Solvable
{
    protect:
        MultOp *A;
        DotProd *dotP;
        double norm(double *x);
    public:
        CGM(MulOp &A, DotProd &dotP, double eps);
        void solve(double *x, double *y);
        int getIter(void);
};
```

El método de Gradiente Conjugado por si mismo no permite el uso de precondicionadores, pero con una pequeña modificación en el producto interior usado en el método, da origen al método de Gradiente Conjugado precondicionado que a continuación detallaremos.

11.2.2 Gradiente Conjugado Precondicionado

Cuando la matriz $\underline{\underline{A}}$ es simétrica y definida positiva se puede escribir como

$$\lambda_1 \leq \frac{\underline{u}\underline{\underline{A}} \cdot \underline{u}}{\underline{u} \cdot \underline{u}} \leq \lambda_n \tag{11.19}$$

y tomando la matriz $\underline{\underline{C}}^{-1}$ como un precondicionador de $\underline{\underline{A}}$ con la condición de que

$$\lambda_1 \leq \frac{\underline{u}\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}} \cdot \underline{u}}{\underline{u} \cdot \underline{u}} \leq \lambda_n \tag{11.20}$$

entonces la Ec. (11.13) se pude escribir como

$$\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{\underline{C}}^{-1} b \tag{11.21}$$

donde $\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}$ es también simétrica y definida positiva en el producto interior $\langle \underline{u}, \underline{v} \rangle = \underline{u} \cdot \underline{\underline{C}}\underline{v}$, porque

$$\begin{aligned} \left\langle \underline{u}, \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{v} \right\rangle &= \underline{u} \cdot \underline{\underline{C}} \left(\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{v} \right) \\ &= \underline{u} \cdot \underline{\underline{A}}\underline{v} \end{aligned} \tag{11.22}$$

que por hipótesis es simétrica y definida positiva en ese producto interior.

La elección del producto interior $\langle \cdot, \cdot \rangle$ quedará definido como

$$\langle \underline{u}, \underline{v} \rangle = \underline{u} \cdot \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{v} \tag{11.23}$$

por ello las Ecs. (11.14[1]) y (11.14[3]), se convierten en

$$\alpha^{k+1} = \frac{\underline{r}^k \cdot \underline{r}^k}{\underline{p}^{k+1} \cdot \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{p}^{k+1}} \tag{11.24}$$

y

$$\beta^{k+1} = \frac{\underline{p}^k \cdot \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}^k}{\underline{p}^k \cdot \underline{\underline{A}}\underline{p}^k} \tag{11.25}$$

generando el método de Gradiente Conjugado precondicionado con precondicionador $\underline{\underline{C}}^{-1}$. Es necesario hacer notar que los métodos Gradiente Conjugado y Gradiente Conjugado Precondicionado sólo difieren en la elección del producto interior.

Para el método de Gradiente Conjugado Precondicionado, los datos de entrada son un vector de búsqueda inicial $\underline{u}^0$ y el precondicionador $\underline{\underline{C}}^{-1}$. Calculándose $\underline{r}^0 = \underline{b} - \underline{\underline{A}}\underline{u}^0$, $\underline{p} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}^0$, quedando el método esquemáticamente como:

$$\begin{aligned} \beta^{k+1} &= \frac{\underline{p}^k \cdot \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}^k}{\underline{p}^k \cdot \underline{\underline{A}}\underline{p}^k} \\ \underline{p}^{k+1} &= \underline{r}^k - \beta^{k+1}\underline{p}^k \\ \alpha^{k+1} &= \frac{\underline{r}^k \cdot \underline{r}^k}{\underline{p}^{k+1} \cdot \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{p}^{k+1}} \\ \underline{u}^{k+1} &= \underline{u}^k + \alpha^{k+1}\underline{p}^{k+1} \\ \underline{r}^{k+1} &= \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}^k - \alpha^{k+1}\underline{\underline{A}}\underline{p}^{k+1}. \end{aligned} \tag{11.26}$$

Algoritmo Computacional del Método Dado el sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$, con la matriz $\underline{\underline{A}}$ simétrica y definida positiva de dimensión $n \times n$. La entrada al método será una elección de $\underline{u}^0$ como condición inicial, $\varepsilon > 0$ como la tolerancia del método, N como el número máximo de iteraciones y la matriz de precondicionamiento $\underline{\underline{C}}^{-1}$ de dimensión $n \times n$, el algoritmo del método de Gradiente Conjugado Precondicionado queda como:

$\underline{r} = \underline{b} - \underline{\underline{A}}\underline{u}$
$\underline{w} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}$
$\underline{v} = (\underline{\underline{C}}^{-1})^T\underline{w}$
$\alpha = \sum_{j=1}^{n} w_j^2$
$k = 1$
Mientras que $k \leq N$

Si $\|\underline{v}\|_\infty < \varepsilon$ Salir
$\underline{x} = \underline{\underline{A}}\underline{v}$
$t = \dfrac{\alpha}{\sum_{j=1}^{n} v_j x_j}$
$\underline{u} = \underline{u} + t\underline{v}$
$\underline{r} = \underline{r} - t\underline{x}$
$\underline{w} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}$
$\beta = \sum_{j=1}^{n} w_j^2$

Si $\|\underline{r}\|_\infty < \varepsilon$ Salir

$s = \dfrac{\beta}{\alpha}$

$\underline{v} = \left(\underline{\underline{C}}^{-1}\right)^T \underline{w} + s\underline{v}$

$\alpha = \beta$

$k = k + 1$

La salida del método será la solución aproximada $\underline{u} = (u_1, ..., u_n)$ y el residual $\underline{r} = (r_1, ..., r_n)$.

En el caso del método sin precondicionamiento, $\underline{\underline{C}}^{-1}$ es la matriz identidad, que para propósitos de optimización sólo es necesario hacer la asignación de vectores correspondiente en lugar del producto de la matriz por el vector. En el caso de que la matriz $\underline{\underline{A}}$ no sea simétrica, el método de Gradiente Conjugado puede extenderse para soportarlas, para más información sobre pruebas de convergencia, resultados numéricos entre los distintos métodos de solución del sistema algebraico $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$ generada por la discretización de un problema elíptico y como extender estos para matrices no simétricas ver [17] y [18].

Teorema 14 *Sean $\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{B}}$ y $\underline{\underline{C}}$ tres matrices simétricas y positivas definidas entonces*

$$\kappa\left(\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\right) \leq \kappa\left(\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{B}}\right)\kappa\left(\underline{\underline{B}}^{-1}\underline{\underline{A}}\right).$$

11.2.3 Método Residual Mínimo Generalizado

Si la matriz generada por la discretización es no simétrica, entonces una opción, es el método Residual Mínimo Generalizado —Generalized Minimum Residual Method (GMRES)—, este representa una formulación iterativa común satisfaciendo una condición de optimización. La idea básica detrás del método se basa en construir una base ortonormal

$$\left\{\underline{v}^1, \underline{v}^2, ..., \underline{v}^n\right\} \tag{11.27}$$

para el espacio de Krylov $\mathcal{K}_n\left(\underline{\underline{A}}, \underline{v}^n\right)$. Para hacer $\underline{v}^{n+1}$ ortogonal a $\mathcal{K}_n\left(\underline{\underline{A}}, \underline{v}^n\right)$, es necesario usar todos los vectores previamente construidos $\left\{\underline{v}^{n+1j}\right\}_{j=1}^n$ —en la práctica sólo se guardan algunos vectores anteriores— en los cálculos. Y el algoritmo se basa en una modificación del método de Gram-Schmidt para

la generación de una base ortonormal. Sea $\underline{\underline{V}}_n = [\underline{v}^1, \underline{v}^2, ..., \underline{v}^n]$ la cual denota la matriz conteniendo $\underline{v}^j$ en la j-ésima columna, para $j = 1, 2, ..., n$, y sea $\underline{\underline{H}}_n = [h_{i,j}], 1 \leq i, j \leq n$, donde las entradas de $\underline{\underline{H}}_n$ no especificadas en el algoritmo son cero. Entonces, $\underline{\underline{H}}_n$ es una matriz superior de Hessenberg. i.e. $h_{ij} = 0$ para $j < i - 1$, y

$$\begin{aligned} \underline{\underline{AV}}_n &= \underline{\underline{V}}_n \underline{\underline{H}}_n + h_{n+1,n} \left[0, ..., 0, \underline{v}^{n+1}\right] \\ \underline{\underline{H}}_n &= \underline{\underline{H}}_n^T \underline{\underline{AV}}_n. \end{aligned} \tag{11.28}$$

En el algoritmo del método Residual Mínimo Generalizado, la matriz $\underline{\underline{A}}$ es tomada como no simétrica, y como datos de entrada del sistema

$$\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f} \tag{11.29}$$

el vector de búsqueda inicial $\underline{u}^0$ y se calcula $\underline{r}^0 = \underline{f} - \underline{\underline{A}}\underline{u}^0$, $\beta^0 = \|r^0\|$, $\underline{v}^1 = \underline{r}^0/\beta^0$, quedando el método esquemáticamente como:

$$\begin{array}{l} \text{Para } n = 1, 2, ..., \text{Mientras } \beta^n < \tau\beta^0 \ \{ \\ \quad \underline{w}_0^{n+1} = \underline{\underline{A}}\underline{v}^n \\ \quad \text{Para } l = 1 \text{ hasta } n \ \{ \\ \quad\quad h_{l,n} = \left\langle \underline{w}_l^{n+1}, \underline{v}^l \right\rangle \\ \quad\quad \underline{w}_{l+1}^{n+1} = \underline{w}_l^{n+1} - h_{l,n}\underline{v}^l \\ \quad \} \\ \quad h_{n+1,n} = \left\| \underline{w}_{n+1}^{n+1} \right\| \\ \quad \underline{v}^{n+1} = \underline{w}_{n+1}^{n+1}/h_{n+1,n} \\ \quad \text{Calcular } \underline{y}^n \text{ tal que } \beta^n = \left\| \beta^0 \underline{e}_1 - \underline{\underline{\hat{H}}}_n \underline{y}^n \right\| \text{ es mínima} \\ \} \end{array} \tag{11.30}$$

donde $\underline{\underline{\hat{H}}}_n = [h_{ij}]_{1 \leq i \leq n+1, 1 \leq j \leq n}$, la solución aproximada será $\underline{u}^n = \underline{u}^0 + \underline{\underline{V}}_n \underline{y}^n$, y el vector residual será

$$\underline{r}^n = \underline{r}^0 - \underline{\underline{AV}}_n y^n = \underline{\underline{V}}_{n+1} \left(\beta^0 \underline{e}_1 - \underline{\underline{\hat{H}}}_n \underline{y}^n \right). \tag{11.31}$$

Teorema 15 *Sea $\underline{u}^k$ la iteración generada después de k iteraciones de GMRES, con residual $\underline{r}^k$. Si la matriz $\underline{\underline{A}}$ es diagonalizable, i.e. $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{V}}\Lambda\underline{\underline{V}}^{-1}$ donde Λ es una matriz diagonal de eigen-valores de $\underline{\underline{A}}$, y $\underline{\underline{V}}$ es la matriz cuyas columnas son los eigen-vectores, entonces*

$$\frac{\left\| r^k \right\|}{\left\| r^0 \right\|} \leq \kappa(V) \min_{p_\kappa \in \Pi\kappa, p_k(0)=1} \max_{\lambda_j} |p_\kappa(\lambda_j)| \tag{11.32}$$

donde $\kappa(V) = \frac{\|\underline{\underline{V}}\|}{\|\underline{\underline{V}}^{-1}\|}$ *es el número de condicionamiento de* $\underline{\underline{V}}$.

Consideraciones sobre la Matriz en el GMRES En este caso al usar DVS la matriz con la que trabajara el método GMRES puede estar definida como tal o ser virtual, o en el caso más general, puede estar en un procesador o en múltiples procesadores, por ello en el diseño del algoritmo se decidió implementar un objeto el cual pueda realizar la multiplicación de la matriz por el vector, sin importar el tipo de matriz —real o virtual—.

```
class MultOp
{
    public:
        virtual void multOp(double *x, double *y)=0;
        virtual int getSize(void)=0;
};
```

Así, se diseña un sólo método de GMRES robusto y flexible que trabaje con matrices reales o virtuales, adaptándose sin ningún cambio a diversas necesidades de implementación tanto secuencial como paralela.

Implementación GMRES Orientada a Objetos en C++ Dado el sistema lineal $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$, donde $\underline{\underline{A}}$ sea una matriz real o virtual. La entrada al método será una elección de $\underline{u}^0$ como condición inicial, $\varepsilon > 0$ como la tolerancia del método, N como el número máximo de iteraciones y k el número de vectores a guardar además de un objeto para realizar la multiplicación de la matriz por un vector, el algoritmo del método de GMRES orientado a objetos en C++ queda como:

```
class DQGMRES: public Solvable
{
    protect:
        MultOp *A;
    public:
        DQGMRES(MulOp &A, int k);
        void solve(double *x, double *y);
        int getIter(void);
};
```

11.3 Precondicionadores

Una vía que permite mejorar la eficiencia de los métodos iterativos consiste en transformar al sistema de ecuaciones en otro equivalente, en el sentido de que posea la misma solución del sistema original pero que a su vez tenga mejores condiciones espectrales. Esta transformación se conoce como precondicionamiento y consiste en aplicar al sistema de ecuaciones una matriz conocida como precondicionador encargada de realizar el mejoramiento del número de condicionamiento.

Una amplia clase de precondicionadores han sido propuestos basados en las características algebraicas de la matriz del sistema de ecuaciones, mientras que por otro lado también existen precondicionadores desarrollados a partir de las características propias del problema que lo origina, un estudio más completo puede encontrarse en [3] y [16].

¿Qué es un Precondicionador? De una manera formal podemos decir que un precondicionador consiste en construir una matriz $\underline{\underline{C}}$, la cuál es una aproximación en algún sentido de la matriz $\underline{\underline{A}}$ del sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$, de manera tal que si multiplicamos ambos miembros del sistema de ecuaciones original por $\underline{\underline{C}}^{-1}$ obtenemos el siguiente sistema

$$\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{b} \tag{11.33}$$

donde el número de condicionamiento de la matriz del sistema transformado $\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}$ debe ser menor que el del sistema original, es decir

$$Cond(\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}) < Cond(\underline{\underline{A}}), \tag{11.34}$$

dicho de otra forma un precondicionador es una inversa aproximada de la matriz original

$$\underline{\underline{C}}^{-1} \simeq \underline{\underline{A}}^{-1} \tag{11.35}$$

que en el caso ideal $\underline{\underline{C}}^{-1} = \underline{\underline{A}}^{-1}$ el sistema convergería en una sola iteración, pero el coste computacional del cálculo de $\underline{\underline{A}}^{-1}$ equivaldría a resolver el sistema por un método directo. Se sugiere que $\underline{\underline{C}}$ sea una matriz lo más próxima a $\underline{\underline{A}}$ sin que su determinación suponga un coste computacional elevado.

Dependiendo de la forma de platear el producto de $\underline{\underline{C}}^{-1}$ por la matriz del sistema obtendremos distintas formas de precondicionamiento, estas son:

$\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{b}$	Precondicionamiento por la izquierda
$\underline{\underline{A}}\underline{\underline{C}}^{-1}\underline{\underline{C}}\underline{u} = \underline{b}$	Precondicionamiento por la derecha
$\underline{\underline{C}}_1^{-1}\underline{\underline{A}}\underline{\underline{C}}_2^{-1}\underline{\underline{C}}_2\underline{u} = \underline{\underline{C}}_1^{-1}\underline{b}$	Precondicionamiento por ambos lados si $\underline{\underline{C}}$ puede factorizarse como $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}}_1\underline{\underline{C}}_2$.

El uso de un precondicionador en un método iterativo provoca que se incurra en un costo de cómputo extra debido a que inicialmente se construye y luego se debe aplicar en cada iteración. Teniéndose que encontrar un balance entre el costo de construcción y aplicación del precondicionador versus la ganancia en velocidad en convergencia del método.

Ciertos precondicionadores necesitan poca o ninguna fase de construcción, mientras que otros pueden requerir de un trabajo substancial en esta etapa. Por otra parte la mayoría de los precondicionadores requieren en su aplicación un monto de trabajo proporcional al número de variables; esto implica que se multiplica el trabajo por iteración en un factor constante.

De manera resumida un buen precondicionador debe reunir las siguientes características:

i) Al aplicar un precondicionador $\underline{\underline{C}}$ al sistema original de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$, se debe reducir el número de iteraciones necesarias para que la solución aproximada tenga la convergencia a la solución exacta con una exactitud ε prefijada.

ii) La matriz $\underline{\underline{C}}$ debe ser fácil de calcular, es decir, el costo computacional de la construcción del precondicionador debe ser pequeño comparado con el costo total de resolver el sistema de ecuaciones $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$.

iii) El sistema $\underline{\underline{C}}\underline{z} = \underline{r}$ debe ser fácil de resolver. Esto debe interpretarse de dos maneras:

a) El monto de operaciones por iteración debido a la aplicación del precondicionador $\underline{\underline{C}}$ debe ser pequeño o del mismo orden que las que se requerirían sin precondicionamiento. Esto es importante si se trabaja en máquinas secuenciales.

b) El tiempo requerido por iteración debido a la aplicación del precondicionador debe ser pequeño.

En computadoras paralelas es importante que la aplicación del precondicionador sea paralelizable, lo cual eleva su eficiencia, pero debe de existir un

balance entre la eficacia de un precondicionador en el sentido clásico y su eficiencia en paralelo ya que la mayoría de los precondicionadores tradicionales tienen un componente secuencial grande.

Clasificación de los Precondicionadores En general se pueden clasificar en dos grandes grupos según su manera de construcción: los algebraicos o a posteriori y los a priori o directamente relacionados con el problema continuo que lo origina.

11.3.1 Precondicionador a Posteriori

Los precondicionadores algebraicos o a posteriori son los más generales, ya que sólo dependen de la estructura algebraica de la matriz $\underline{\underline{A}}$, esto quiere decir que no tienen en cuenta los detalles del proceso usado para construir el sistema de ecuaciones lineales $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$. Entre estos podemos citar los métodos de precondicionamiento del tipo Jacobi, SSOR, factorización incompleta, inversa aproximada, diagonal óptimo y polinomial.

Precondicionador Jacobi El método precondicionador Jacobi es el precondicionador más simple que existe y consiste en tomar en calidad de precondicionador a los elementos de la diagonal de $\underline{\underline{A}}$

$$C_{ij} = \begin{cases} A_{ij} \quad si \quad i = j \\ \\ 0 \quad si \quad i \neq j. \end{cases} \tag{11.36}$$

Debido a que las operaciones de división son usualmente más costosas en tiempo de cómputo, en la práctica se almacenan los recíprocos de la diagonal de $\underline{\underline{A}}$.

> Ventajas: No necesita trabajo para su construcción y puede mejorar la convergencia.
>
> Desventajas: En problemas con número de condicionamiento muy grande, no es notoria la mejoría en el número de iteraciones.

Precondicionador SSOR Si la matriz original es simétrica, se puede descomponer como en el método de sobrerrelajamiento sucesivo simétrico

(SSOR) de la siguiente manera

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L}}^T \tag{11.37}$$

donde $\underline{\underline{D}}$ es la matriz de la diagonal principal y $\underline{\underline{L}}$ es la matriz triangular inferior.

La matriz en el método SSOR se define como

$$\underline{\underline{C}}(\omega) = \frac{1}{2-w}\left(\frac{1}{\omega}\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}}\right)\left(\frac{1}{\omega}\underline{\underline{D}}\right)^{-1}\left(\frac{1}{\omega}\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}}\right)^T \tag{11.38}$$

en la práctica la información espectral necesaria para hallar el valor óptimo de ω es demasiado costoso para ser calculado.

> Ventajas: No necesita trabajo para su construcción, puede mejorar la convergencia significativamente.
>
> Desventajas: Su paralelización depende fuertemente del ordenamiento de las variables.

Precondicionador de Factorización Incompleta Existen una amplia clase de precondicionadores basados en factorizaciones incompletas. La idea consiste en que durante el proceso de factorización se ignoran ciertos elementos diferentes de cero correspondientes a posiciones de la matriz original que son nulos. La matriz precondicionadora se expresa como $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{LU}}$, donde $\underline{\underline{L}}$ es la matriz triangular inferior y $\underline{\underline{U}}$ la superior. La eficacia del método depende de cuán buena sea la aproximación de $\underline{\underline{C}}^{-1}$ con respecto a $\underline{\underline{A}}^{-1}$.

El tipo más común de factorización incompleta se basa en seleccionar un subconjunto S de las posiciones de los elementos de la matriz y durante el proceso de factorización considerar a cualquier posición fuera de éste igual a cero. Usualmente se toma como S al conjunto de todas las posiciones (i, j) para las que $A_{ij} \neq 0$. Este tipo de factorización es conocido como factorización incompleta LU de nivel cero, ILU(0).

El proceso de factorización incompleta puede ser descrito formalmente como sigue:

Para cada k, si $i, j > k$:

$$S_{ij} = \begin{cases} A_{ij} - A_{ij}A_{ij}^{-1}A_{kj} & \text{Si} \quad (i,j) \in S \\ \\ A_{ij} & \text{Si} \quad (i,j) \notin S. \end{cases} \tag{11.39}$$

Una variante de la idea básica de las factorizaciones incompletas lo constituye la factorización incompleta modificada que consiste en que si el producto

$$A_{ij} - A_{ij}A_{ij}^{-1}A_{kj} \neq 0 \tag{11.40}$$

y el llenado no esta permitido en la posición (i, j), en lugar de simplemente descartarlo, esta cantidad se le substrae al elemento de la diagonal A_{ij}. Matemáticamente esto corresponde a forzar a la matriz precondicionadora a tener la misma suma por filas que la matriz original. Esta variante resulta de interés puesto que se ha probado que para ciertos casos la aplicación de la factorización incompleta modificada combinada con pequeñas perturbaciones hace que el número de condicionamiento espectral del sistema precondicionado sea de un orden inferior.

> Ventaja: Puede mejorar el condicionamiento y la convergencia significativamente.
>
> Desventaja: El proceso de factorización es costoso y difícil de paralelizar en general.

Precondicionador de Inversa Aproximada El uso del precondicionador de inversas aproximada se ha convertido en una buena alternativa para los precondicionadores implícitos debido a su naturaleza paralelizable. Aquí se construye una matriz inversa aproximada usando el producto escalar de Frobenius.

Sea $\mathcal{S} \subset C_n$, el subespacio de las matrices $\underline{\underline{C}}$ donde se busca una inversa aproximada explícita con un patrón de dispersión desconocido. La formulación del problema esta dada como: Encontrar $\underline{\underline{C}}_0 \in \mathcal{S}$ tal que

$$\underline{\underline{C}}_0 = \arg mín_{\underline{\underline{C}} \in \mathcal{S}} \left\| \underline{\underline{AC}} - \underline{\underline{I}} \right\|. \tag{11.41}$$

Además, esta matriz inicial $\underline{\underline{C}}_0$ puede ser una inversa aproximada de $\underline{\underline{A}}$ en un sentido estricto, es decir,

$$\left\| \underline{\underline{AC}}_0 - \underline{\underline{I}} \right\| = \varepsilon < 1. \tag{11.42}$$

Existen dos razones para esto, primero, la ecuación (11.42) permite asegurar que $\underline{\underline{C}}_0$ no es singular (lema de Banach), y segundo, esta será la base para construir un algoritmo explícito para mejorar $\underline{\underline{C}}_0$ y resolver la ecuación $\underline{\underline{Au}} = \underline{b}$.

La construcción de $\underline{\underline{C}}_0$ se realiza en paralelo, independizando el cálculo de cada columna. El algoritmo permite comenzar desde cualquier entrada de la columna k, se acepta comúnmente el uso de la diagonal como primera aproximación. Sea r_k el residuo correspondiente a la columna k-ésima, es decir

$$r_k = \underline{\underline{A}}\underline{C}_k - \underline{e}_k \tag{11.43}$$

y sea $\mathcal{I}_k$ el conjunto de índices de las entradas no nulas en r_k, es decir, $\mathcal{I}_k = \{i = \{1, 2, ..., n\} \mid r_{ik} \neq 0\}$. Si $\mathcal{L}_k = \{l = \{1, 2, ..., n\} \mid C_{lk} \neq 0\}$, entonces la nueva entrada se busca en el conjunto $\mathcal{J}_k = \{j \in \mathcal{L}_k^c \mid A_{ij} \neq 0, \forall i \in \mathcal{I}_k\}$. En realidad las únicas entradas consideradas en $\underline{C}_k$ son aquellas que afectan las entradas no nulas de r_k. En lo que sigue, asumimos que $\mathcal{L}_k \cup \{j\} = \left\{i_1^k, i_2^k, ..., i_{p_k}^k\right\}$ es no vacío, siendo p_k el número actual de entradas no nulas de $\underline{C}_k$ y que $i_{p_k}^k = j$, para todo $j \in \mathcal{J}_k$. Para cada j, calculamos

$$\left\|\underline{\underline{A}}\underline{C}_k - \underline{e}_k\right\|_2^2 = 1 - \sum_{l=1}^{p_k} \frac{\left[\det\left(\underline{\underline{D}}_l^k\right)\right]^2}{\det\left(\underline{\underline{G}}_{l-2}^k\right)\det\left(\underline{\underline{G}}_l^k\right)} \tag{11.44}$$

donde, para todo k, $\det\left(\underline{\underline{G}}_0^k\right) = 1$ y $\underline{\underline{G}}_l^k$ es la matriz de Gram de las columnas $i_1^k, i_2^k, ..., i_{p_k}^k$ de la matriz $\underline{\underline{A}}$ con respecto al producto escalar Euclideano; $\underline{\underline{D}}_l^k$ es la matriz que resulta de remplazar la última fila de la matriz $\underline{\underline{G}}_l^k$ por $a_{ki_1^k}, a_{ki_2^k}, , ..., a_{ki_l^k}$, con $1 \leq l \leq p_k$. Se selecciona el índice j_k que minimiza el valor de $\left\|\underline{\underline{A}}\underline{C}_k - \underline{e}_k\right\|_2$.

Esta estrategia define el nuevo índice seleccionado j_k atendiendo solamente al conjunto $\mathcal{L}_k$, lo que nos lleva a un nuevo óptimo donde se actualizan todas las entradas correspondientes a los índices de $\mathcal{L}_k$. Esto mejora el criterio de (11.41) donde el nuevo índice se selecciona manteniendo las entradas correspondientes a los índices de $\mathcal{L}_k$. Así $\underline{\underline{C}}_k$ se busca en el conjunto

$$\mathcal{S}_k = \left\{\underline{C}_k \in \mathbb{R}^n \mid C_{ik} = 0, \forall i \in \mathcal{L}_k \cup \{j_k\}\right\},$$

$$\underline{m}_k = \sum_{l=1}^{p_k} \frac{\det\left(\underline{\underline{D}}_l^k\right)}{\det\left(\underline{\underline{G}}_{l-2}^k\right)\det\left(\underline{\underline{G}}_l^k\right)} \tilde{\underline{m}}_l \tag{11.45}$$

donde $\tilde{\underline{C}}_l$ es el vector con entradas no nulas i_h^k $(1 \leq h \leq l)$. Cada una de ellas se obtiene evaluado el determinante correspondiente que resulta de remplazar la última fila del $\det\left(\underline{\underline{G}}_l^k\right)$ por e_h^t, con $1 \leq l \leq p_k$.

Evidentemente, los cálculos de $\left\|\underline{\underline{A}}\underline{C}_k - \underline{e}_k\right\|_2^2$ y de $\underline{C}_k$ pueden actualizarse añadiendo la contribución de la última entrada $j \in \mathcal{J}_k$ a la suma previa de 1 a $p_k - 1$. En la práctica, $\det\left(\underline{\underline{G}}_l^k\right)$ se calcula usando la descomposición de Cholesky puesto que $\underline{\underline{G}}_l^k$ es una matriz simétrica y definida positiva. Esto sólo involucra la factorización de la última fila y columna si aprovechamos la descomposición de $\underline{\underline{G}}_{l-1}^k$. Por otra parte, $\det\left(\underline{\underline{D}}_l^k\right) / \det\left(\underline{\underline{G}}_l^k\right)$ es el valor de la última incógnita del sistema $\underline{\underline{G}}_l^k \underline{d}_l = \left(a_{ki_1^k}, a_{ki_2^k}, ..., a_{ki_l^k}\right)^T$ necesitándose solamente una sustitución por descenso. Finalmente, para obtener $\underline{\tilde{C}}_l$ debe resolverse el sistema $\underline{\underline{G}}_l^k \underline{v}_l = \underline{e}_l$, con $\underline{\tilde{C}}_{i_1^k l} = v_{hl}, (1 \leq h \leq l)$.

Ventaja: Puede mejorar el condicionamiento y la convergencia significativamente y es fácilmente paralelizable.

Desventaja: El proceso construcción es algo laborioso.

11.3.2 Precondicionador a Priori

Los precondicionadores a priori son más particulares y dependen para su construcción del conocimiento del proceso de discretización de la ecuación diferencial parcial, dicho de otro modo dependen más del proceso de construcción de la matriz $\underline{\underline{A}}$ que de la estructura de la misma.

Estos precondicionadores usualmente requieren de más trabajo que los del tipo algebraico discutidos anteriormente, sin embargo permiten el desarrollo de métodos de solución especializados más rápidos que los primeros.

Veremos algunos de los métodos más usados relacionados con la solución de ecuaciones diferenciales parciales en general y luego nos concentraremos en el caso de los métodos relacionados directamente con descomposición de dominio.

En estos casos el precondicionador $\underline{\underline{C}}$ no necesariamente toma la forma simple de una matriz, sino que debe ser visto como un operador en general. De aquí que $\underline{\underline{C}}$ podría representar al operador correspondiente a una versión simplificada del problema con valores en la frontera que deseamos resolver.

Por ejemplo se podría emplear en calidad de precondicionador al operador original del problema con coeficientes variables tomado con coeficientes constantes. En el caso del operador de Laplace se podría tomar como precondicionador a su discretización en diferencias finitas centrales.

Por lo general estos métodos alcanzan una mayor eficiencia y una convergencia óptima, es decir, para ese problema en particular el precondicionador encontrado será el mejor precondicionador existente, llegando a disminuir el número de iteraciones hasta en un orden de magnitud. Donde muchos de ellos pueden ser paralelizados de forma efectiva.

El Uso de la Parte Simétrica como Precondicionador La aplicación del método del Gradiente Conjugado en sistemas no auto-adjuntos requiere del almacenamiento de los vectores previamente calculados. Si se usa como precondicionador la parte simétrica

$$(\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{A}}^T)/2 \tag{11.46}$$

de la matriz de coeficientes $\underline{\underline{A}}$, entonces no se requiere de éste almacenamiento extra en algunos casos, resolver el sistema de la parte simétrica de la matriz $\underline{\underline{A}}$ puede resultar más complicado que resolver el sistema completo.

El Uso de Métodos Directos Rápidos como Precondicionadores En muchas aplicaciones la matriz de coeficientes $\underline{\underline{A}}$ es simétrica y positivo definida, debido a que proviene de un operador diferencial auto-adjunto y acotado. Esto implica que se cumple la siguiente relación para cualquier matriz $\underline{\underline{B}}$ obtenida de una ecuación diferencial similar

$$c_1 \leq \frac{\underline{x}^T \underline{\underline{A}} \underline{x}}{\underline{x}^T \underline{\underline{B}} \underline{x}} \leq c_2 \quad \forall \underline{x} \tag{11.47}$$

donde c_1 y c_2 no dependen del tamaño de la matriz. La importancia de esta propiedad es que del uso de $\underline{\underline{B}}$ como precondicionador resulta un método iterativo cuyo número de iteraciones no depende del tamaño de la matriz.

La elección más común para construir el precondicionador $\underline{\underline{B}}$ es a partir de la ecuación diferencial parcial separable. El sistema resultante con la matriz $\underline{\underline{B}}$ puede ser resuelto usando uno de los métodos directos de solución rápida, como pueden ser por ejemplo los basados en la transformada rápida de Fourier.

Como una ilustración simple del presente caso obtenemos que cualquier operador elíptico puede ser precondicionado con el operador de Poisson.

Construcción de Precondicionadores para Problemas Elípticos Empleando DDM Existen una amplia gama de este tipo de precondicionadores, pero son específicos al método de descomposición de dominio usado, para el método de subestructuración, los más importantes se derivan de la matriz de rigidez y por el método de proyecciones, en este trabajo se detallan en la implementación del método DVS.

Definición 16 *Un método iterativo para la solución de un sistema lineal es llamado óptimo, si la razón de convergencia a la solución exacta es independiente del tamaño del sistema lineal.*

Definición 17 *Un método para la solución del sistema lineal generado por métodos de descomposición de dominio es llamado escalable, si la razón de convergencia no se deteriora cuando el número de subdominios crece.*

La gran ventaja de los métodos de descomposición de dominio precondicionados entre los que destacan a FETI-DP y BDDC y por ende DVS es que estos métodos pueden ser óptimos y escalables según el tipo de precondicionador a priori que se use en ellos.

11.4 Estructura Óptima de las Matrices en su Implementación Computacional

Una parte fundamental de la implementación computacional de los métodos numéricos de resolución de sistemas algebraicos, es utilizar una forma óptima de almacenar, recuperar y operar las matrices, tal que, facilite los cálculos que involucra la resolución de grandes sistemas de ecuaciones lineales cuya implementación puede ser secuencial o paralela (véase [14]).

El sistema lineal puede ser expresado en la forma matricial $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{f}$, donde la matriz $\underline{\underline{A}}$ —que puede ser real o virtual— es de tamaño $n \times n$ con banda b, pero el número total de datos almacenados en ella es a los más $n * b$ números de doble precisión, en el caso de ser simétrica la matriz, el número de datos almacenados es menor a $(n * b)/2$. Además si el problema que la originó es de coeficientes constantes el número de valores almacenados se reduce drásticamente a sólo el tamaño de la banda b.

En el caso de que el método para la resolución del sistema lineal a usar sea del tipo Factorización LU o Cholesky, la estructura de la matriz cambia, ampliándose el tamaño de la banda de b a $2 * b + 1$ en la factorización, en el

caso de usar métodos iterativos tipo CGM o GMRES la matriz se mantiene intacta con una banda b.

Para la resolución del sistema lineal virtual asociada a los métodos de descomposición de dominio, la operación básica que se realiza de manera reiterada, es la multiplicación de una matriz por un vector $\underline{v} = \underline{\underline{C}}\underline{u}$, la cual es necesario realizar de la forma más eficiente posible.

Un factor determinante en la implementación computacional, para que esta resulte eficiente, es la forma de almacenar, recuperar y realizar las operaciones que involucren matrices y vectores, de tal forma que la multiplicación se realice en la menor cantidad de operaciones y que los valores necesarios para realizar dichas operaciones queden en la medida de lo posible contiguos para ser almacenados en el Cache[53] del procesador.

Dado que la multiplicación de una matriz $\underline{\underline{C}}$ por un vector $\underline{u}$, dejando el resultado en $\underline{v}$ se realiza mediante el algoritmo

```
for (i=0; i<ren; i++)
{
    s = 0.0;
    for (j=0; j < col; j++)
    {
        s += C[i][j]*u[j];
    }
    v[i] = s;
}
```

Para lograr una eficiente implementación del algoritmo anterior, es necesario que el gran volumen de datos desplazados de la memoria al Cache y viceversa sea mínimo. Por ello, los datos se deben agrupar para que la operación más usada —en este caso multiplicación matriz por vector— se

[53] Nótese que la velocidad de acceso a la memoria principal (RAM) es relativamente lenta con respecto al Cache, este generalmente está dividido en sub-Caches L1 —de menor tamaño y el más rápido—, L2 y hasta L3 —el más lento y de mayor tamaño— los cuales son de tamaño muy reducido con respecto a la RAM.

Por ello, cada vez que las unidades funcionales de la Unidad de Aritmética y Lógica requieren un conjunto de datos para implementar una determinada operación en los registros, solicitan los datos primeramente a los Caches, estos consumen diversa cantidad de ciclos de reloj para entregar el dato si lo tienen —pero siempre el tiempo es menor que solicitarle el dato a la memoria principal—; en caso de no tenerlo, se solicitan a la RAM para ser cargados a los caches y poder implementar la operación solicitada.

realice con la menor solicitud de datos a la memoria principal, si los datos usados —renglón de la matriz— se ponen contiguos minimizará los accesos a la memoria principal, pues es más probable que estos estarán contiguos en el Cache al momento de realizar la multiplicación.

Por ejemplo, en el caso de matrices bandadas de tamaño de banda b, el algoritmo anterior se simplifica a

```
for (i=0; i<ren; i++)
{
      s= 0.0;
      for (k=0; k < ban; k++)
      {
            if ((Ind[k] + i) >= 0 && (Ind[k]+i) < ren)
                  s += Dat[i][k]*u[Ind[k]+i];
      }
      v[i]=s;
}
```

Si, la solicitud de memoria para Dat[i] se hace de tal forma que los datos del renglón esten continuos —son b números de punto flotante—, esto minimizará los accesos a la memoria principal en cada una de las operaciones involucradas en el producto, como se explica en las siguientes secciones.

11.4.1 Matrices Bandadas

En el caso de las matrices bandadas de banda b —sin pérdida de generalidad y para propósitos de ejemplificación se supone pentadiagonal— típicamente tiene la siguiente forma

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & c_1 & & & & \\ d_2 & a_2 & b_2 & & & c_2 & & & \\ & d_3 & a_3 & b_3 & & & c_3 & & \\ & & d_4 & a_4 & b_4 & & & c_4 & \\ e_5 & & & d_5 & a_5 & b_5 & & & c_5 \\ & e_6 & & & d_6 & a_6 & b_6 & & \\ & & e_7 & & & d_7 & a_7 & b_7 & \\ & & & e_8 & & & d_8 & a_8 & b_8 \\ & & & & e_9 & & & d_9 & a_9 \end{bmatrix} \tag{11.48}$$

la cual puede ser almacenada usando el algoritmo (véase [14]) Compressed Diagonal Storage (CDS), optimizado para ser usado en C++, para su almacenamiento y posterior recuperación. Para este ejemplo en particular, se hará uso de un vector de índices

$$\underline{Ind} = [-5, -1, 0, +1, +5] \tag{11.49}$$

y los datos serán almacenados usando la estructura

$$\underline{\underline{Dat}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & a_1 & b_1 & c_1 \\ 0 & d_2 & a_2 & b_2 & c_2 \\ 0 & d_3 & a_3 & b_3 & c_3 \\ 0 & d_4 & a_4 & b_4 & c_4 \\ e_5 & d_5 & a_5 & b_5 & c_5 \\ e_6 & d_6 & a_6 & b_6 & 0 \\ e_7 & d_7 & a_7 & b_7 & 0 \\ e_8 & d_8 & a_8 & b_8 & 0 \\ e_9 & d_9 & a_9 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{11.50}$$

de tal forma que la matriz $\underline{\underline{A}}$ puede ser reconstruida de forma eficiente. Para obtener el valor $A_{i,j}$, calculo $ind = j - i$, si el valor ind esta en la lista de índices $\underline{Ind}$ —supóngase en la columna k—, entonces $A_{i,j} = Dat_{ik}$, en otro caso $A_{i,j} = 0$.

Casos Particulares de la Matriz Bandada $\underline{\underline{A}}$ Básicamente dos casos particulares surgen en el tratamiento de ecuaciones diferenciales parciales: El primer caso es cuando el operador diferencial parcial es simétrico y el otro, en el que los coeficientes del operador sean constantes.

Para el primer caso, al ser la matriz simétrica, sólo es necesario almacenar la parte con índices mayores o iguales a cero, de tal forma que se buscara el índice que satisfaga $ind = |j - i|$, reduciendo el tamaño de la banda a $b/2$ en la matriz $\underline{\underline{A}}$.

Para el segundo caso, al tener coeficientes constantes el operador diferencial, los valores de los renglones dentro de cada columna de la matriz son iguales, y sólo es necesario almacenarlos una sola vez, reduciendo drásticamente el tamaño de la matriz de datos.

Implementación de Matrices Bandadas Orientada a Objetos en C++ Una forma de implementar la matriz bandada $\underline{\underline{A}}$ de banda b en C++ es mediante:

```
// Creacion
double **Dat;
Dat = new double*[ren];
for (i = 0; i < ren; i++) Dat[i] = new double[b];
int *Ind;
Ind = new int[b];
// Inicializacion
for (i = 0; i < ren; i++)
      for (j = 0; j < b; j++) Dat[i][j] = 0.0;
for (i = 0; i < b; i++) Ind[i] = 0;
```

11.4.2 Matrices Dispersas

Las matrices dispersas de a lo más b valores distintos por renglón —sin pérdida de generalidad y para propósitos de ejemplificación se supone $b = 3$— que surgen en métodos de descomposición de dominio para almacenar algunas matrices, típicamente tienen la siguiente forma

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} a_1 & & & & & b_1 & & & c_1 \\ & a_2 & & & b_2 & & & c_2 & \\ & & & & a_3 & & & b_3 & c_3 \\ a_4 & & & b_4 & & & & & \\ & & a_5 & & & b_5 & & & c_5 \\ a_6 & b_6 & c_6 & & & & & & \\ & & & & & & a_7 & b_7 & c_7 \\ & & & a_8 & & & b_8 & c_8 & \\ & & & & & & a_9 & b_9 & \end{bmatrix} \tag{11.51}$$

la cual puede ser almacenada usando el algoritmo (véase [14]) Jagged Diagonal Storage (JDC), optimizado para ser usado en C++. Para este ejemplo

en particular, se hará uso de una matriz de índices

$$\underline{\underline{Ind}} = \begin{bmatrix} 1 & 6 & 9 \\ 2 & 5 & 8 \\ 5 & 8 & 9 \\ 1 & 4 & 0 \\ 3 & 6 & 9 \\ 1 & 2 & 3 \\ 7 & 8 & 9 \\ 4 & 7 & 8 \\ 7 & 8 & 0 \end{bmatrix} \tag{11.52}$$

y los datos serán almacenados usando la estructura

$$\underline{\underline{Dat}} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \\ a_4 & b_4 & 0 \\ a_5 & b_5 & c_5 \\ a_6 & b_6 & c_6 \\ a_7 & b_7 & c_7 \\ a_8 & b_8 & c_8 \\ a_9 & b_9 & 0 \end{bmatrix} \tag{11.53}$$

de tal forma que la matriz $\underline{\underline{A}}$ puede ser reconstruida de forma eficiente. Para obtener el obtener el valor $A_{i,j}$, busco el valor j en la lista de índices $\underline{Ind}$ dentro del renglón i, si lo encuentro en la posición k, entonces $A_{i,j} = Dat_{ik}$, en otro caso $A_{i,j} = 0$.

Casos Particulares de la Matriz Dispersa $\underline{\underline{A}}$ Si la matriz $\underline{\underline{A}}$, que al ser almacenada, se observa que existen a lo más r diferentes renglones con valores distintos de los n con que cuenta la matriz y si $r << n$, entonces es posible sólo guardar los r renglones distintos y llevar un arreglo que contenga la referencia al renglón almacenado.

Implementación de Matrices Dispersas Orientada a Objetos en C++ Una forma de implementar la matriz bandada $\underline{\underline{A}}$ de banda b en C++ es mediante:

```
// Creación
double **Dat;
Dat = new double*[ren];
for (i = 0; i < ren; i++) Dat[i] = new double[b];
int **Ind;
Ind = new int*[ren];
for (i = 0; i < ren; i++) Ind[i] = new int[b];
// Inicialización
for (i = 0; i < ren; i++)
     for (j = 0; j < b; j++) Dat[i][j] = 0.0, Ind[i][j] = -1;
```

11.4.3 Multiplicación Matriz-Vector

Los métodos de descomposición de dominio requieren por un lado la resolución de al menos un sistema lineal y por el otro lado requieren realizar la operación de multiplicación de matriz por vector, i.e. $\underline{\underline{C}}\underline{u}$ de la forma más eficiente posible, por ello los datos se almacenan de tal forma que la multiplicación se realice en la menor cantidad de operaciones.

Dado que la multiplicación de una matriz $\underline{\underline{C}}$ por un vector $\underline{u}$, dejando el resultado en $\underline{v}$ se realiza mediante el algoritmo:

```
for (i=0; i<ren; i++)
{
     s = 0.0;
     for (j=0; j < col; j++)
     {
          s += C[i][j]*u[j];
     }
     v[i] = s;
}
```

En el caso de matrices bandadas, se simplifica a:

```
for (i=0; i<ren; i++)
{
     s= 0.0;
     for (k=0; k < ban; k++)
     {
```

```
            if ((Ind[k] + i) >= 0 && (Ind[k]+i) < ren)
                s += Dat[i][k]*u[Ind[k]+i];
        }
        v[i]=s;
}
```

De forma similar, en el caso de matrices dispersas, se simplifica a:

```
for (i=0; i<ren; i++)
{
        s = 0.0, k = 0
        while (Ind[i][k] != -1)
        {
            s += Dat[i][k]*u[Ind[i][k]];
            k++;
            if (k >= b) break;
        }
        v[i] = s;
}
```

De esta forma, al tomar en cuenta la operación de multiplicación de una matriz por un vector, donde el renglón de la matriz involucrado en la multiplicación queda generalmente en una región contigua del Cache, se hace óptima la operación de multiplicación de matriz por vector.

12 Apéndice C: Marco Teórico del Espacio de Vectores Derivados DVS

En el marco de los métodos de descomposición de dominio sin traslape se distinguen dos categorías (véase [22], [37], [38], [48], [49] y [53]): Los esquemas duales —como es el caso del método Finite Element Tearing and Interconnect (FETI) y sus variantes— los cuales usan multiplicadores de Lagrange; y los esquemas primales —como es el caso del método Balancing Domain Decomposition (BDD) y sus variantes— que tratan el problema sin el recurso de los multiplicadores de Lagrange.

En este trabajo se ha derivado un sistema unificador (véase [64] y [67]), el esquema del espacio de vectores derivados (DVS), este es un esquema primal similar a la formulación BDD. Donde una significativa diferencia entre nuestro esquema y BDD es que en la formulación DVS el problema es transformado en otro definido en el espacio de vectores derivados, el cual es un espacio producto conteniendo funciones discontinuas, es en este espacio en el cual todo el trabajo del método es realizado.

Por otro lado, en la formulación BDD, el espacio original de funciones continuas nunca es abandonado completamente y constantemente se regresa a los grados de libertad asociados con el espacio de funciones continuas pertenecientes a las subestructuras, el cual en su formulación juega el rol del espacio producto.

Aunque el marco DVS es un esquema primal, las formulaciones duales pueden ser acomodadas en él; esta característica permite unificar en este terreno a ambos esquemas, duales y primales; en particular a BDDC y FETI-DP. También el espacio DVS constituye un espacio de Hilbert con respecto al adecuado producto interior —el producto interior Euclidiano— y mediante la utilización de la formulación DVS, se saca provecho de la estructura del espacio de Hilbert obteniendo de esta manera una gran simplicidad para el algoritmo definido en el espacio de funciones definidas por tramos y es usado para establecer una clara correspondencia entre los problemas a nivel continuo y aquellos obtenidos después de la discretización.

12.1 Formulaciones Dirichlet-Dirichlet y Neumann-Neumann a Nivel Continuo

Para poner la metodología desarrollada en una adecuada perspectiva, se inicia por revisar algunos conceptos elementales sobre las formulaciones mencionadas en el título de esta sección. También se toman algunas herramientas presentadas del trabajo "Theory of differential equations in discontinuous picewise-defined functions" (véase [58]).

El problema que se considera aquí[54] es: "Encontrar $u \in H^2(\Omega)$, tal que

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = f_\Omega, \text{ en } \Omega \\ u = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} \text{„} \tag{12.1}$$

así, bajo las adecuadas condiciones (véase [7]), la existencia y la unicidad de la solución de este problema esta garantizada. Este problema puede también formularse en espacio de funciones definidas por tramos (véase [58]).

Sin pérdida de generalidad, sea el dominio Ω descompuesto en dos subdominios Ω_1 y Ω_2, como se muestra en la figura:

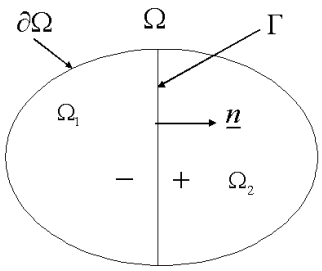


Figura 30: Partición del dominio Ω en dos subdominios Ω_1 y Ω_2.

Supóngase que el operador diferencial $\mathcal{L}$ es de segundo orden y se considera el espacio $H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2)$ de funciones discontinuas definidas por tramos (véase [58]). Una función en tal espacio es definida independientemente en cada uno de los dos subdominios y sus restricciones a Ω_1 y Ω_2 pertenecen a $H^2(\Omega_1)$ y $H^2(\Omega_2)$ respectivamente. Generalmente la discontinuidad a través de la interfase Γ tiene un salto no cero de la función misma

[54] La notación que se usa es la estándar para los espacios de Sobolev (véase [2]).

y de sus derivadas normales. La notación para el 'salto' y el 'promedio' a través de Γ esta dado por

$$[\![u]\!] \equiv u_+ - u_- \qquad \text{y} \qquad \dot{\widehat{u}} = \frac{1}{2}\left(u_+ + u_-\right), \text{ sobre } \Gamma \tag{12.2}$$

respectivamente.

Nótese que, el espacio $H^2(\Omega)$ es un subespacio de $H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2)$. En efecto, sea $u \in H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2)$, entonces $u \in H^2(\Omega)$ si y sólo si

$$[\![u]\!] = \left[\!\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]\!\right] = 0, \text{ sobre } \Gamma. \tag{12.3}$$

Por lo tanto, una formulación del problema dado en la Ec.(12.1) es: "Buscar a $u \in H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2)$, tal que

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = f_\Omega, \text{ en } \Omega \\ [\![u]\!] = 0 \text{ y } \left[\!\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]\!\right] = 0, \text{ sobre } \Gamma \quad \text{". } \\ u = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} \tag{12.4}$$

Se debe observar que, cuando el valor de la solución u es conocida sobre Γ, entonces u puede ser obtenida en cualquier lugar en Ω por la resolución de dos problemas Dirichlet con valor en la frontera, uno en cada uno de los subdominios Ω_1 y Ω_2 —el título de Dirichlet-Dirichlet para el procedimiento es por el hecho de resolver este tipo de problemas—.

De manera similar, cuando los valores de la derivada normal $\frac{\partial u}{\partial n}$ son conocidos sobre Γ, entonces u puede ser obtenida en cualquier lugar en Ω por la resolución de dos problemas Neumann con valores en la frontera, uno para cada uno de los subdominios Ω_1 y Ω_2 —el título de Neumann-Neumann para el procedimiento es por el hecho de resolver este tipo de problemas—.

Estas observaciones son las bases de los dos enfoques de los métodos de descomposición de dominio que se consideran en esta sección: Los métodos Dirichlet-Dirichlet y Neumann-Neumann.

12.2 El Problema no Precondicionado Dirichlet-Dirichlet

Para el problema no precondicionado Dirichlet-Dirichlet, se toma u_Γ como la restricción a Γ de la solución u de la Ec.(12.4), entonces u es la única solución de los siguientes dos problemas Dirichlet

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = f_\Omega, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1, 2 \\ u = u_\Gamma, \text{ sobre } \Gamma \\ u = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} . \tag{12.5}$$

El enfoque Dirichlet-Dirichlet al método de descomposición de dominio consiste en buscar para la función u_Γ, esencialmente una elección de sucesiones de funciones de prueba: $u_\Gamma^0, u_\Gamma^1, ..., u_\Gamma^n, ...$, hasta que se encuentre la función buscada.

A este respecto, una primera pregunta es: ¿cómo se reconoce cuando la función de prueba es satisfactoria?. Se sabe que cuando u_Γ es la restricción a Γ de la solución del problema, la solución que es obtenida por la resolución de los dos problemas con valores en la frontera de la Ec.(12.5) satisfacen las condiciones de salto indicadas en la Ec.(12.4). Ahora, en el caso del enfoque Dirichlet-Dirichlet, el salto de la función se nulifica necesariamente, ya que

$$[\![u]\!] = u_+ - u_- = u_\Gamma - u_\Gamma = 0 \tag{12.6}$$

sin embargo, por lo general la condición

$$\left[\!\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]\!\right] = 0 \tag{12.7}$$

no es satisfecha. La selección de la función de prueba u_Γ será satisfactoria, si y sólo si, la Ec.(12.7) se satisface.

Si se escribe la solución del problema u de la Ec.(12.4) como

$$u = u_p + v \tag{12.8}$$

donde u_p satisface

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_p = f_\Omega, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1, 2 \\ u_p = 0, \text{ sobre } \Gamma \\ u_p = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} \tag{12.9}$$

y por lo tanto v satisface

$$\begin{cases} \mathcal{L}v = 0, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1, 2 \\ v = u_\Gamma, \text{ sobre } \Gamma \\ v = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} \tag{12.10}$$

entonces, la elección de la función de prueba u_Γ será satisfactoria, si y sólo si

$$\left[\!\left[\frac{\partial v}{\partial n}\right]\!\right] = -\left[\!\left[\frac{\partial u_p}{\partial n}\right]\!\right] \tag{12.11}$$

desde este punto de vista, la función $v \in H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2)$. Así, se busca una función tal que

$$\begin{cases} \mathcal{L}v = 0, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1,2 \\ [\![v]\!] = 0, [\![\frac{\partial v}{\partial n}]\!] = -\left[\!\left[\frac{\partial u_p}{\partial n}\right]\!\right], \text{ sobre } \Gamma \\ v = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} . \tag{12.12}$$

Esta condición puede expresarse teniendo en mente el operador de Steklov-Poincaré[55] τ, el cual para cualquier función u definida sobre Γ, se genera otra función definida sobre Γ, a saber (véase [4])

$$\tau(u_\Gamma) \equiv \left[\!\left[\frac{\partial v}{\partial n}\right]\!\right], \text{ sobre } \Gamma \tag{12.13}$$

donde v satisface la Ec.(12.10). Entonces la Ec.(12.12) es equivalente a

$$\tau(u_\Gamma) \equiv -\left[\!\left[\frac{\partial u_p}{\partial n}\right]\!\right], \text{ sobre } \Gamma. \tag{12.14}$$

12.3 El Problema no Precondicionado Neumann-Neumann

Para el caso del problema no precondicionado Neumann-Neumann, se toma a u como la solución de la Ec.(12.4) y sea $q_\Gamma \equiv \frac{\partial u}{\partial n}$ sobre Γ, entonces u es la única solución de los siguientes dos problemas Neumann

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = f_\Omega, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1,2 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = q_\Gamma \text{ sobre } \Gamma \\ u = 0 \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} . \tag{12.15}$$

El título del enfoque Neumann-Neumann proviene de el hecho que la Ec.(12.15) implica resolver un problema Neumann en el subdominio Ω_1 y otro problema Neumann en Ω_2. Este enfoque consiste en buscar una función q_Γ —independientemente del valor de q_Γ—, ya que, cualquier solución de la Ec.(12.15) satisface

$$\left[\!\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]\!\right] = \left(\frac{\partial u}{\partial n}\right)_+ - \left(\frac{\partial u}{\partial n}\right)_- = q_\Gamma - q_\Gamma = 0 \tag{12.16}$$

[55] El operador de Steklov-Poincaré generalmente se define como la ecuación para la traza de la solución exacta u sobre Γ (véase [44]).

sin embargo, por lo general, la condición

$$[\![u]\!] = 0 \tag{12.17}$$

no es satisfecha. La selección de la función de prueba u_Γ será satisfactoria, si y sólo si, la Ec.(12.17) se satisface.

Si se toma nuevamente una solución $u = u_p + v$ como en la Ec.(12.8), donde u_p ahora satisface

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_p = f_\Omega, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1, 2 \\ \frac{\partial u_p}{\partial n} = 0, \text{ sobre } \Gamma \\ u_p = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} \tag{12.18}$$

y por lo tanto v satisface

$$\begin{cases} \mathcal{L}v = 0, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1, 2 \\ \frac{\partial v}{\partial n} = q_\Gamma, \text{ sobre } \Gamma \\ v = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} \tag{12.19}$$

entonces, la función $v \in H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2)$ es caracterizada por

$$\begin{cases} \mathcal{L}v = 0, \text{ en } \Omega_\alpha, \alpha = 1, 2 \\ [\![v]\!] = [\![u_p]\!], \left[\!\left[\frac{\partial v}{\partial n}\right]\!\right] = 0, \text{ sobre } \Gamma \\ v = 0, \text{ sobre } \partial\Omega \end{cases} . \tag{12.20}$$

Para la formulación Neumann-Neumann existe una contraparte —el operador μ— al operador de Steklov-Poincaré τ, dada cualquier función q_Γ, definida sobre Γ, se define $\mu(q_\Gamma)$, esta será una función definida sobre Γ dada por

$$\mu(q_\Gamma) \equiv [\![v]\!], \text{ sobre } \Gamma \tag{12.21}$$

aquí, v satisface la Ec.(12.19). Entonces, la Ec.(12.20) es equivalente a

$$\mu(q_\Gamma) \equiv -[\![u_p]\!], \text{ sobre } \Gamma. \tag{12.22}$$

12.4 Discretización del Dominio para los Métodos Duales y Primales

Dos de los enfoques más comúnmente usados (véase [22], [35], [36], [37], [38], [48], [49], [50], [52] y [53]) en los métodos de descomposición de dominio son

FETI-DP y BDDC. Ambos, inicializan con la ecuación diferencial parcial y de ella, los grados de libertad son asociados con las funciones de base usadas. BDDC es un método directo, i.e. es un método que no hace uso de Multiplicadores de Lagrange, mientras que FETI-DP trabaja en el espacio producto mediante el uso de los Multiplicadores de Lagrange.

En los métodos FETI-DP y BDDC, el dominio Ω en el cual se define el problema, es subdividido en E subdominios 'sin traslape' Ω_α, $\alpha = 1, 2, ..., E$, es decir

$$\Omega_\alpha \cap \Omega_\beta = \varnothing \quad \forall \alpha \neq \beta \quad \text{y} \quad \overline{\Omega} = \bigcup_{\alpha=1}^{E} \overline{\Omega}_\alpha \tag{12.23}$$

y al conjunto

$$\Gamma = \bigcup_{\alpha=1}^{E} \Gamma_\alpha, \quad \text{si} \quad \Gamma_\alpha = \partial\Omega_\alpha \backslash \partial\Omega \tag{12.24}$$

se le llama la frontera interior del dominio Ω. La notación $\partial\Omega$ y $\partial\Omega_\alpha$, $\alpha = 1, ..., E$ es tomada de la frontera del dominio Ω y la frontera del subdominio Ω_i respectivamente. Claramente

$$\partial\Omega \subset \bigcup_{\alpha=1}^{E} \partial\Omega_\alpha \quad \text{y} \quad \Omega = \left(\bigcup_{\alpha=1}^{E} \Omega_\alpha \right) \bigcup \Gamma. \tag{12.25}$$

Se denota por H al máximo diámetro $H_\alpha = Diam(\Omega_\alpha)$ de cada Ω_α que satisface $Diam(\Omega_\alpha) \leq H$ para cada $\alpha = 1, 2, ..., E$, además, cada subdominio Ω_α es descompuesto en un mallado fino $\mathcal{T}_h$ de K subdominios mediante una triangulación Ω_j de modo que este sea conforme, se denota por h al máximo diámetro $h_j = Diam(\Omega_j)$ de cada Ω_α que satisface $Diam(\Omega_j) \leq h$ para cada $j = 1, 2, ..., K$ de cada $\alpha = 1, 2, ..., E$.

Para iniciar la discusión, se considera un ejemplo particular, de un conjunto de veinticinco nodos de una descomposición del dominio Ω 'sin traslape', se asume que la numeración de los nodos es de izquierda a derecha y de arriba hacía abajo, véase figura (31)

En este caso el conjunto de nodos originales, se particiona usando una malla gruesa de cuatro subdominios Ω_α $\alpha = 1, 2, 3, 4$, véase figura (32).

Entonces se tiene un conjunto de nodos y un conjunto de subdominios, los cuales se enumeran usando un conjunto de índices

$$\hat{N} \equiv \{1, 2, \ldots, 25\} \qquad \text{y} \qquad E \equiv \{1, 2, 3, 4\} \tag{12.26}$$

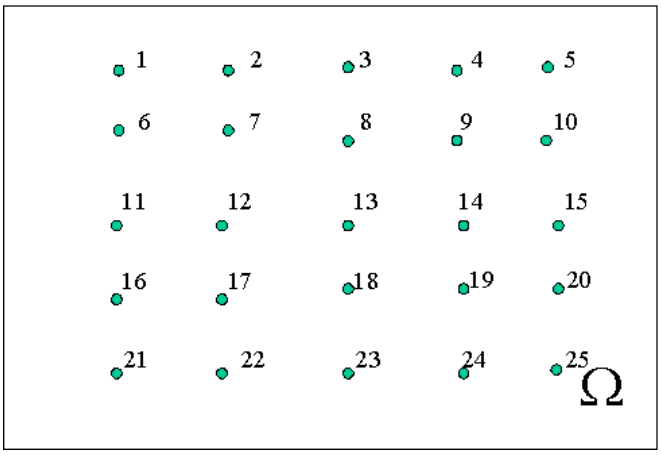


Figura 31: Conjunto de nodos originales

respectivamente. Entonces, el conjunto de 'nodos originales' correspondiente a tal descomposición de dominio 'sin traslape', en realidad tiene un 'traslape', esto es por que la familia de los cuatros subconjuntos

$$\begin{aligned} \hat{N}^1 &= \{1,2,3,6,7,8,11,12,13\} \\ \hat{N}^2 &= \{3,4,5,8,9,10,13,14,15\} \\ \hat{N}^3 &= \{11,12,13,16,17,18,21,22,23\} \\ \hat{N}^4 &= \{13,14,15,18,19,20,23,24,25\} \end{aligned} \tag{12.27}$$

no son disjuntos. En efecto, por ejemplo

$$\hat{N}^1 \cap \hat{N}^2 = \{3,8,13\}\,. \tag{12.28}$$

Con la idea de obtener una 'verdadera descomposición de dominio sin traslape', se reemplaza el conjunto de 'nodos originales' por otro conjunto, el conjunto de los 'nodos derivados' en los cuales se satisfaga la condición de que sea una verdadera descomposición de dominio sin traslapes.

12.5 Una Verdadera Descomposición de Dominio sin Traslapes

A la luz de lo visto en la sección anterior, es ventajoso trabajar con una descomposición de dominio sin traslape alguno del conjunto de nodos y, para

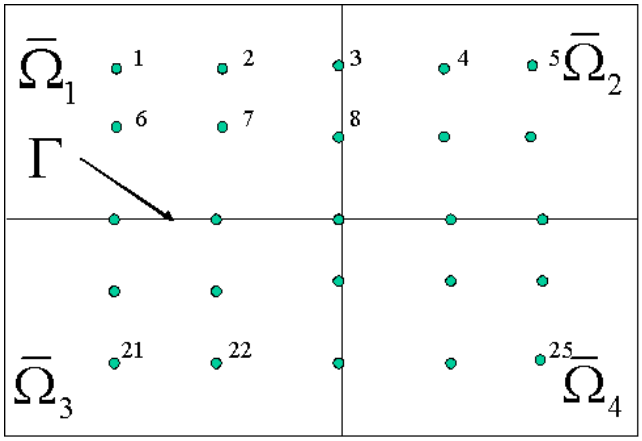


Figura 32: Nodos en una descomposición gruesa de cuatro subdominios

este fin, se reemplaza el conjunto $\hat{N}$ de 'nodos originales' por otro conjunto de 'nodos derivados', los cuales son denotados por X^α, donde cada nodo en la frontera interior Γ se parte en un número que llamaremos la multiplicidad del nodo y es definida como el número de subdominios que comparten al nodo. Cada nodo derivado es definido por un par de números: (p, α) , donde p corresponde a un nodo perteneciente a $\overline{\Omega}_p$, i.e. un 'nodo derivado' es el par de números (p, α) tal que $p \in \hat{N}^\alpha$, véase figura (33).

Se denota con X el conjunto total de nodos derivados; nótese que el total de nodos derivados para el ejemplo de la sección anterior es de 36, mientras el número de nodos originales es de 25.

Entonces, se define X^α como el conjunto de nodos derivados que puede ser escrito como

$$X^\alpha = \left\{ (p, \alpha) \mid \alpha \in \hat{E} \quad \text{y} \quad p \in \hat{N}^\alpha \right\}. \tag{12.29}$$

Para el ejemplo referido, tomando α sucesivamente como $1, 2, 3$ y 4, se tiene la familia de cuatro subconjuntos,

$$\left\{ X^1, X^2, X^3, X^4 \right\} \tag{12.30}$$

la cual es una descomposición de dominio sin traslape véase figura (34), donde el conjunto X satisface

$$X = \bigcup_{\alpha=1}^{4} X^\alpha \quad \text{y} \quad X^\alpha \cap X^\beta = \varnothing \quad \text{cuando} \quad \alpha \neq \beta. \tag{12.31}$$

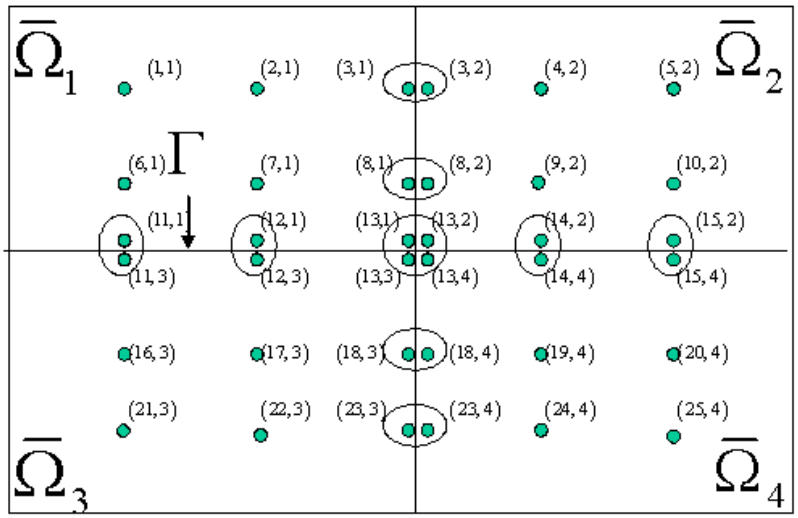


Figura 33: Mitosis de los nodos en la frontera interior

Por supuesto, la cardinalidad de los subdominio —el número de nodos de cada uno de los subdominios es 36/4— es igual a 9.

Dada la discusión anterior, y para el desarrollo de una teoría general, sea el conjunto de nodos-índice y de subdominio-índice original definidos como

$$\hat{N} = \{1, ..., n\} \quad \text{y} \quad \hat{E} = \{1, ..., E\} \tag{12.32}$$

respectivamente, donde n es el número total de nodos que se obtienen de la versión discretizada de la ecuación diferencial que se quiere resolver —generalmente, los nodos de frontera no son incluidos—.

Se define al conjunto de 'nodos derivados' por el par de números (p, α), tal que $p \in \hat{N}^\alpha$. Entonces, el conjunto de todos los nodos derivados, satisface

$$X^\alpha \equiv \left\{ (p, \alpha) \mid \alpha \in \hat{E} \quad \text{y} \quad p \in \hat{N}^\alpha \right\} \tag{12.33}$$

y para evitar repeticiones, ya que en lo sucesivo se hará uso extensivo de los nodos derivados, la notación (p, α) se reserva para el par tal que $(p, \alpha) \in X$.

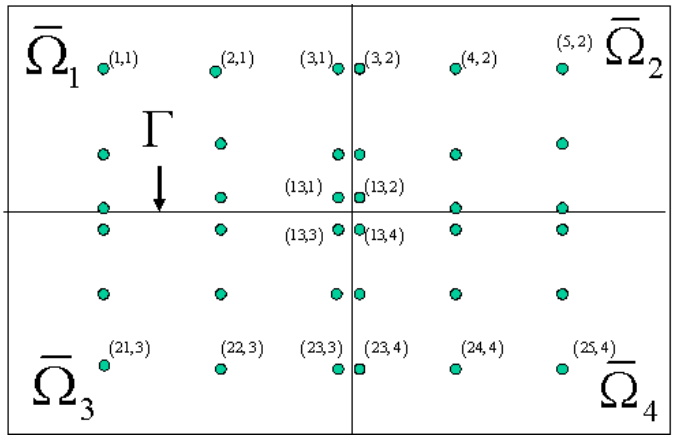


Figura 34: Conjunto de nodos derivados

Nótese que la cardinalidad de X es siempre mayor que la cardinalidad de $\hat{N}$, excepto en el caso trivial cuando $E = 1$. En lo que sigue los nodos derivados serán referidos, simplemente como nodos.

Por otro lado, dado cualquier nodo original, $p \in \hat{N}$, se define el conjunto $Z(p) \subset X$, como el conjunto de los nodos derivados de p que puede ser escrito como (p, α), para algún $1 \leq \alpha \leq E$. Además, dado cualquier nodo $(p, \alpha) \in X$, su multiplicidad es definida por la cardinalidad del conjunto $Z(p) \subset X$ y es denotada como $m(p)$.

Los nodos derivados son clasificados como 'nodos internos' o de 'frontera interna', dependiendo si su multiplicidad es uno o más grande que uno. Los subconjuntos $I \subset \overline{\Omega}$ y $\Gamma \subset \overline{\Omega}$ son el conjunto de nodos internos y de frontera interna respectivamente, que satisfacen la siguiente relación

$$X = I \cup \Gamma \quad \text{y} \quad I \cap \Gamma = \varnothing \tag{12.34}$$

nótese que para el ejemplo mostrado en la figura 3, la cardinalidad de Γ es 20.

Para cada $\alpha = 1, 2, \ldots, E$, se define

$$\Gamma_\alpha = \Gamma \cap X^\alpha \tag{12.35}$$

entonces, la familia de subconjuntos $\{\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots, \Gamma_E\}$ es una partición de Γ,

en el sentido de que

$$\Gamma \equiv \bigcup_{\alpha=1}^{E} \Gamma_\alpha \quad \text{mientras} \quad \Gamma_\alpha \cap \Gamma_\beta = \varnothing \quad \text{cuando} \quad \alpha \neq \beta. \tag{12.36}$$

En este desarrollo, Γ es descompuesto dentro de dos subconjuntos

$$\pi \subset \Gamma \subset X \quad \text{y} \quad \Delta \subset \Gamma \subset X \tag{12.37}$$

los nodos pertenecientes al primer conjunto π son llamados 'primales', mientras que si estos pertenecen al segundo conjunto Δ son llamados 'duales', donde

$$\Delta \equiv \Gamma - \pi$$

entonces

$$\Gamma = \pi \cup \Delta \quad \text{mientras} \quad \pi \cap \Delta = \varnothing. \tag{12.38}$$

Además, se define

$$\Pi \equiv I \cup \pi$$

en este caso, cada una de las familias de los subconjuntos $\{I, \pi, \Delta\}$ y $\{\Pi, \Delta\}$ son descomposiciones sin traslape de $\overline{\Omega}$, es decir,

$$X = I \cup \pi \cup \Delta \quad \text{mientras que} \quad I \cap \pi = \pi \cap \Delta = \Delta \cap I = \varnothing \tag{12.39}$$

y

$$X = \Pi \cup \Delta \quad \text{mientras que} \quad \Pi \cap \Delta = \varnothing. \tag{12.40}$$

Nótese que todos los conjuntos considerados hasta ahora son dimensionalmente finitos. Por lo tanto, cualquier función con valores en los reales[56] definida en cualquier conjunto define unívocamente un vector dimensionalmente finito.

Para el planteamiento de los métodos Dual-Primal, los nodos de la interfase son clasificados dentro de nodos Primales y Duales. Entonces se define:

- $\hat{N}_I \subset \hat{N}$ como el conjunto de nodos interiores.
- $\hat{N}_\Gamma \subset \hat{N}$ como el conjunto de nodos de la interfase.
- $\hat{N}_\pi \subset \hat{N}$ como el conjunto de nodos primales.

[56] Cuando se consideren sistemas de ecuaciones, como en los problemas de elasticidad, tales funciones son vectoriales.

- $\hat{N}_\Delta \subset \hat{N}$ como el conjunto de nodos duales.

El conjunto $\hat{N}_\pi \subset \hat{N}_\Gamma$ es escogido arbitrariamente y entonces $\hat{N}_\Delta$ es definido como $\hat{N}_\Delta \equiv \hat{N}_\Gamma - \hat{N}_\pi$. Cada una de las siguientes dos familias de nodos son disjuntas:

$$\left\{\hat{N}_I, \hat{N}_\Gamma\right\} \quad \text{y} \quad \left\{\hat{N}_I, \hat{N}_\pi, \hat{N}_\Delta\right\}.$$

Además, estos conjuntos de nodos satisfacen las siguientes relaciones:

$$\hat{N} = \hat{N}_I \cup \hat{N}_\Gamma = \hat{N}_I \cup \hat{N}_\pi \cup \hat{N}_\Delta \quad \text{y} \quad \hat{N}_\Gamma = \hat{N}_\pi \cup \hat{N}_\Delta \tag{12.41}$$

adicionalmente se define los siguientes conjuntos de X :

- $I \equiv \left\{(p,\alpha) \mid p \in \hat{N}_I\right\}.$
- $\Gamma \equiv \left\{(p,\alpha) \mid p \in \hat{N}_\Gamma\right\}.$
- $\pi \equiv \left\{(p,\alpha) \mid p \in \hat{N}_\pi\right\}.$
- $\Delta \equiv \left\{(p,\alpha) \mid p \in \hat{N}_\Delta\right\}.$

En vista de todo lo anterior, la familia de subconjuntos $\left\{X^1, ..., X^E\right\}$ es una descomposición de dominio del conjunto de nodos derivados en donde no se tiene ningún traslape (véase [64] y [67]), es decir

$$X = \bigcup_{\alpha=1}^{E} X^\alpha \quad \text{y} \quad X^\alpha \cap X^\beta = \varnothing \quad \text{cuando} \quad \alpha \neq \beta. \tag{12.42}$$

12.6 El Problema Original

El esquema DVS puede ser aplicado al sistema matricial que es obtenido después de la discretización, este procedimiento es independiente del método de discretización usado —puede ser el método de Elemento Finito, Diferencias Finitas o cualquier otro—. El procedimiento requiere de algunas suposiciones que deben de ser satisfechas, las cuales se explican a continuación (véase [64] y [67]). Tales suposiciones estan dadas en términos del sistema matricial y

dos conceptos adicionales: los nodos originales y una familia de subconjuntos de tales nodos, los cuales estan asociados con la partición del dominio.

Para ilustrar como estos conceptos son introducidos, se considera la formulación variacional de la versión discretizada general de un problema de valores en la frontera, el cual consiste en encontrar $\hat{u} \in V$, tal que

$$a\left(\hat{u}, v\right) = \left(g, v\right), \quad \forall v \in V \tag{12.43}$$

aquí, V es un espacio lineal de dimensión finita de funciones real valuadas[57] definidas en cierto dominio espacial Ω, mientras $g \in V$ es una función dada.

Sea $\hat{N} = \{1, ..., n\}$ el conjunto de índices, el cual es el número de nodos usados en la discretización, y sea $\{\varphi_1, ..., \varphi_n\} \subset V$ una base de V, tal que para cada $i \in \hat{N}, \varphi_i = 1$ en el nodo i y cero en cualquier otro nodo. Entonces, ya que $\hat{u} \in V$, entonces

$$\hat{u} = \sum \widehat{u}_i \varphi_i \tag{12.44}$$

aquí, $\widehat{u}_i$ es el valor de $\hat{u}$ en el nodo i. Sea $\underline{\widehat{u}}$ y $\underline{\widehat{f}}$ vectores[58] $\underline{\widehat{u}} \equiv \left(\widehat{u}_1, ..., \widehat{u}_n\right)$ y $\underline{\widehat{f}} \equiv \left(\widehat{f}_1, ..., \widehat{f}_n\right)$, donde

$$\widehat{f}_i \equiv \left(g, \varphi_i\right), \quad i \in \hat{N}. \tag{12.45}$$

La formulación variacional de la Ec.(12.43) es equivalente a

$$\underline{\underline{\widehat{A}}}\,\underline{\widehat{u}} = \underline{\widehat{f}} \tag{12.46}$$

donde la matriz $\underline{\underline{\widehat{A}}}$, será referida como la 'matriz original' y esta es definida mediante

$$\underline{\underline{\widehat{A}}} \equiv \left(\widehat{A}_{ij}\right) \tag{12.47}$$

con

$$\widehat{A}_{ij} \equiv \tilde{a}\left(\varphi_i, \varphi_j\right) \qquad i, j = 1, ..., n \tag{12.48}$$

después de que el problema ha sido discretizado —$\tilde{a}\left(\varphi_i, \varphi_j\right)$ son las funciones base usadas en la discretización—, donde se supone que el dominio Ω

[57] La teoría aquí presentada, con ligeras modificaciones, trabaja también en el caso de que las funciones de V sean vectoriales.

[58] Hablando estrictamente estos deberían ser vectores columna, sin embargo, cuando se incorporan en el texto, se escriben como vectores renglón para ahorrar espacio de escritura.

ha sido particionado mediante un conjunto de subdominios no traslapados $\{\Omega_1, ..., \Omega_E\}$; más precisamente, para cada $\alpha = 1, ..., E$; Ω_α es abierto y

$$\Omega_\alpha \cap \Omega_\beta = \varnothing \quad \forall \alpha \neq \beta \quad \text{y} \quad \Omega = \bigcup_{\alpha=1}^{E} \overline{\Omega}_\alpha \tag{12.49}$$

donde $\overline{\Omega}_\alpha$ es la clausura estandar del conjunto Ω_α.

El conjunto de subdominios-índices es denotado por $\hat{E} = \{1, ..., E\}$. Por otro lado $\hat{N}^\alpha$, $\alpha = 1, ..., E$, denota a los nodos originales que corresponden a los nodos pertenecientes a $\overline{\Omega}_\alpha$. Como es usual, los nodos son clasificados en 'interiores' y 'nodos de interfase'; un nodo es interior, si pertenece sólo a la clausura de una subpartición del dominio, y es un nodo de la interfase cuando pertenece a más de uno.

Las funciones real valuadas definidas en $\hat{N} = \{1, ..., n\}$ constituyen un espacio lineal el cual será denotado por $\widehat{W}$ y referido como el 'espacio vectorial original'. Los vectores $\underline{\widehat{u}} \in \widehat{W}$ se escriben como $\underline{\widehat{u}} = \left(\widehat{u}_1, ..., \widehat{u}_n\right)$, donde $\widehat{u}_i$ para $i = 1, ..., n$, son las componentes de un vector $\underline{\widehat{u}}$.

Entonces, el 'problema original' consiste en "Dada $\underline{\widehat{f}} \in \widehat{W}$, encontrar a $\underline{\widehat{u}} \in \widehat{W}$ tal que la Ec.(12.46) se satisfaga".

A lo largo de todo el desarrollo de esta metodología, la matriz original $\underline{\underline{\widehat{A}}}$ se asume como no singular —esto define una biyección de $\widehat{W}$ sobre sí misma—, para definir las condiciones sobre las cuales el esquema DVS es aplicable para matrices indefinidas y/o no simétricas (véase [61]), se asume lo siguiente, (axioma): "Sean los índices $i \in \hat{N}^\alpha$ y $j \in \hat{N}^\beta$ de nodos interiores originales, entonces

$$\widehat{A}_{ij} = 0 \quad \text{siempre y cuando} \quad \alpha \neq \beta". \tag{12.50}$$

Así, para cada $\alpha = 1, ..., E$ se define el subespacio de vectores $\widehat{W}^\alpha \subset \widehat{W}$, el cual es constituido por los vectores que tienen la propiedad que para cada $i \notin \hat{N}^\alpha$, esta i-ésima componente se nulifica. Usando esta notación se define el espacio producto W por

$$W \equiv \prod_{\alpha=1}^{E} \widehat{W}^\alpha = \widehat{W}^1 \times ... \times \widehat{W}^E. \tag{12.51}$$

12.7 El Espacio de Vectores Derivado

Usando la notación de la sección anterior, en la cual se definió el 'problema original' dado por la Ec.(12.46), este es un problema formulado en el espacio vectorial original $\widehat{W}$, en el desarrollo que sigue se transforma en un problema que será reformulado en el espacio W, el cual es un espacio definido sobre las funciones discontinuas.

Para ello, se entiende por un 'vector derivado' una función real-valuada definida en el conjunto X de nodos derivados[59]. El conjunto de vectores derivados constituyen un espacio lineal, el cual será referido como el 'espacio de vectores derivados'. De manera análoga para cada subconjunto local de nodos derivados en el subespacio X^α existe un 'subespacio local de vectores derivados' W^α, el cual es definido con la condición de que los vectores de W^α se nulifiquen en cada nodo derivado que no pertenezca a X^α. Una manera formal de iniciar esta definición es

$$\underline{u} \in W^\alpha \subset W, \quad \text{si y sólo si} \quad \underline{u}\,(p,\beta) = 0 \quad \text{cuando} \quad \beta \neq \alpha. \tag{12.52}$$

Una importante diferencia entre los subespacios W^α y $\widehat{W}^\alpha$ puede se notada al observar que $W^\alpha \subset W$, mientras que $\widehat{W}^\alpha \subsetneq W$. En particular

$$W \equiv \prod_{\alpha=1}^{E} \widehat{W}^\alpha = W^1 \oplus ... \oplus W^E \tag{12.53}$$

en palabras: El espacio W es el producto de subespacios de la familia

$$\left\{\widehat{W}^1, ..., \widehat{W}^E\right\} \tag{12.54}$$

pero al mismo tiempo es la suma directa de la familia

$$\left\{W^1, ..., W^E\right\}. \tag{12.55}$$

En vista de la Ec.(12.53) es sencillo establecer una biyección —de hecho, un isomorfismo— entre el espacio de vectores derivados y el espacio producto. Por lo tanto, en lo que sigue, se identifica a ambos como uno solo.

[59] Para el tratamiento de sistemas de ecuaciones, tales como las involucradas en el tratamiento de la elasticidad lineal, tales funciones serán vectoriales.

Para cada par de vectores[60] $\underline{u} \in W$ y $\underline{w} \in W$, el 'producto interior Euclidiano' es definido por

$$\underline{u} \cdot \underline{w} = \sum_{(p,\alpha)\in X} \underline{u}\,(p,\alpha)\,\underline{w}\,(p,\alpha)\,. \tag{12.56}$$

Una importante propiedad es que el espacio de vectores derivados W, constituye un espacio de Hilbert dimensionalmente finito con respecto al producto interior Euclidiano. Nótese que el producto interior Euclidiano es independiente de la forma de la matriz original $\widehat{\underline{\underline{A}}}$; en particular esta puede ser simétrica, no simétrica o indefinida.

La inyección natural $R : \widehat{W} \to W$, de $\widehat{W}$ sobre W, es definida por la condición de que, para todo $\hat{\underline{u}} \in \widehat{W}$, se obtenga

$$\left(R\hat{\underline{u}}\right)(p,\alpha) = \hat{\underline{u}}\,(p)\,, \quad \forall\,(p,\alpha) \in X. \tag{12.57}$$

La 'multiplicidad', $m\,(p)$ de cualquier nodo original $p \in \hat{N}$ es caracterizada por la propiedad (véase [62] y [61]),

$$\sum_{\alpha=1}^{E} \left(R\hat{\underline{u}}\right)(p,\alpha) = m(p)\hat{\underline{u}}\,(p)\,. \tag{12.58}$$

Además, el espacio W puede ser descompuesto en dos subespacios ortogonales complementarios $W_{11} \subset W$ y $W_{12} \subset W$, tal que

$$W = W_{11} + W_{12} \quad \text{y} \quad \{0\} = W_{11} \cap W_{12} \tag{12.59}$$

donde, el subespacio $W_{12} \subset W$ es la inyección natural de $\widehat{W}$ dentro de W; i.e.

$$W_{12} \equiv R\widehat{W} \subset W \tag{12.60}$$

y $W_{11} \subset W$ es el complemento ortogonal con respecto al producto interior Euclidiano. Además se define la inversa de $R : \widehat{W} \to W$, cuando esta es

[60] En el caso vectorial —que surge en aplicaciones como en la teoría de elasticidad— cuando se trabajan sistemas de ecuaciones, i.e. cuando $\underline{u}\,(p,\alpha)$ es un vector, la Ec(12.56) es reemplazada por

$$\underline{u} \cdot \underline{w} = \sum_{(p,\alpha)\in X} \underline{u}\,(p,\alpha) \odot \underline{w}\,(p,\alpha)$$

donde, $\underline{u}\,(p,\alpha) \odot \underline{w}\,(p,\alpha)$ se identifica con el producto interior de vectores involucrados.

restringida a $W_{12} \subset W$ la cual siempre existe y es denotada por $R^{-1} : W_{12} \rightarrow \widehat{W}$.

Es costumbre el uso de la notación de suma directa

$$W = W_{12} \oplus W_{12} \tag{12.61}$$

cuando el par de condiciones de la Ec.(12.59) son satisfechas.

El 'subespacio de vectores continuos' es definido como el subespacio

$$W_{12} \subset W \tag{12.62}$$

mientras que el 'subespacio de vectores de promedio cero' es definido como el subespacio

$$W_{11} \subset W. \tag{12.63}$$

Dos matrices $\underline{\underline{a}} : W \rightarrow W$ y $\underline{\underline{j}} : W \rightarrow W$ son ahora introducidas; ellas son los operadores proyección con respecto al producto interior Euclidiano sobre W_{12} y W_{11} respectivamente. El primero será referido como el 'operador promedio' y el segundo como el 'operador salto' respectivamente.

En vista de la Ec.(12.59), cada vector $\underline{u} \in W$, puede ser escrito de forma única como la suma de un vector de promedio cero más un vector continuo (vector de salto cero), es decir

$$\underline{u} = \underline{u}_{11} + \underline{u}_{12} \text{ con } \begin{cases} \underline{u}_{11} \equiv \underline{\underline{j}}\underline{u} \in W_{11} \\ \underline{u}_{12} \equiv \underline{\underline{a}}\underline{u} \in W_{12} \end{cases} \tag{12.64}$$

los vectores $\underline{\underline{j}}\underline{u}$ y $\underline{\underline{a}}\underline{u}$ son llamados el 'salto' y el 'promedio' de $\underline{u}$ respectivamente.

Los subespacios lineales que se definen a continuación son elegidos conforme a la nomenclatura estandar. En particular W_I, W_Γ, W_π y W_Δ son definidos para imponer restricciones sobre sus miembros. Los vectores de:

- W_I se nulifica en cada nodo derivado que no es un nodo interno.
- W_Γ se nulifica en cada nodo derivado que no es un nodo de interfase.
- W_π se nulifica en cada nodo derivado que no es un nodo primal.
- W_Δ se nulifica en cada nodo derivado que no es un nodo dual.

Además

- $W_r \equiv W_I + \underline{\underline{a}} W_\pi + W_\Delta$.
- $W_\Pi \equiv W_I + \underline{\underline{a}} W_\pi$.

Nótese que, para cada una de las siguientes familias de subespacios

$$\{W_I, W_\Gamma\}, \{W_I, W_\pi, W_\Delta\}, \{W_\Pi, W_\Delta\} \tag{12.65}$$

son linealmente independientes. Y también satisfacen

$$W = W_I + W_\Gamma = W_I + W_\pi + W_\Delta \text{ y } W_r = W_\Pi + W_\Delta \tag{12.66}$$

la anterior definición de W_r es apropiada cuando se considera las formulaciones Dual-Primal. En el presente trabajo sólo se considera la restricción impuesta por el promedio en los nodos primales —otro ejemplo de restricción es tomar el salto sobre los nodos primales—. Otros tipos de restricciones requieren cambiar el término $\underline{\underline{a}} W_\pi$ por $\underline{\underline{a}}^r W_\pi$ donde $\underline{\underline{a}}^r$ es la proyección sobre el espacio restringido, el tipo de restricciones que pueden ser definidas estan en función del problema particular a resolver (véase [33]).

12.8 Discretización Partiendo de la Construcción de la Matriz $\underline{\underline{A}}^t$

Una característica notable del enfoque DVS es que este inicia con la matriz que es obtenida después de que el problema se ha discretizado —a partir de una discretización por algún método como por ejemplo Elemento Finito o Diferencias Finitas— y para su aplicación no se requiere ninguna información acerca de la ecuación diferencial parcial de la cual se originó. Por supuesto, tal matriz no es definida en el espacio de vectores derivados y la teoría provee una fórmula para derivar la matriz en el espacio de vectores derivados (véase [64]); aquí se da un procedimiento para definir la matriz $\underline{\underline{A}}^t : W \to W$, la cual es usada para formular el problema en el espacio de vectores derivados.

Sea la matriz $\widehat{\underline{\underline{A}}} : \widehat{W} \to \widehat{W}$ dada por la Ec.(12.46) la cual puede ser escrita como

$$\widehat{\underline{\underline{A}}} \equiv \left(\widehat{A}_{pq} \right) \tag{12.67}$$

para cada par (p,q) tal que $p \in \hat{N}$ y $q \in \hat{N}$, y se define

$$\delta_{pq}^{\alpha} \equiv \begin{cases} 1, & \text{si } p,q \in \hat{N}^{\alpha} \\ 0, & \text{si } p \notin \hat{N}^{\alpha} \text{ ó } q \notin \hat{N}^{\alpha} \end{cases}, \alpha = 1, ..., E \tag{12.68}$$

junto con

$$m(p,q) \equiv \sum_{\alpha=1}^{N} \delta_{pq}^{\alpha} \tag{12.69}$$

y

$$s(p,q) \equiv \begin{cases} 1, & \text{cuando } m(p,q) = 0 \\ m(p,q), & \text{cuando } m(p,q) \neq 0 \end{cases} \tag{12.70}$$

la función $m(p,q)$ es llamada la 'multiplicidad' del par (p,q). Esto puede verse de la suposición básica dada por la Ec.(12.50), teniendo que

$$m(p,q) = 0 \Rightarrow \widehat{A}_{pq} = 0. \tag{12.71}$$

Definiendo ahora

$$\underline{\underline{\widehat{A}}}^{\alpha} \equiv \left(\widehat{A}_{pq}^{\alpha}\right) \text{ con } \widehat{A}_{pq}^{\alpha} = \frac{\widehat{A}_{pq}\delta_{pq}^{\alpha}}{s(p,q)} \tag{12.72}$$

se observa la identidad

$$\underline{\underline{\widehat{A}}} = \sum_{\gamma=1}^{E} \underline{\underline{\widehat{A}}}^{\gamma} \tag{12.73}$$

ya que se ha usado una verdadera descomposición del dominio sin traslape. Además, para cada $\gamma = 1, ..., E$, la matriz $\underline{\underline{A}}^{\gamma} : W \to W$ es definida por

$$\underline{\underline{A}}^{\gamma} \equiv \left(A_{(p,\alpha)(q,\beta)}^{\gamma}\right) \tag{12.74}$$

con

$$A_{(p,\alpha)(q,\beta)}^{\gamma} \equiv \delta_{\alpha\gamma}^{\gamma} \widehat{A}_{pq}^{\gamma} \delta_{\beta\gamma} \tag{12.75}$$

entonces la matriz $\underline{\underline{A}}^{t} : W \to W$ (t de total, no de transpuesta) es dada por

$$\underline{\underline{A}}^{t} \equiv \sum_{\gamma=1}^{E} \underline{\underline{A}}^{\gamma} \tag{12.76}$$

una propiedad fundamental de $\underline{\underline{A}}^t$ es que

$$\left(\underline{\underline{A}}^t\right)^{-1} = \sum_{\gamma=1}^{E} \left(\underline{\underline{A}}^\gamma\right)^{-1} \tag{12.77}$$

ya que las matrices $\underline{\underline{A}}^\gamma$, con $\gamma = 1, 2, ..., E$ son independientes entre si —al ser una verdadera descomposición del dominio, ver sección (12.5)—. Además, otra propiedad es que

$$R^{-1}\underline{\underline{aA}}R = R^{-1}\underline{\underline{aAa}}R = \widehat{A}. \tag{12.78}$$

Nótese que la matriz $\underline{\underline{A}}^t$ puede ser expresada en más de una manera. Algunas opciones útiles que se usan son (véase [61] y [62]):

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}^t &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}^t_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}^t_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}^t_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}^t_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}^t_{II} & \underline{\underline{A}}^t_{I\pi} & \underline{\underline{A}}^t_{I\Delta} \\ \underline{\underline{A}}^t_{\pi I} & \underline{\underline{A}}^t_{\pi\pi} & \underline{\underline{A}}^t_{\pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}^t_{\Delta I} & \underline{\underline{A}}^t_{\Delta\pi} & \underline{\underline{A}}^t_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}^1 & \underline{\underline{0}} & \cdots & \underline{\underline{0}} \\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{A}}^2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \underline{\underline{0}} \\ \underline{\underline{0}} & \cdots & \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{A}}^N \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{12.79}$$

A la luz de la Ec.(12.77), implica que, si el complemento de Schur local

$$\underline{\underline{S}}^\alpha = \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Gamma\Gamma} - \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Gamma I}\left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^\alpha_{I\Gamma} \tag{12.80}$$

de cada $\underline{\underline{A}}^\alpha$ existe y es invertible —véase sección (5.3) para la definición y su implementación del complemento de Schur en general—, entonces, la matriz 'total del complemento de Schur', $\underline{\underline{S}}^t : W_r \to W_r$, satisface

$$\underline{\underline{S}}^t = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{S}}^\alpha \tag{12.81}$$

y

$$\left(\underline{\underline{S}}^t\right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{E} \left(\underline{\underline{S}}^\alpha\right)^{-1} \tag{12.82}$$

al ser una verdadera descomposición del dominio —ver sección (12.5)— y porque se satisfacen las Ecs.(12.76 y 12.77).

Por otro lado, si se define $\underline{u}' \equiv R\widehat{\underline{u}}$, usando la Ec.(12.78) entonces el problema original Ec.(12.46), se transforma en uno equivalente a

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}^t\underline{u}' = \underline{\overline{f}} \quad \text{con} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u}' = 0 \tag{12.83}$$

una vez que $\underline{u}' \in W$ es obtenida, se puede recuperar $\widehat{\underline{u}} \in \widehat{W}$ usando

$$\widehat{\underline{u}} = R^{-1}\underline{u}' \tag{12.84}$$

esta última es correcta cuando $\underline{u}'$ es evaluada exactamente, pero en las aplicaciones numéricas, $\underline{u}'$ sólo es una evaluación aproximada, por ello puede generar "inestabilidades", en el sentido de que una aproximación a $\underline{u}'$, independientemente de cuan pequeño sea el error, puede no ser continua en cuyo caso $\widehat{\underline{u}} = R^{-1}\underline{u}'$ no esta definida. Por lo tanto es conveniente reemplazar la Ec.(12.84) por la siguiente versión estable

$$\widehat{\underline{u}} = R^{-1}\left(\underline{\underline{a}}\underline{u}'\right). \tag{12.85}$$

Sea $\underline{\underline{a}}^r : W \to W_r$ el operador de proyección ortogonal de W a W_r y nótese que $\underline{\underline{a}} = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{a}}^r$, entonces, se define

$$\underline{\underline{A}} \equiv \underline{\underline{a}}^r\underline{\underline{A}}^t\underline{\underline{a}}^r. \tag{12.86}$$

Por otro lado, se tiene que

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}} \equiv \underline{\underline{a}}^r\underline{\underline{A}}^t\underline{\underline{a}}^r &\equiv \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}^t_{II} & \underline{\underline{A}}^t_{I\pi}\underline{\underline{a}}^\pi & \underline{\underline{A}}^t_{I\Delta} \\ \underline{\underline{a}}^\pi\underline{\underline{A}}^t_{\pi I} & \underline{\underline{a}}^\pi\underline{\underline{A}}^t_{\pi\pi}\underline{\underline{a}}^\pi & \underline{\underline{a}}^\pi\underline{\underline{A}}^t_{\pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}^t_{\Delta I} & \underline{\underline{A}}^t_{\Delta\pi}\underline{\underline{a}}^\pi & \underline{\underline{A}}^t_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{12.87}$$

la notación usada es tal que

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} : W_\Pi \to W_\Pi, & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} : W_\Delta \to W_\Pi \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} : W_\Pi \to W_\Delta, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} : W_\Delta \to W_\Delta \end{cases} \tag{12.88}$$

donde

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\underline{u}=\left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_{\Pi}\right)_{\Pi}, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\underline{u}=\left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_{\Pi}\right)_{\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}\underline{u}=\left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_{\Delta}\right)_{\Pi}, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta}\underline{u}=\left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_{\Delta}\right)_{\Delta} \end{cases} \tag{12.89}$$

por otro lado, se tiene la inmersión natural en W_r, i.e.

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} &\equiv \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} &\equiv \begin{pmatrix} 0 & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} &\equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} &\equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{12.90}$$

Así, el 'Complemento de Schur Dual-Primal' esta definido por

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\underline{\underline{A}}^{-1}_{\Pi\Pi}\underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \tag{12.91}$$

que define al sistema virtual

$$\underline{\underline{S}}\underline{u}_{\Gamma} = \underline{f}_{\Gamma}. \tag{12.92}$$

Nótese que

$$\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{II} & \underline{\underline{A}}_{I\pi} \\ \underline{\underline{A}}_{\pi I} & \underline{\underline{A}}_{\pi\pi} \end{pmatrix} \tag{12.93}$$

así, se definen a las matrices

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\pi} \text{ y } \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{12.94}$$

las cuales son locales a cada subdominio. Usando esta metodología se puede construir cada componente de $\overset{\frown}{A}^{\alpha}_{pq}$tomando los nodos p y q según correspondan.

Por ejemplo para construir $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}$, en el subdominio $\overline{\Omega}_{\alpha}$ se construye

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I} = \left(\overset{\frown}{A}^{\alpha}_{pq}\right) \tag{12.95}$$

donde los nodos $p \in \pi$ y $q \in I$ y ambos pertenecen al $\alpha-$ésimo subdominio de Ω.

12.9 El Problema General con Restricciones

Recordando lo visto en la sección (12.6) en lo referente a la definición del problema original Ec.(12.46). Entonces "Un vector $\underline{\hat{u}} \in \widehat{W}$ es solución del problema original, si y sólo si, $\underline{u}' = R\underline{\hat{u}} \in W_r \subset W$ satisface la expresión

$$\underline{\underline{aA}}\,\underline{u}' = \overline{\underline{f}} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\,\underline{u}' = 0 \tag{12.96}$$

el vector

$$\overline{\underline{f}} \equiv \left(R\hat{\underline{f}}\right) \in W_{12} \subset W_r \tag{12.97}$$

puede ser escrito como

$$\overline{\underline{f}} \equiv \overline{\underline{f}}_{\Pi} + \overline{\underline{f}}_{\Delta} \tag{12.98}$$

con $\overline{\underline{f}}_{\Pi} \in W_{\Pi}$ y $\overline{\underline{f}}_{\Delta} \in W_{\Delta}$".

Este es el 'problema Dual-Primal formulado en el espacio de vectores derivados'; o simplemente, el problema Dual-Primal-DVS. Recordando, que este problema esta formulado en el espacio W_r del espacio de vectores derivados W, en el cual las restricciones ya han sido incorporadas. Por lo tanto todos los algoritmos que se desarrollan en las siguientes secciones incluyen tales restricciones; en particular, aquellos impuestos por el promedio de los nodos primales.

Un vector $\underline{u}' \in W$ satisface la Ec.(12.96) si y sólo si, satisface la Ec.(12.83). Para derivar este resultado se usa la propiedad de que cuando $\underline{u}' \in W$ y $\underline{\underline{j}}\,\underline{u}' = 0$, la siguiente relación se satisface

$$\underline{u}' \in W_r \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\left(\underline{\underline{a}}^r\,\underline{\underline{A}}^t\,\underline{\underline{a}}^r\right)\underline{u}' = \underline{\underline{aA}}^t\,\underline{u}'. \tag{12.99}$$

En las discusiones posteriores, la matriz $\underline{\underline{A}} : W_r \to W_r$ se asume invertible, en la mayoría de los casos, este hecho se puede garantizar cuando se toman un número suficientemente grande de nodos primales colocados adecuadamente.

Sea $\underline{u}' \in W_r$ una solución de la Ec.(12.96), entonces $\underline{u}' \in W_{12} \subset W$ necesariamente, ya que $\underline{\underline{j}}\,\underline{u}' = 0$ y se puede aplicar la inversa de la proyección natural obteniendo

$$\underline{\hat{u}} = \underline{\underline{R}}\,\underline{u}' \tag{12.100}$$

ya que este problema es formulado en el espacio de vectores derivados; en los algoritmos que se presentan en este trabajo (véase [64]), todas las operaciones

son realizadas en dicho espacio; en particular, para realizar los cálculos, nunca se regresa al espacio vectorial original $\widehat{W}$, excepto al final cuando se aplica la Ec.(12.100).

13 Apéndice D: Formulaciones Dirichlet-Dirichlet y Neumann-Neumann en el Marco del Espacio de Vectores Derivados DVS

A nivel continuo, los algoritmos más estudiados son el Neumann-Neumann y el Dirichlet-Dirichlet. Durante el desarrollo del esquema del espacio de vectores derivados (DVS), se muestra una clara correspondencia entre el procedimiento a nivel continuo, y el procedimiento a nivel discreto (véase [43]). Usando tal correspondencia el resultado desarrollado puede ser resumido de una forma breve y efectiva, como sigue:

1. Algoritmos no Precondicionados

   - El Algoritmo del Complemento de Schur (la formulación Primal del problema Dirichlet-Dirichlet), sección (13.1.1).
   - La formulación Dual del Problema Neumann-Neumann, sección (13.1.2).
   - La formulación Primal del Problema Neumann-Neumann, sección (13.1.3).
   - La segunda formulación Dual del Problema Neumann-Neumann, sección (13.1.4).

2. Algoritmos Precondicionados

   - La Versión DVS del Algoritmo BDDC (la formulación Dirichlet-Dirichlet precondicionada), sección (13.2.1).
   - La Versión DVS del Algoritmo FETI-DP (la formulación Dual precondicionada del problema Neumann-Neumann), sección (13.2.2).
   - La formulación Primal Precondicionada del problema Neumann-Neumann, sección (13.2.3).
   - La segunda formulación Dual Precondicionada del problema Neumann-Neumann, sección (13.2.4).

Todos estos algoritmos estan formulados en el espacio vectorial sujeto a restricciones, tal que todos estos son algoritmos con restricciones.

Para la discusión de todo el material de este capítulo se usa la notación de la sección (12.7), en especial la definición de $\underline{\underline{A}}$ en la Ec.(12.87)

$$\underline{\underline{A}} \equiv \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \tag{13.1}$$

y la dada por la Ec.(12.91) para la matriz del complemento de Schur

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\underline{\underline{A}}^{-1}_{\Pi\Pi}\underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}. \tag{13.2}$$

13.1 Algoritmos no Precondicionados

Pese a que los algoritmos no precondicionados carecen de utilidad práctica por su pobre desempeño computacional con respecto a los precondicionados, tienen una gran utilidad teórica y son el camino más sencillo para generar los algoritmos computacionales de los precondicionados, ya que estos permiten probar el marco computacional con algoritmos sencillos y luego sólo se precondicionan para tener el algoritmo final de interés. Se desarrollaron cuatro algoritmos no precondicionados (véase [64]), los cuales se detallan a continuación.

13.1.1 Algoritmo del Complemento de Schur

Sea $\underline{u} = \underline{u}' - \underline{\underline{A}}^{-1}_{\Pi\Pi}\overline{\underline{f}}_{\Pi}$, entonces la Ec.(12.96) del problema general con restricciones —véase sección (12.9)—

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}\underline{u}' = \overline{\underline{f}} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u}' = 0 \tag{13.3}$$

es equivalente a: "Dada $\underline{f} = \underline{f}_{\Delta} \in \underline{\underline{a}}W_{\Delta}$, encontrar una $\underline{u}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ tal que

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_{\Delta} = \underline{f}_{\Delta} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u}_{\Delta} = 0" \tag{13.4}$$

aquí, $\underline{u} = \underline{u}_{\Pi} + \underline{u}_{\Delta}$, $\underline{f} \equiv \overline{\underline{f}}_{\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\underline{\underline{A}}^{-1}_{\Pi\Pi}\overline{\underline{f}}_{\Pi}$ y $\underline{u}_{\Pi} \equiv \underline{\underline{A}}^{-1}_{\Pi\Pi}\underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}\underline{u}_{\Delta}$.

Además, nótese que la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}} : W_{\Delta} \to W_{\Delta}$ es invertible cuando $\underline{\underline{A}} : W_r \to W_r$ (véase [62] y [61]).

En el capítulo anterior se mostró la versión continua del problema Dirichlet-Dirichlet no precondicionado, de la cual la Ec.(13.4) es su versión discreta. Por lo tanto este algoritmo pudiera ser llamado 'el algoritmo Dirichlet-Dirichlet no precondicionado'. Sin embargo, en lo que sigue, el algoritmo

correspondiente a la Ec.(13.4) será referido como el 'algoritmo del complemento de Schur' ya que es la variante de una de las más simples formas del método de subestructuración la cual se detalla en la sección (5.3).

13.1.2 Formulación Dual del Problema Neumann-Neumann

Para iniciar este desarrollo, se toma la identidad

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}} + \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{S}} \tag{13.5}$$

esta última ecuación es clara ya que

$$\underline{\underline{a}} + \underline{\underline{j}} = \underline{\underline{I}}. \tag{13.6}$$

Usando las Ecs.(13.4 y 13.5) juntas, implican que

$$\underline{\underline{S}}\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_\Delta + \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_\Delta = \underline{f}_\Delta - \underline{\lambda}_\Delta \tag{13.7}$$

donde el vector $\underline{\lambda}_\Delta$ es definido por

$$\underline{\lambda}_\Delta = -\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_\Delta. \tag{13.8}$$

Por lo tanto, $\underline{\lambda}_\Delta \in \underline{\underline{j}} W_\Delta$. Entonces, el problema de encontrar $\underline{u}_\Delta$ ha sido transformado en uno, en que se debe encontrar 'el multiplicador de Lagrange $\underline{\lambda}_\Delta$', una vez encontrado $\underline{\lambda}_\Delta$ se puede aplicar $\underline{\underline{S}}^{-1}$ a la Ec.(13.7) para obtener

$$\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\lambda}_\Delta\right). \tag{13.9}$$

Además, en la Ec.(13.9), $\underline{u}_\Delta \in \underline{\underline{a}} W_\Delta$, tal que

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\lambda}_\Delta\right) = 0 \tag{13.10}$$

entonces, $\underline{\lambda}_\Delta \in W_\Delta$ satisface

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta = \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \quad \text{junto con} \quad \underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_\Delta = 0 \tag{13.11}$$

por lo anterior, $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_\Delta$ es la versión discreta de el promedio de la derivada normal (véase [62] y [61]).

Formulación usando Multiplicadores de Lagrange Para obtener la formulación de los Multiplicadores de Lagrange, se escribe

$$\left.\begin{array}{c} J(u) = \frac{1}{2}\underline{u}\cdot\underline{\underline{S}}\underline{u} - \underline{u}\cdot\underline{f} \rightarrow \min \\ \underline{\underline{j}}\underline{u} = 0 \end{array}\right\} \tag{13.12}$$

tomando la variación en la Ec.(13.12), se obtiene

$$\underline{\underline{S}}\underline{u} + \underline{\underline{j}}\underline{\lambda} = \underline{f} \quad \text{junto con} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u} = 0 \tag{13.13}$$

para asegurar la unicidad de $\underline{\lambda}$, se impone la condición de que $\underline{\underline{a}}\underline{u} = 0$, tal que $\underline{\underline{j}}\underline{\lambda} = \underline{\lambda}$. Entonces la Ec.(13.13) implica

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{u} + \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{u} + \underline{\lambda} = \underline{f} \tag{13.14}$$

multiplicando por $\underline{\underline{j}}$ y $\underline{\underline{a}}$ respectivamente, se obtiene

$$\underline{\lambda} = -\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{u} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{u} = \underline{f} \tag{13.15}$$

entonces la Ec.(13.8) es clara.

13.1.3 Formulación Primal del Problema Neumann-Neumann

Para iniciar este desarrollo, se toma la Ec.(13.4) del algoritmo del complemento de Schur —véase sección (13.1.1)— y multiplicando la primera igualdad por $\underline{\underline{S}}^{-1}$, y observando que $\underline{\underline{a}}\underline{f}_\Delta = \underline{f}_\Delta$ se obtiene

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{f}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\left(\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta\right) \tag{13.16}$$

de este modo, la Ec.(13.4) puede ser transformada en

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\left(\underline{u}_\Delta - \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta\right) = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u}_\Delta = 0 \tag{13.17}$$

o

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\left(\underline{u}_\Delta - \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta\right) = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u}_\Delta = 0. \tag{13.18}$$

Si se define

$$\underline{v}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta - \underline{u}_\Delta \tag{13.19}$$

entonces la Ec.(13.18) es transformada en

$$\underline{\underline{j}}\,\underline{v}_\Delta = \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\,\underline{\underline{S}}\,\underline{v}_\Delta = 0 \tag{13.20}$$

la forma iterativa[61] de este algoritmo se obtiene al multiplicarlo por $\underline{\underline{S}}^{-1}$

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\,\underline{v}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\,\underline{\underline{S}}\,\underline{v}_\Delta = 0. \tag{13.21}$$

Si la solución de la Ec.(13.4) es conocida, entonces $\underline{v}_\Delta \in W_\Delta$, definida por la Ec.(13.19), satisface la Ec.(13.21); a la inversa, si $\underline{v}_\Delta \in W_\Delta$ satisface la Ec.(13.21) entonces

$$\underline{u}_\Delta \equiv \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta - \underline{v}_\Delta \tag{13.22}$$

es solución de la Ec.(13.4).

En lo sucesivo, el algoritmo iterativo definido por la Ec.(13.21) será referido como la 'formulación libre de multiplicadores de Lagrange del problema no precondicionado Neumann-Neumann'.

13.1.4 Segunda Formulación Dual del Problema Neumann-Neumann

En este caso, se toma como inicio la Ec.(13.11) —véase sección (13.1.2)—. Nótese que la siguiente identidad se satisface

$$\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\right) = \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1} \tag{13.23}$$

entonces, se multiplica la primera igualdad en la Ec.(13.11) por $\underline{\underline{S}}$, obteniéndose

$$\begin{aligned} \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\right)\underline{\lambda}_\Delta &= \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta = \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\right)\underline{f}_\Delta \\ \text{junto con} \quad \underline{\underline{a}}\,\underline{\lambda}_\Delta &= 0 \end{aligned} \tag{13.24}$$

o

$$\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\left(\underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\right)\underline{f}_\Delta - \underline{\lambda}_\Delta\right) \quad \text{junto con} \quad \underline{\underline{a}}\,\underline{\lambda}_\Delta = 0. \tag{13.25}$$

Si se multiplica la primera de estas igualdades por $\underline{\underline{S}}^{-1}$ y se define

$$\underline{\mu}_\Delta \equiv \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta - \underline{\lambda}_\Delta \tag{13.26}$$

[61] Para que el algoritmo sea iterativo, se necesita que el dominio y contradominio sean el mismo espacio, que en este caso debe de ser W_Δ.

la Ec.(13.25) es transformada en

$$\underline{\underline{a}}\underline{\mu}_{\Delta} = \underline{\underline{aSj}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_{\Delta} = 0. \tag{13.27}$$

Nótese que esta última ecuación es equivalente a la Ec.(13.25) ya que $\underline{\underline{S}}^{-1}$ es no singular. Si la solución de la Ec.(13.11) es conocida, entonces $\underline{\mu}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ definida por la Ec.(13.26) satisface la Ec.(13.27). A la inversa, si $\underline{\mu}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ satisface la Ec.(13.27), entonces

$$\underline{\lambda}_{\Delta} \equiv \underline{\underline{Sj}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_{\Delta} - \underline{\mu}_{\Delta} \tag{13.28}$$

es solución de la Ec.(13.11).

Por otro lado, la Ec.(13.27) no define un algoritmo iterativo. Sin embargo, si se multiplica la Ec.(13.27) por $\underline{\underline{S}}$ se obtiene el siguiente algoritmo iterativo

$$\underline{\underline{Sa}}\underline{\mu}_{\Delta} = \underline{\underline{SaSj}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_{\Delta} = 0 \tag{13.29}$$

esta última ecuación provee una manera iterativa de aplicar la formulación con Multiplicadores de Lagrange. La igualdad $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_{\Delta} = 0$ puede ser interpretada como una restricción; y en efecto, se puede ver que es equivalente a $\underline{\mu}_{\Delta} \in \underline{\underline{Sa}}W_{\Delta}$.

13.2 Algoritmos Precondicionados

Los algoritmos precondicionados son los que se implementan para resolver los problemas de interés en Ciencias e Ingenierías, ya que su ejecución en equipos paralelos —como Clusters— es eficiente y con buenas características de convergencia (véase [68]). Se desarrollaron cuatro algoritmos precondicionados (véase [64]), los cuales se detallan a continuación.

13.2.1 Versión DVS del Algoritmo BDDC

La versión DVS del algoritmo BDDC se obtiene cuando el algoritmo de complemento de Schur es precondicionado por medio de la matriz $\underline{\underline{aS}}^{-1}$. Entonces: "Dada $\underline{f}_{\Delta} \in \underline{\underline{a}}W_{\Delta}$, encontrar $\underline{u}_{\Delta} \in W_{\Delta}$ tal que

$$\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{u}_{\Delta} = \underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{u}_{\Delta} = 0\text{".} \tag{13.30}$$

Para este algoritmo, las siguientes propiedades llaman la atención:

1. Este es un algoritmo iterativo.
2. La matriz iterada es $\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}$.
3. La iteración es realizada dentro del subespacio $\underline{\underline{a}}W_\Delta \subset W_\Delta$.
4. Este algoritmo es aplicable siempre y cuando la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ es tal que la implicación lógica

$$\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{w} = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{w} = 0 \Rightarrow \underline{w} = 0 \tag{13.31}$$

   es satisfecha, para cualquier $\underline{w} \in W_\Delta$.
5. En particular, es aplicable cuando $\underline{\underline{S}}$ es definida.

Las propiedades 1) a 3) estan interrelacionadas. La condición $\underline{\underline{j}}\underline{u}_\Delta = 0$ es equivalente a $\underline{u}_\Delta \in \underline{\underline{a}}W_\Delta$; de este modo, la búsqueda se realiza en el espacio $\underline{\underline{a}}W_\Delta$. Cuando la matriz $\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}$ es aplicada repetidamente, siempre se termina en $\underline{\underline{a}}W_\Delta$, ya que para cada $\underline{w} \in W_\Delta$, se obtiene $\underline{\underline{j}}\left(\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{\underline{aS}}\underline{w}\right) = 0$.

Para la propiedad 4), cuando esta se satisface, la Ec.(13.30) implica la Ec.(13.4). Pare ver esto, nótese que

$$\underline{\underline{j}}\left(\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta - \underline{f}_\Delta\right) = 0 \tag{13.32}$$

y también que la Ec.(13.30) implica

$$\underline{\underline{aS}}^{-1}\left(\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta - \underline{f}_\Delta\right) = 0 \tag{13.33}$$

cuando la implicación de la Ec.(13.31) se satisface, las Ecs.(13.32 y 13.33) juntas implican que

$$\underline{\underline{aS}}\underline{u}_\Delta - \underline{f}_\Delta = 0 \tag{13.34}$$

como se quería. Esto muestra que la Ec.(13.30) implica la Ec.(13.4), cuando la Ec.(13.31) se satisface.

Para la propiedad 5), nótese que la condición de la Ec.(13.31) es débil y requiere que la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ sea definida, ya que la implicación de la Ec.(13.31) es siempre satisfecha cuando $\underline{\underline{S}}$ es definida.

Asumiendo que $\underline{\underline{S}}$ es definida, entonces para cualquier vector $\underline{w} \in W_\Delta$ tal que $\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = 0$ y $\underline{\underline{j}}\underline{w} = 0$, se obtiene

$$\underline{w}\cdot\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = \underline{w}\cdot\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = \left(\underline{\underline{j}}\underline{w}\right)\cdot\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = 0 \tag{13.35}$$

esto implica que $\underline{w} = 0$, ya que $\underline{\underline{S}}^{-1}$ es definida cuando $\underline{\underline{S}}$ lo es. Por lo tanto la propiedad 5) es clara.

13.2.2 Versión DVS del Algoritmo FETI-DP

La versión DVS del algoritmo FETI-DP se obtiene cuando la formulación con Multiplicadores de Lagrange del problema no precondicionado Neumann-Neumann de la Ec.(13.11) —véase sección (13.1.2)— es precondicionada por medio de la matriz $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}$. Entonces: "Dada $\underline{f}_\Delta \in \underline{\underline{a}}W_\Delta$, encontrar $\underline{\lambda}_\Delta \in W_\Delta$ tal que

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta = \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_\Delta = 0" \tag{13.36}$$

donde

$$\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\lambda}_\Delta\right). \tag{13.37}$$

Para este algoritmo, las siguientes propiedades llaman la atención:

1. Este es un algoritmo iterativo.
2. La matriz iterada es $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}$.
3. La iteración es realizada dentro del subespacio $\underline{\underline{j}}W_\Delta \subset W_\Delta$.
4. Este algoritmo es aplicable siempre y cuando la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ es tal que la implicación lógica

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{w} = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\underline{w} = 0 \Rightarrow \underline{w} = 0 \tag{13.38}$$

es satisfecha, para cualquier $\underline{w} \in W_\Delta$.

5. En particular, es aplicable cuando $\underline{\underline{S}}$ es positiva definida.

Las propiedades 1) a 3) estan interrelacionadas. La condición $\underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_\Delta = 0$ es equivalente a $\underline{\lambda}_\Delta \in \underline{\underline{j}}W_\Delta$; de este modo, la búsqueda se realiza en el

espacio $\underline{\underline{j}}W_\Delta$. Cuando la matriz $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}$ es aplicada repetidamente, siempre se termina en $\underline{\underline{j}}W_\Delta$, ya que para cada $\underline{\mu} \in W_\Delta$, se obtiene $\underline{\underline{a}}\left(\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}\right) = 0$.

Para la propiedad 4), cuando esta se satisface, la Ec.(13.36) implica la Ec.(13.11). Pare ver esto, se asume la Ec.(13.36) y nótese que

$$\underline{\underline{a}}\left(\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta\right) = 0 \tag{13.39}$$

y también que la Ec.(13.36) implica

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\left(\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta\right) = 0 \tag{13.40}$$

cuando la implicación de la Ec.(13.38) se satisface, las Ecs.(13.39 y 13.40) juntas implican que

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\lambda}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta = 0 \tag{13.41}$$

como se quería. Esto muestra que la Ec.(13.36) implica la Ec.(13.11), cuando la Ec.(13.38) se satisface.

Para la propiedad 5), nótese que la condición de la Ec.(13.38) es débil y requiere que la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ sea definida, ya que la implicación de la Ec.(13.38) es siempre satisfecha cuando $\underline{\underline{S}}$ es definida. Asumiendo que $\underline{\underline{S}}$ es definida, entonces para cualquier vector $\underline{\mu} \in W_\Delta$ tal que $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\mu} = 0$ y $\underline{\underline{a}}\underline{\mu} = 0$, se obtiene

$$\underline{\mu}\cdot\underline{\underline{S}}\underline{\mu} = \underline{\mu}\cdot\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{\mu} = \left(\underline{\underline{a}}\underline{\mu}\right)\cdot\underline{\underline{S}}\underline{u} = 0 \tag{13.42}$$

esto implica que $\underline{\mu} = 0$, ya que $\underline{\underline{S}}$ es definida. Por lo tanto la propiedad 5) es clara.

13.2.3 Formulación Primal Precondicionada del Problema Neumann-Neumann

Este algoritmo es la versión precondicionada de la formulación libre de multiplicadores de Lagrange del problema no precondicionado Neumann-Neumann. Este puede derivarse multiplicando la Ec.(13.20) —véase sección (13.1.3)— por el precondicionador $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}$. "Entonces el algoritmo consiste en buscar $\underline{v}_\Delta \in W_\Delta$, tal que

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{v}_\Delta = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{v}_\Delta = 0" \tag{13.43}$$

donde

$$\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{v}}_\Delta\right). \tag{13.44}$$

Para este algoritmo, las siguientes propiedades llaman la atención:

1. Este es un algoritmo iterativo.
2. La matriz iterada es $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}$.
3. La iteración es realizada dentro del subespacio $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}W_\Delta \subset W_\Delta$.
4. Este algoritmo es aplicable siempre y cuando la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ es tal que la implicación lógica

$$\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{w} = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{a}}\underline{w} = 0 \Rightarrow \underline{w} = 0 \tag{13.45}$$

es satisfecha, para cualquier $\underline{w} \in W_\Delta$.

5. En particular, es aplicable cuando $\underline{\underline{S}}$ es positiva definida.

Las propiedades 1) a 3) estan interrelacionadas. La condición $\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{v}_\Delta = 0$ es equivalente a $\underline{v}_\Delta \in \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}W_\Delta$; de este modo, la búsqueda se realiza en el espacio $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}W_\Delta$. Cuando la matriz $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}$ es aplicada repetidamente, siempre se termina en $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}W_\Delta$, ya que para cada $\underline{v}_\Delta \in W_\Delta$, se obtiene $\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\left(\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{v}_\Delta\right) = 0$.

Para la propiedad 4), cuando esta se satisface, la Ec.(13.43) implica la Ec.(13.20). Pare ver esto, se asume la Ec.(13.43) y se define

$$\underline{w} = \underline{\underline{j}}\underline{v}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \text{ tal que } \underline{\underline{a}}\underline{w} = 0 \tag{13.46}$$

además, en vista de la Ec.(13.43) implica

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{w} = 0 \text{ y por lo tanto } \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{w} = 0 \tag{13.47}$$

usando la Ec.(13.45) se ve que las Ecs.(13.46 y 13.47) juntas implican que

$$\underline{\underline{j}}\underline{v}_\Delta - \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta = \underline{w} = 0 \tag{13.48}$$

ahora, la Ec.(13.20) es clara y la prueba se completa.

Para la propiedad 5), nótese que la condición de la Ec.(13.45) es débil y requiere que la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ sea definida, ya que la implicación de la Ec.(13.45) es siempre satisfecha cuando $\underline{\underline{S}}$ es definida. Asumiendo que $\underline{\underline{S}}$ es definida, entonces para cualquier vector $\underline{w} \in W_\Delta$ tal que $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{w} = 0$ y $\underline{\underline{a}}\underline{w} = 0$, se obtiene

$$\underline{w} \cdot \underline{\underline{S}}\underline{w} = \underline{w} \cdot \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{w} = \left(\underline{\underline{a}}\underline{w}\right) \cdot \underline{\underline{S}}\underline{w} = 0 \tag{13.49}$$

esto implica que $\underline{w} = 0$, ya que $\underline{\underline{S}}$ es definida. Por lo tanto la propiedad 5) es clara.

13.2.4 Segunda Formulación Dual Precondicionada del Problema Neumann-Neumann

Este algoritmo es la versión precondicionada de la segunda formulación con multiplicadores de Lagrange del problema no precondicionado Neumann-Neumann. Este puede derivarse multiplicando la Ec.(13.27) —véase sección (13.1.4)— por el precondicionador $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}$. "Entonces el algoritmo consiste en buscar $\underline{\mu}_\Delta \in W_\Delta$, tal que

$$\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\mu}_\Delta = \underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_\Delta \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_\Delta = 0\text{"} \tag{13.50}$$

donde

$$\underline{u}_\Delta = \underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\left(\underline{f}_\Delta + \underline{\mu}_\Delta\right) \tag{13.51}$$

este algoritmo es similar a FETI-DP.

Para este algoritmo, las siguientes propiedades llaman la atención:

1. Este es un algoritmo iterativo.
2. La matriz iterada es $\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{a}}$.
3. La iteración es realizada dentro del subespacio $\underline{\underline{S}}\underline{\underline{a}}W_\Delta \subset W_\Delta$.
4. Este algoritmo es aplicable siempre y cuando la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ es tal que la implicación lógica

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\underline{w} = 0 \Rightarrow \underline{w} = 0 \tag{13.52}$$

es satisfecha, para cualquier $\underline{w} \in W_\Delta$.

5. En particular, es aplicable cuando $\underline{\underline{S}}$ es positiva definida.

Las propiedades 1) a 3) estan interrelacionadas. La condición $\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\mu}_{\Delta} = 0$ es equivalente a $\underline{\mu}_{\Delta} \in \underline{\underline{Sa}}W_{\Delta}$; de este modo, la búsqueda se realiza en el espacio $\underline{\underline{Sa}}W_{\Delta}$. Cuando la matriz $\underline{\underline{SaS}}^{-1}\underline{\underline{a}}$ es aplicada repetidamente, siempre se termina en $\underline{\underline{Sa}}W_{\Delta}$, ya que para cada $\underline{\mu}_{\Delta} \in W_{\Delta}$, se obtiene $\underline{\underline{aS}}\left(\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}\underline{\underline{j}}\underline{\mu}_{\Delta}\right) = 0$.

Para la propiedad 4), cuando esta se satisface, la Ec.(13.50) implica la Ec.(13.27). Para ver esto, se asume la Ec.(13.50) y se define

$$\underline{\eta} = \underline{\underline{a}}\underline{\mu}_{\Delta} - \underline{\underline{aS}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_{\Delta} \text{ tal que } \underline{\underline{j}}\underline{\eta} = 0 \tag{13.53}$$

además, en vista de la Ec.(13.50) se obtiene

$$\underline{\underline{SaS}}^{-1}\underline{\eta} = 0 \tag{13.54}$$

usando las Ecs.(13.53 y 13.54), juntas implican que

$$\underline{\underline{a}}\underline{\eta} - \underline{\underline{aS}}\underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{f}_{\Delta} = \underline{\eta} = 0 \tag{13.55}$$

ahora, la Ec.(13.27) es clara, como se quería probar, además se ve que la Ec.(13.50) implica la Ec.(13.27), cuando la condición de la Ec.(13.52) se satisface.

Para la propiedad 5), nótese que la condición de la Ec.(13.52) es débil y requiere que la matriz del complemento de Schur $\underline{\underline{S}}$ sea definida, ya que la implicación de la Ec.(13.52) es siempre satisfecha cuando $\underline{\underline{S}}$ es definida. Asumiendo que $\underline{\underline{S}}$ es definida, entonces para cualquier vector $\underline{w} \in W_{\Delta}$ tal que $\underline{\underline{aS}}^{-1}\underline{w} = 0$ y $\underline{\underline{j}}\underline{w} = 0$, se obtiene

$$\underline{w} \cdot \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = \underline{w} \cdot \underline{\underline{j}}\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = \left(\underline{\underline{j}}\underline{w}\right) \cdot \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{w} = 0 \tag{13.56}$$

esto implica que $\underline{w} = 0$, ya que $\underline{\underline{S}}^{-1}$ es definida cuando $\underline{\underline{S}}$ lo es. Por lo tanto la propiedad 5) es clara.

13.3 El Operador de Steklov-Poincaré

El operador de Steklov-Poincaré generalmente se define como la ecuación para la traza de la solución exacta u sobre Γ del problema dado por la Ec.(12.4), donde el complemento de Schur —definido en la Ec.(12.92)— es una aproximación discreta del operador de Steklov-Poincaré (véase [44]). La discusión de este operador juega un papel importante en el desarrollo de la teoría del espacio de vectores derivados (véase [43]), para iniciar la discusión, se usa la siguiente definición.

Definición 18 *Sea* $\underline{\underline{A}} : W_r \to W_r$ *una matriz simétrica y positiva definida. El 'producto interior de energía' es definido por*

$$(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{u} \cdot \underline{\underline{A}}\underline{w} \quad \forall \underline{u}, \underline{w} \in W_r. \tag{13.57}$$

El espacio lineal, W_r, es un espacio de Hilbert (dimensionalmente finito) cuando este es dotado con el producto interior de energía. Usando la notación de la sección (12.7) y recordando que la matriz $\underline{\underline{A}}$ se escribe como

$$\underline{\underline{A}} \equiv \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \tag{13.58}$$

donde la notación usada es tal que

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} : W_\Pi \to W_\Pi, & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} : W_\Delta \to W_\Pi \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} : W_\Pi \to W_\Delta, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} : W_\Delta \to W_\Delta \end{cases} \tag{13.59}$$

además

$$\begin{cases} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\underline{u} = \left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_\Pi\right)_\Pi, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\underline{u} = \left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_\Pi\right)_\Delta \\ \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}\underline{u} = \left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_\Delta\right)_\Pi, & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta}\underline{u} = \left(\underline{\underline{A}}\underline{u}_\Delta\right)_\Delta \end{cases} \tag{13.60}$$

y nótese que se tiene la inmersión natural en W_r, i.e.

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} &\equiv \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} &\equiv \begin{pmatrix} 0 & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} &\equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & 0 \end{pmatrix} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} &\equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{13.61}$$

Ahora, se introducen las siguientes definiciones:

Definición 19 *Sea la matriz* $\underline{\underline{L}}$ *definida como*

$$\underline{\underline{L}} \equiv \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{13.62}$$

y la matriz $\underline{\underline{R}}$ *definida como*

$$\underline{\underline{R}} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix}. \tag{13.63}$$

Además, nótese la siguiente identidad

$$\underline{\underline{R}} = \underline{\underline{aR}} + \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{R}} \tag{13.64}$$

implica también que $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}}^T$, así

$$\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} + \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{R}} = \underline{\underline{L}}^T + \underline{\underline{R}}^T\underline{\underline{a}} + \underline{\underline{R}}^T\underline{\underline{j}}. \tag{13.65}$$

Definición 20 *A la identidad*

$$\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^T\underline{\underline{j}} = \underline{\underline{L}}^T + \underline{\underline{R}}^T\underline{\underline{a}} - \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{R}} \tag{13.66}$$

la cual se deriva de la Ec.(13.65), la cual será referida como la fórmula Green-Herrera para matrices.

Nótese que los rangos de $\underline{\underline{L}}$ y $\underline{\underline{R}}$ son W_Π y W_Δ, respectivamente, mientras que los rangos de $\underline{\underline{aR}}$ y $\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{R}}$ estan contenidos en $W_{12}(\Delta)$ y $W_{11}(\Delta)$ respectivamente. Inclusive más, estos últimos dos rangos son linealmente independientes. Además, para cualquier función $\underline{v} \in W_r$ se obtiene

$$\left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^T\underline{\underline{j}}\right)\underline{v} = 0 \tag{13.67}$$

si y sólo si

$$\underline{\underline{L}}\underline{v} = 0, \underline{\underline{aR}}\underline{v} = 0 \quad \text{y} \quad \underline{\underline{j}}\,\underline{v} = 0. \tag{13.68}$$

Esto establece la equivalencia entre las Ec.(13.67) y Ec.(13.68) y se puede usar el hecho de que los rangos de $\underline{\underline{L}}$ y $\underline{\underline{aR}}$ son linealmente independientes, junto con la ecuación

$$\left(\underline{\underline{j}}\,\underline{v}\right) \cdot \underline{\underline{R}}^T\underline{\underline{j}}\,\underline{v} = \left(\underline{\underline{j}}\,\underline{v}\right) \cdot \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta}\underline{\underline{j}}\,\underline{v} = \left(\underline{\underline{j}}\,\underline{v}\right) \cdot \underline{\underline{A}}\underline{\underline{j}}\,\underline{v} = 0 \tag{13.69}$$

la cual implica que $\underline{\underline{j}}\underline{v} = 0$. Esto es porque $\underline{\underline{A}}$ es positiva definida sobre W_r.

En lo que sigue, se usa la siguiente notación, para cada $\underline{u} \in W_r$, se escribe

$$\dot{\widehat{\underline{u}}} \equiv \underline{\underline{a}}\underline{u} \quad y \quad [\![\underline{u}]\!] \equiv \underline{\underline{j}}\underline{u} \tag{13.70}$$

entonces $\dot{\widehat{\underline{u}}} \in W_r$, mientras $[\![\underline{u}]\!]$ pertenecen a $W_{11}(\Gamma) \subset W_r$. La fórmula de Green-Herrera de la Ec.(13.66) es equivalente a

$$\underline{w} \cdot \underline{\underline{L}}\underline{u} + \dot{\widehat{\underline{w}}} \cdot \underline{\underline{a}}\underline{\underline{R}}\underline{u} - [\![\underline{u}]\!]\, \underline{\underline{j}}\underline{\underline{R}}\underline{w} = \underline{u} \cdot \underline{\underline{L}}\underline{w} + \dot{\widehat{\underline{u}}} \cdot \underline{\underline{a}}\underline{\underline{R}}\underline{w} - [\![\underline{w}]\!]\, \underline{\underline{j}}\underline{\underline{R}}\underline{u} \tag{13.71}$$

$\forall \underline{u}, \underline{w} \in W_r$. Ahora, las fórmulas de Green-Herrera que originalmente fueron introducidas para operadores diferenciales parciales actuando sobre funciones discontinuas, pueden ser aplicadas a cualquier operador cuando este es lineal. La Ec.(13.66) por otro lado, es vista como una extensión de este tipo de fórmulas actuando sobre vectores discontinuos y se tiene interés de comparar la Ec.(13.71) con las fórmulas de Green-Herrera para operadores diferenciales parciales. Para hacer esto, se introduce la siguiente notación

$$[\![\underline{\underline{R}}]\!] = -\underline{\underline{a}}\underline{\underline{R}} \quad \text{y} \quad \dot{\widehat{\underline{\underline{R}}}} \equiv -\underline{\underline{j}}\underline{\underline{R}} \tag{13.72}$$

haciendo uso de esta notación, la Ec.(13.71) se reescribe como

$$\underline{w} \cdot \underline{\underline{L}}\underline{u} + [\![\underline{u}]\!] \cdot \dot{\widehat{\underline{\underline{R}}}}\, \underline{w} - \dot{\widehat{\underline{w}}} \cdot [\![\underline{\underline{R}}]\!]\, \underline{u} = \underline{u} \cdot \underline{\underline{L}}\underline{w} + [\![\underline{w}]\!] \cdot \dot{\widehat{\underline{\underline{R}}}}\, \underline{u} - \dot{\widehat{\underline{u}}} \cdot [\![\underline{\underline{R}}]\!]\, \underline{w} \tag{13.73}$$

$\forall \underline{u}, \underline{w} \in W_r$.

Para el operador diferencial de Laplace actuando sobre funciones discontinuas definidas por tramos que satisfacen condiciones de frontera homogéneas, la fórmula Green-Herrera queda como

$$\int_\Omega w \mathcal{L} u dx + \int_\Gamma \left\{ [\![u]\!] \dot{\widehat{\frac{\partial w}{\partial n}}} - \dot{\widehat{w}} \left[\!\!\left[\frac{\partial u}{\partial n} \right]\!\!\right] \right\} dx =$$

$$\int_\Omega u \mathcal{L} w dx + \int_\Gamma \left\{ [\![w]\!] \dot{\widehat{\frac{\partial u}{\partial n}}} - \dot{\widehat{u}} \left[\!\!\left[\frac{\partial w}{\partial n} \right]\!\!\right] \right\} dx \tag{13.74}$$

la siguiente correspondencia entre las funcionales bilineales involucradas en ambas ecuaciones, comparando con las Ecs. (13.73 y 13.74) se obtiene

$$\begin{aligned} \int_\Omega w\mathcal{L}u dx &\leftrightarrow \underline{w}\cdot\underline{\underline{L}}\underline{u} \\ \int_\Gamma [\![u]\!]\,\widehat{\frac{\partial w}{\partial n}} dx &\leftrightarrow [\![\underline{u}]\!]\cdot\dot{\underline{\underline{R}}}\,\underline{w} \\ \int_\Gamma \dot{\widehat{w}}\,[\![\frac{\partial u}{\partial n}]\!]\,dx &\leftrightarrow \dot{\underline{w}}\cdot[\![\underline{\underline{R}}]\!]\,\underline{u}. \end{aligned} \tag{13.75}$$

Para operadores diferenciales, en particular para el operador de Laplace, el operador de Steklov-Poincaré asociado con el salto de la derivada normal y de la funcional bilineal es

$$\int_\Gamma \dot{\widehat{w}}\left[\!\!\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]\!\!\right] dx \tag{13.76}$$

a nivel matricial, el operador de Steklov-Poincaré es asociado con la forma bilineal

$$\dot{\underline{w}}\cdot[\![\underline{\underline{R}}]\!]\,\underline{u} = \underline{w}\cdot\underline{\underline{aR}}\underline{u}, \forall \underline{u},\underline{w}\in W_r \tag{13.77}$$

o más simplemente, con la matriz $\underline{\underline{aR}}$.

Definición 21 *Se define al operador de Steklov-Poincaré como la matriz*

$$\underline{\underline{aR}}. \tag{13.78}$$

En el esquema de vectores derivados (DVS), la versión discreta del operador de Steklov-Poincaré es $\underline{\underline{aS}}$, por lo tanto, la versión discreta de la Ec.(12.14) es

$$\underline{\underline{aS}}\underline{v} = \underline{\underline{aS}}\underline{u_p} \qquad \text{junto con } \underline{\underline{j}}\underline{v} = 0 \tag{13.79}$$

la cual puede ponerse en correspondencia con la Ec.(13.4) reemplazando

$$-\left[\!\!\left[\frac{\partial u_p}{\partial n}\right]\!\!\right] \leftrightarrow \underline{f}_\Delta \qquad \text{y} \qquad \underline{v}\leftrightarrow \underline{u}_\Delta. \tag{13.80}$$

Otra formulación al operador de Steklov-Poincaré, se deriva de la fórmula de Green-Herrera para el operador elíptico general, simétrico y de segundo orden

$$\int_\Omega w\mathcal{L}u dx + \int_\Gamma \left\{ [\![u]\!]\,\widehat{\underline{a}_n\cdot\nabla w} - \dot{\widehat{w}}\,[\![\underline{a}_n\cdot\nabla u]\!] \right\} dx =$$

$$\int_{\Omega} u\mathcal{L}w dx + \int_{\Gamma} \left\{ [\![w]\!] \, \underline{\dot{a}_n \cdot \nabla u} - \dot{\widehat{u}} \, [\![\underline{a}_n \cdot \nabla w]\!] \right\} dx. \tag{13.81}$$

La correspondencia de la ecuación (13.75) todavía permanece para este caso, excepto que

$$\begin{cases} [\![\underline{a}_n \cdot \nabla u]\!] \leftrightarrow - \, [\![\underline{\underline{R}}]\!] \, \underline{u} \\ \underline{\dot{a}_n \cdot \nabla w} \leftrightarrow - \underline{\underline{\dot{\widehat{R}}}} \, \underline{u} \end{cases} . \tag{13.82}$$

Correspondencias similares a las dadas por las Ecs. (13.75 y 13.82) pueden ser establecidas en general —su aplicación incluye a los sistemas gobernantes de ecuaciones de elasticidad lineal y muchos problemas más—. Nótese que las Ecs. (13.75 y 13.82) implican una nueva fórmula para el operador *Steklov-Poincaré,* i.e., el salto de la derivada normal en el nivel discreto, el cual es diferente a las interpretaciones estandar que han sido presentadas por muchos autores. La fórmula (véase [61]) para el operador *Steklov-Poincaré* es

$$- \, [\![\underline{\underline{R}}]\!] \, \underline{u} \equiv -\underline{\underline{j}} \, \underline{\underline{R}} \tag{13.83}$$

en particular, esta no contiene el lado derecho de la ecuación para ser resuelta; ganando con ello, en consistencia teórica. Nótese que la fórmula es aplicable para cualquier vector (función) independientemente de si esta es solución del problema bajo consideración o no.

Aplicando la fórmula de Green-Herrera al problema transformado dado al inicio de este capítulo, se tiene el siguiente resultado:

Teorema 22 *Sea* $\overline{f} = \begin{pmatrix} \overline{f}_{\Pi} \\ \underline{f}_{\Delta} \end{pmatrix} \in W_r = W_{12}\left(\overline{\Omega}\right)$, *entonces una* $\underline{v} \in W_r$ *satisface*

$$\left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^T \underline{\underline{j}} \right) \underline{v} = \overline{f} \tag{13.84}$$

si y sólo si, $\underline{v}$ *es solución del el problema transformado.*

Demostración. Sea $\underline{u} \in W_r$ una solución del problema transformado y asumiendo que $\underline{v} \in W_r$ satisface la Ec.(13.84) entonces

$$\left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^T \underline{\underline{j}} \right) \underline{u} = \left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} \right) \underline{u} = \underline{\underline{aA}} \underline{u} = \overline{f} \tag{13.85}$$

para probar el inverso, se define $\underline{w} = \underline{v} - \underline{u}$, así se obtiene

$$\left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}} - \underline{\underline{R}}^T \underline{\underline{j}} \right) \underline{w} = 0 \tag{13.86}$$

y usando las Ec.(13.67) y Ec.(13.68), se tiene que $\underline{v} = \underline{u} + \underline{w}$ satisface

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{v} = \left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}}\right)\underline{v} = \left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{aR}}\right)\underline{u} = \underline{\underline{aA}}\,\underline{u} = \overline{f} \tag{13.87}$$

y

$$\underline{\underline{j}}\,\underline{v} = \underline{\underline{j}}\,\underline{u} = 0. \tag{13.88}$$

■

Por otro lado, para obtener la versión discreta del operador μ definido en la Ec.(12.21), primero se escribe la versión discreta de la Ec.(12.19), esta es

$$\underline{\underline{jS}}\,\underline{v} = \underline{q}_{\Gamma} \qquad \text{junto con} \qquad \underline{\underline{aS}}\,\underline{v} = 0 \tag{13.89}$$

por lo tanto, se tiene que

$$\underline{\underline{a}}\,\underline{q}_{\Gamma} = 0 \text{ y } \underline{\underline{j}}\,\underline{v} = \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{S}}\,\underline{v} = \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{jS}}\,\underline{v} = \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{q}_{\Gamma} \tag{13.90}$$

esto establece la correspondencia de

$$\mu \leftrightarrow \underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1} \tag{13.91}$$

la versión discreta de la Ec.(12.22) es

$$\underline{\underline{j}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{q}_{\Gamma} = -\underline{\underline{j}}\,\underline{u}_p \qquad \text{junto con} \qquad \underline{\underline{a}}\,\underline{q}_{\Gamma} = 0. \tag{13.92}$$

Otra opción de abordar la versión discreta de la Ec.(12.20) sin hacer uso de la contraparte del operador de Steklov-Poincaré μ, en el cual, el correspondiente problema es

$$\underline{\underline{j}}\,\underline{v} = -\underline{\underline{j}}\,\underline{u}_p \qquad \text{y} \qquad \underline{\underline{aS}}\,\underline{v} = 0 \tag{13.93}$$

sin embargo, esta última ecuación no define un algoritmo iterativo, ya que

$$\underline{\underline{aS}}\,\underline{\underline{j}} \neq 0. \tag{13.94}$$

Una ecuación equivalente a la Ec.(13.93), la cual puede ser aplicada en un algoritmo iterativo es

$$\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\,\underline{v} = -\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{\underline{j}}\,\underline{u}_p \qquad \text{y} \qquad \underline{\underline{aS}}\,\underline{v} = 0. \tag{13.95}$$

14 Apéndice E: Consideraciones Sobre la Formulación Numérica y su Implementación Computacional de DVS

Para realizar la implementación de cada uno de los métodos desarrollados de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados (DVS) —véase sección (5.4.2)—, es necesario trabajar con los operadores $\underline{\underline{a}}, \underline{\underline{j}}, \underline{\underline{S}}$ y $\underline{\underline{S}}^{-1}$, así como realizar las operaciones involucradas entre ellos.

Normalmente los operadores $\underline{\underline{S}}$ y $\underline{\underline{S}}^{-1}$ no se construyen —son operadores virtuales— porque su implementación generaría matrices densas, las cuales consumen mucha memoria y hacen ineficiente su implementación computacional. En vez de eso, sólo se realizan las operaciones que involucra la definición del operador, por ejemplo $\underline{\underline{S}}\underline{u_\Gamma}$

$$\underline{\underline{S}}\underline{u_\Gamma} = \left(\underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}\right)\underline{u_\Gamma} \tag{14.1}$$

en donde, para su evaluación sólo involucra la operación de multiplicación matriz-vector y resta de vectores, haciendo la evaluación computacional eficiente.

En el presente apéndice se desarrollan las operaciones que se requieren para implementar a cada uno los operadores involucrados en los métodos desarrollados y que matrices en cada caso son necesarias de construir, siempre teniendo en cuenta el hacer lo más eficiente posible su implementación y evaluación en equipos de cómputo de alto desempeño.

14.1 Matrices Virtuales y Susceptibles de Construir

La gran mayoría de las matrices usadas en los métodos de descomposición de dominio son operadores virtuales, por ejemplo el operador $\underline{\underline{S}}$, que es definido como

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \tag{14.2}$$

y es formado por

$$\underline{\underline{S}} = \sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{S}}^{\alpha} \tag{14.3}$$

donde $\underline{\underline{S}}^{\alpha}$ a su vez esta constituida por el complemento de Schur local al subdominio Ω_α

$$\underline{\underline{S}}^{\alpha} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta} \tag{14.4}$$

pero, de nuevo, las matrices locales $\underline{\underline{S}}^{\alpha}$ y $\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}$ no se construyen ya que $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\underline{u}_{\Pi} = \underline{\underline{S}}^{\alpha}_{\pi}\underline{u}_{\Pi}$ donde $\underline{\underline{S}}^{\alpha}_{\pi}$ es definido como

$$\underline{\underline{S}}^{\alpha}_{\pi} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}. \tag{14.5}$$

Entonces, las matrices susceptibles de ser construidas en cada subdominio Ω_α son

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta I}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\pi} \text{ y } \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{14.6}$$

pero $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi} = \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi I}\right)^{T}$, $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta} = \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta I}\right)^{T}$ y $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta} = \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\pi}\right)^{T}$, así, las únicas matrices susceptibles de construir son

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{II}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\pi\Delta} \text{ y } \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} \tag{14.7}$$

donde todas ellas son locales a cada subdominio Ω_α, con una estructura acorde al tipo de discretización discutida en las secciones (12.8 y 5.4.1) y en este apéndice.

Por lo anterior, nótese que el operador $\underline{\underline{S}}^{-1}$ tampoco se construye, para evaluar $\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{u}_{\Gamma}$ se usa el procedimiento indicado en la sección (14.3).

Otros operadores como son las matrices $\underline{\underline{a}}$ y $\underline{\underline{j}}$ pueden ser o no construidos, pero es necesario recordar que $\underline{\underline{j}} = \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{a}}$, así que, en principio $\underline{\underline{j}}$ no sería necesario construir, por otro lado los operadores $\underline{\underline{a}}$ y $\underline{\underline{j}}$ sólo existen en el nodo maestro —donde se controla a los nodos duales y primales y no en los subdominios—; y estas matrices en caso de ser construidas serán dispersas, con pocos valores por renglón —según el número de subdominios que compartan a cada uno de los nodos de la frontera interior— y estan sujetas al tipo de triangulación usada en la descomposición de la malla gruesa del dominio.

14.2 Evaluación de la Matriz $\underline{\underline{S}}$ con Nodos Primales Definidos

En todos los casos donde aparece el operador $\underline{\underline{S}}$, ya que, sólo interesa la evaluación de $\underline{\underline{S}}\underline{y}_{\Gamma}$, i.e. $\underline{v}_{\Gamma} = \underline{\underline{S}}\underline{y}_{\Gamma}$, entonces se reescribe al operador $\underline{\underline{S}}$ en

términos de sus componentes por subdominio

$$\underline{u_\Gamma} = \left[\sum_{\alpha=1}^{E} \underline{\underline{S}}^{\alpha}\right] \underline{y_\Gamma} \tag{14.8}$$

para evaluar, el vector $\underline{y_\Gamma}$ se descompone en los subvectores $\underline{y_\Gamma}^{\alpha}$ correspondientes a cada subdominio $\Omega\alpha$. Así, para evaluar $\underline{\tilde{u}_\Gamma}^{\alpha} = \underline{\underline{S}}^{\alpha}\underline{y_\Gamma}^{\alpha}$ se usa el hecho de que

$$\underline{\underline{S}}^{\alpha} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta} \tag{14.9}$$

en donde, se tiene que evaluar

$$\underline{\tilde{u}_\Gamma}^{\alpha} = \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta}\right)\underline{y_\Gamma}^{\alpha} \tag{14.10}$$

estas evaluaciones en cada subdominio Ω_α pueden realizarse en paralelo.

Para evaluar de forma eficiente esta expresión, se realizan las siguientes operaciones equivalentes

$$\begin{aligned} \underline{x1} &= \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Delta}\underline{y_\Gamma}^{\alpha} \\ \underline{x2} &= \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta}\right)\underline{y_\Gamma}^{\alpha} \\ \underline{\tilde{u}_\Gamma}^{\alpha} &= \underline{x1} - \underline{x2} \end{aligned} \tag{14.11}$$

la primera y tercera expresión no tienen ningún problema en su evaluación, para la segunda expresión se tiene que hacer

$$\underline{x3} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Delta}\underline{y_\Gamma}^{\alpha} \tag{14.12}$$

con este resultado intermedio se debe calcular

$$\underline{x4} = \left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{x3} \tag{14.13}$$

pero como no se cuenta con $\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}$ ya que seria una matriz densa, entonces se multiplica la expresión por $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}$ obteniendo

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\underline{x4} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\left(\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\right)^{-1}\underline{x3} \tag{14.14}$$

al simplificar, se obtiene

$$\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\underline{x4} = \underline{x3}. \tag{14.15}$$

Esta última expresión puede ser resuelta usando Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES. Una vez obtenido $\underline{x4}$, se puede calcular

$$\underline{x2} = \underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Delta\Pi}\underline{x4} \tag{14.16}$$

así

$$\underline{\tilde{u}_{\Gamma}}^{\alpha} = \underline{x1} - \underline{x2} \tag{14.17}$$

completando la secuencia de operaciones necesaria para obtener $\underline{\tilde{u}_{\Gamma}}^{\alpha} = \underline{\underline{S}}^{\alpha}\underline{y_{\Gamma}}^{\alpha}$.

Observación 5 *En el caso de la expresión dada por la Ec.(14.15) al aplicar un método iterativo, sólo interesará realizar el producto* $\underline{\underline{A}}^{\alpha}_{\Pi\Pi}\underline{x_{\Pi}}$, *o más precisamente* $\underline{\underline{S}}^{i}_{\pi}\underline{x_{\pi}}$, *donde*

$$\underline{\underline{S}}^{i}_{\pi} = \left(\underline{\underline{A}}^{i}_{\pi\pi} - \underline{\underline{A}}^{i}_{\pi I}\left(\underline{\underline{A}}^{i}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{i}_{I\pi}\right) \tag{14.18}$$

entonces si se llama $\underline{x_{\pi}}^{i}$ *al vector correspondiente al subdominio* i, *se tiene*

$$\underline{\tilde{u}_{\pi}}^{i} = \left(\underline{\underline{A}}^{i}_{\pi\pi} - \underline{\underline{A}}^{i}_{\pi I}\left(\underline{\underline{A}}^{i}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{i}_{I\pi}\right)\underline{x_{\pi}}^{i} \tag{14.19}$$

para evaluar de forma eficiente esta expresión, se realizan las siguientes operaciones equivalentes

$$\begin{aligned} \underline{u1} &= \underline{\underline{A}}^{i}_{\pi\pi}\underline{x_i} \\ \underline{u2} &= \left(\underline{\underline{A}}^{i}_{\pi I}\left(\underline{\underline{A}}^{i}_{II}\right)^{-1}\underline{\underline{A}}^{i}_{I\pi}\right)\underline{x_i} \\ \underline{\tilde{u}_{\Gamma}}^{i} &= \underline{u1} - \underline{u2} \end{aligned} \tag{14.20}$$

la primera y tercera expresión no tienen ningún problema en su evaluación, para la segunda expresión se tiene que hacer

$$\underline{u3} = \underline{\underline{A}}^{i}_{I\pi}\underline{x_i} \tag{14.21}$$

con este resultado intermedio se debe calcular

$$\underline{u3} = \left(\underline{\underline{A}}^{i}_{II}\right)^{-1}\underline{u4} \tag{14.22}$$

pero como no se cuenta con $\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}$, *entonces se multiplica la expresión por* $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ *obteniendo*

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{u3} = \underline{\underline{A}}^i_{II}\left(\underline{\underline{A}}^i_{II}\right)^{-1}\underline{u4} \tag{14.23}$$

al simplificar, se obtiene

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}\underline{u4} = \underline{u3}. \tag{14.24}$$

Esta última expresión puede ser resuelta usando métodos directos —Factorización LU o Cholesky— o iterativos —Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES— cada una de estas opciones tiene ventajas y desventajas desde el punto de vista computacional —como el consumo de memoria adicional o el aumento de tiempo de ejecución por las operaciones involucradas en cada caso— que deben ser evaluadas al momento de implementar el código para un problema particular. Una vez obtenido $\underline{u4}$, *se puede calcular*

$$\underline{u2} = \underline{\underline{A}}^i_{\pi I}\underline{u4} \tag{14.25}$$

así

$$\underline{\tilde{u}_\Gamma}^i = \underline{u1} - \underline{u2} \tag{14.26}$$

completando la secuencia de operaciones necesaria para obtener $\underline{\underline{S}}^i_\pi \underline{x}_i$.

14.3 Evaluación de la Matriz $\underline{\underline{S}}^{-1}$ con Nodos Primales Definidos

En los algoritmos desarrollados interviene el cálculo de $\underline{\underline{S}}^{-1}$, dado que la matriz $\underline{\underline{S}}$ no se construye, entonces la matriz $\underline{\underline{S}}^{-1}$ tampoco se construye. En lugar de ello, se procede de la siguiente manera: Se asume que en las operaciones anteriores al producto de $\underline{\underline{S}}^{-1}$, se ha obtenido un vector. Supóngase que es $\underline{v_\Gamma}$, entonces para hacer

$$\underline{u_\Gamma} = \underline{\underline{S}}^{-1}\underline{v_\Gamma} \tag{14.27}$$

se procede a multiplicar por $\underline{\underline{S}}$ a la ecuación anterior

$$\underline{\underline{S}}\,\underline{u_\Gamma} = \underline{\underline{S}}\,\underline{\underline{S}}^{-1}\underline{v_\Gamma} \tag{14.28}$$

obteniendo

$$\underline{\underline{S}}\,\underline{u_\Gamma} = \underline{v_\Gamma} \tag{14.29}$$

es decir, usando algún proceso iterativo —como CGM, GMRES— se resuelve el sistema anterior, de tal forma que en cada iteración de $\underline{u_\Gamma}^i$ se procede como se indicó en la sección del cálculo de $\underline{\underline{S}}$, resolviendo $\underline{\underline{S}}\underline{u_\Gamma} = \underline{v_\Gamma}$ mediante iteraciones de $\underline{u_\Gamma}^{i+1} = \underline{\underline{S}}\underline{u_\Gamma}^i$.

14.4 Cálculo de los Nodos Interiores

La evaluación de

$$\underline{u_\Pi} = -\left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}\underline{u_\Delta} \tag{14.30}$$

involucra de nuevo cálculos locales de la expresión

$$\underline{u_I}^\alpha = -\left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Delta}\underline{u_\Gamma}^\alpha \tag{14.31}$$

aquí otra vez esta involucrado $\left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\right)^{-1}$, por ello se debe usar el siguiente procedimiento para evaluar de forma eficiente esta expresión, realizando las operaciones equivalentes

$$\begin{aligned} \underline{x4} &= \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Delta}\underline{u_\Gamma}^\alpha \\ \underline{u_I}^\alpha &= \left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{x4} \end{aligned} \tag{14.32}$$

multiplicando por $\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}$ la última expresión, se obtiene

$$\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\underline{u_I}^\alpha = \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{x4} \tag{14.33}$$

simplificando, se obtiene

$$\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\underline{u_I}^\alpha = \underline{x4} \tag{14.34}$$

esta última expresión puede ser resuelta usando métodos directos —como Factorización LU o Cholesky— o mediante métodos iterativos —como Gradiente Conjugado o alguna variante de GMRES— como se indica en la observación (5).

14.5 Descomposición de Schur sin Nodos Primales

En el caso de que en la descomposición no se usen nodos primales, la matriz virtual global $\underline{\underline{A}}$ queda como

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}^1_{II} & \underline{\underline{0}} & \cdots & \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{A}}^1_{I\Delta} \\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{A}}^2_{II} & \cdots & \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{A}}^2_{I\Delta} \\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{0}} & \ddots & \underline{\underline{0}} & \vdots \\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{0}} & \cdots & \underline{\underline{A}}^E_{II} & \underline{\underline{A}}^E_{I\Delta} \\ \underline{\underline{A}}^1_{\Delta I} & \underline{\underline{A}}^2_{\Delta I} & \cdots & \underline{\underline{A}}^E_{\Delta I} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix} \tag{14.35}$$

de donde $\underline{\underline{A}}\underline{x} = \underline{b}$ se implementa como

$$\underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} \underline{x}_I \\ \underline{x}_\Delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{b}_I \\ \underline{b}_\Delta \end{pmatrix} \tag{14.36}$$

i.e.

$$\left(\sum_{\alpha=1}^{E} \left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Delta\Delta} - \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Delta I} \left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{II} \right)^{-1} \underline{\underline{A}}^\alpha_{I\Delta} \right) \right) \underline{x}_\Delta = \underline{b}_\Delta - \sum_{\alpha=1}^{E} \left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Delta I} \left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{II} \right)^{-1} \underline{b}^\alpha_I \right) \tag{14.37}$$

una vez encontrado $\underline{x}_\Delta$, se encuentra $\underline{x}_I$ mediante

$$\underline{x}^\alpha_I = \left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{II} \right)^{-1} \left(\underline{b}^\alpha_I - \underline{\underline{A}}^\alpha_{I\Delta} \underline{x}^\alpha_\Delta \right). \tag{14.38}$$

14.6 DVS para Ecuaciones Escalares y Vectoriales

Con el fin de ejemplificación, se supone una ecuación escalar en dos dimensiones definida en un dominio Ω, mediante una descomposición en subdominios usando una malla estructurada cartesiana como se muestra en la figura:

En este caso, sería una descomposición del dominio Ω en 3×3 y 6×5 , la malla gruesa seria descompuesta en $3 \times 3 = 9$ subdominios Ω_α y donde cada uno de ellos tiene una partición fina de 6×5 i.e. $42 = (6+1) * (5+1)$ grados de libertad por subdominio. En el caso vectorial, en el cual cada grado de libertad contiene C componentes, el número de grados de libertad total será igual a $((6+1) * (5+1) * C)$. Por ejemplo, en el caso de $C = 3$ se tienen 126 grados de libertad por subdominio (véase [69]).

EDP Vectoriales en Dos y Tres Dimensiones En el caso de una ecuación vectorial en dos —tres— dimensiones, si el dominio Ω es descompuesto en una malla estructurada cartesiana, donde la partición gruesa de $n \times m$ —ó $n \times m \times o$— subdominios Ω_α y donde cada uno es descompuesto en

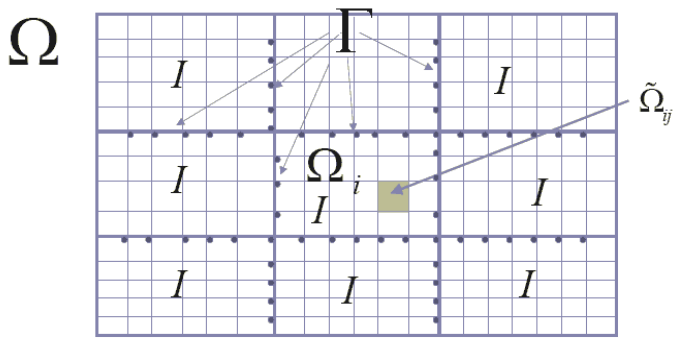


Figura 35: Dominio Ω descompuesto en una partición gruesa de 3×3 y cada subdominio Ω_i en una partición fina de 6×5.

una partición fina de $r \times s$ —ó $r \times s \times t$—, en el cual cada grado de libertad contiene C componentes, el número de grados de libertad por subdominio es $(r+1) * (s+1) * C$ —ó $(r+1) * (s+1) * (t+1) * C$—.

A partir de la formulación de los métodos desarrollados, se generan las matrices locales en cada subdominio, de esta forma se obtiene la descomposición fina del dominio, generándose de manera virtual el sistema lineal definido por el método DVS que se este implementando.

La implementación computacional que se desarrolló tiene una jerarquía de clases en donde la clase *DPMethod* realiza la partición gruesa del dominio usando la clase *Interchange* y controla la partición de cada subdominio mediante un objeto de la clase de *RectSub* generando la partición fina del dominio. La resolución de los nodos de la frontera interior se hace mediante el método de CGM o alguna variante de GMRES.

El método de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados se implementó realizando las siguientes tareas:

> A) La clase *DPMethod* genera la descomposición gruesa del dominio mediante la agregación de un objeto de la clase *Interchange,* se supone que se tiene particionado en $n \times m$ —ó $n \times m \times o$— subdominios.
>
> B) Con esa geometría se construyen los objetos de *RectSub* — uno por cada subdominio Ω_α—, donde cada subdominio es particionado en $r \times s$ —ó $r \times s \times t$— subdominios y se regresan las

coordenadas de los nodos de frontera del subdominio correspondiente a la clase *DPMethod*.

C) Con estas coordenadas, la clase *DPMethod* conoce a los nodos de la frontera interior —son estos los que resuelve el método de descomposición de dominio—. Las coordenadas de los nodos de la frontera interior se dan a conocer a los objetos *RectSub*, transmitiendo sólo aquellos que estan en su subdominio.

D) Después de conocer los nodos de la frontera interior, cada objeto *RectSub* calcula las matrices locales sin realizar comunicación alguna. Al terminar de calcular las matrices se avisa a la clase *DPMethod* de la finalización de los cálculos.

E) Mediante la comunicación de vectores del tamaño del número de nodos de la frontera interior entre la clase *DPMethod* y los objetos *RectSub*, se prepara todo lo necesario para empezar el método de CGM o GMRES y resolver el sistema lineal virtual.

F) Para aplicar el método de CGM o GMRES, en cada iteración se transmite un vector del tamaño del número de nodos de la frontera interior para que en cada objeto se realicen las operaciones pertinentes y resolver así el sistema algebraico asociado, esta comunicación se realiza de ida y vuelta entre la clase *DPMethod* y los objetos *RectSub* tantas veces como iteraciones haga el método. Resolviendo con esto los nodos de la frontera interior $\underline{u_\Gamma}_i$.

G) Al término de las iteraciones, se pasa la solución $\underline{u_\Gamma}_i$ de los nodos de la frontera interior que pertenecen a cada subdominio dentro de cada objeto *RectSub* para que se resuelvan los nodos locales al subdominio $\underline{u_\pi}^\alpha = -\left(\underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Pi}\right)^{-1} \underline{\underline{A}}^\alpha_{\Pi\Delta} \underline{u_\Gamma}^\alpha$, sin realizar comunicación alguna en el proceso, al concluir se avisa a la clase *DDM* de ello.

I) La clase *DPMethod* mediante un último mensaje avisa que se concluya el programa, terminado así el esquema Maestro-Esclavo.

Análisis de Comunicaciones Para hacer un análisis de las comunicaciones en una ecuación vectorial con C componentes, entre el nodo principal y los nodos esclavos en el método DVS es necesario conocer qué se trasmite

y su tamaño, es por ello que en la medida de lo posible se detallan las comunicaciones existentes —hay que hacer mención que entre los nodos esclavos no hay comunicación alguna—.

Tomando la descripción del algoritmo detallado anteriormente, en donde se supuso una partición del dominio Ω con una malla estructurada cartesiana en $n \times m$ —ó $n \times m \times o$ en tres dimensiones— para la malla gruesa y $r \times s$ —ó $r \times s \times t$— para la malla fina, las comunicaciones correspondientes a cada inciso son:

A) El nodo maestro transmite 2 coordenadas en dos —en tres– dimensiones correspondientes a la delimitación del subdominio.

B) $2 * (r + 1) * (s + 1) * C$ —ó $2 * (r + 1) * (s + 1) * (t + 1) * C$— coordenadas transmite cada subdominio al nodo maestro.

C) A lo más $n*m*2*(r+1)*(s+1)*C$ —ó $n*m*o*2*(r+1)*(s+1) * (t + 1) *C$— coordenadas son las de los nodos de la frontera interior, y sólo aquellas correspondientes a cada subdominio son trasmitidas por el nodo maestro a los subdominios en los esclavos siendo estas a lo más $2 * (n * m) * (r * s) * C$ —ó $2 * (n * m * o) * (r * s * t) * C$— coordenadas.

D) Sólo se envía un aviso de la conclusión del cálculo de las matrices.

E) A lo más $2*(r+1)*(s+1)*C$ —ó $2*(r+1)*(s+1)*(t+1)*C$— coordenadas son transmitidas a los subdominios en los nodos esclavos desde el nodo maestro y los nodos esclavos transmiten al nodo maestro esa misma cantidad información.

F) A lo más $2 * (r + 1) * (s + 1) * C$ —ó $2 * (r + 1) * (s + 1) * (t + 1) * C$— coordenadas son transmitidas a los subdominios en los nodos esclavos y estos retornan un número igual al nodo maestro por iteración del método de CGM o alguna variante de GMRES.

G) A lo más $2*(r+1)*(s+1)*C$ —ó $2*(r+1)*(s+1)*(t+1)*C$— valores de la solución de la frontera interior son transmitidas a los subdominios en los nodos esclavos desde el nodo maestro y cada objeto transmite un único aviso de terminación.

I) El nodo maestro manda un aviso a cada subdominio en los nodos esclavos para concluir con el esquema.

En todos los casos, la transmisión se realiza mediante paso de arreglos de enteros y números de punto flotante que varían de longitud pero siempre son cantidades pequeñas de estos y se transmiten en forma de bloque, por ello las comunicaciones son eficientes.

EDP Escalares como un Caso Particular de EDP Vectoriales En el caso de trabajar con ecuaciones escalares en dos o tres dimensiones con una malla estructurada cartesiana, en vez de ecuaciones vectoriales, todo el análisis anterior continua siendo válido y sólo es necesario tomar el número de componentes C igual a uno, manteniéndose la estructura del código intacta.

Esto le da robustez al código, pues permite trabajar con problemas escalares y vectoriales con un pequeño cambio en la estructura del programa, permitiendo resolver una gama más grande de problemas.

Tamaño de las Matrices Locales. Ahora, si se supone que el dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ es descompuesto con una malla estructurada cartesiana en una partición gruesa de $n \times m \times o$ subdominios Ω_α y cada subdominio Ω_α es descompuesto en una partición fina de $r \times s \times t$, con número de componentes igual a C, entonces el número de grados de libertad por subdominio es $(r+1)*(s+1)*(t+1)*C$. En la cual se usa un ordenamiento estandar en la numeración de los nodos dentro de cada subdominio

El número de nodos interiores es

$$N^I = (r-1)*(s-1)*(t-1) \tag{14.39}$$

el número de nodos primales, suponiendo que se usa restricción en los vértices es

$$N^\pi = (n-1)*(m-1)*(o-1) \tag{14.40}$$

y el número de nodos duales es a lo más

$$N^\Delta = 2*[((r-1)+(s-1))*(t-1)] \tag{14.41}$$

entonces se tiene que el tamaño y la estructura de cada una de las matrices locales

$$\underline{\underline{A}}^i_{II}, \underline{\underline{A}}^i_{I\pi}, \underline{\underline{A}}^i_{I\Delta}, \underline{\underline{A}}^i_{\pi I}, \underline{\underline{A}}^i_{\pi\pi}, \underline{\underline{A}}^i_{\pi\Delta}, \underline{\underline{A}}^i_{\Delta I}, \underline{\underline{A}}^i_{\Delta\pi} \text{ y } \underline{\underline{A}}^i_{\Delta\Delta}$$

generadas por la descomposición fina del subdominio será:

- $\underline{\underline{A}}^i_{II}$ es una matriz cuadrada de $N^I \times N^I$ nodos, con una estructura bandada

- $\underline{\underline{A}}^i_{I\pi}$ es una matriz rectangular de $N^I \times N^\pi$ nodos, con una estructura dispersa
- $\underline{\underline{A}}^i_{\pi I}$ es una matriz rectangular de $N^\pi \times N^I$ nodos, con una estructura dispersa y transpuesta de $\underline{\underline{A}}^i_{I\pi}$
- $\underline{\underline{A}}^i_{I\Delta}$ es una matriz rectangular de $N^I \times N^\Delta$ nodos, con una estructura dispersa
- $\underline{\underline{A}}^i_{\Delta I}$ es una matriz rectangular de $N^\Delta \times N^I$ nodos, con una estructura dispersa y transpuesta de $\underline{\underline{A}}^i_{I\Delta}$
- $\underline{\underline{A}}^i_{\pi\Delta}$ es una matriz rectangular de $N^\pi \times N^\Delta$ nodos, con una estructura dispersa
- $\underline{\underline{A}}^i_{\Delta\pi}$ es una matriz rectangular de $N^\pi \times N^\Delta$ nodos, con una estructura dispersa y transpuesta de $\underline{\underline{A}}^i_{\pi\Delta}$
- $\underline{\underline{A}}^i_{\pi\pi}$ es una matriz cuadrada de $N^\pi \times N^\pi$ nodos, con una estructura bandada
- $\underline{\underline{A}}^i_{\Delta\Delta}$ es una matriz cuadrada de $N^\Delta \times N^\Delta$ nodos, con una estructura bandada

Para información sobre la estructura de las matrices bandadas véase la sección (11.4.1) y para matrices dispersas véase la sección (11.4.2).

15 Apéndice F: El Cómputo en Paralelo

Los sistemas de cómputo con procesamiento en paralelo surgen de la necesidad de resolver problemas complejos en un tiempo razonable, utilizando las ventajas de memoria, velocidad de los procesadores, formas de interconexión de estos y distribución de la tarea, a los que en su conjunto denominamos arquitectura en paralelo. Entenderemos por una arquitectura en paralelo a un conjunto de procesadores interconectados capaces de cooperar en la solución de un problema.

Así, para resolver un problema en particular, se usa una arquitectura o combinación de múltiples arquitecturas (topologías), ya que cada una ofrece ventajas y desventajas que tienen que ser sopesadas antes de implementar la solución del problema en una arquitectura en particular. También es necesario conocer los problemas a los que se enfrenta un desarrollador de programas que se desean correr en paralelo, como son: el partir eficientemente un problema en múltiples tareas y como distribuir estas según la arquitectura en particular con que se trabaje.

15.1 Arquitecturas de Software y Hardware

En esta sección se explican en detalle las dos clasificaciones de computadoras más conocidas en la actualidad. La primera clasificación, es la clasificación clásica de Flynn en dónde se tienen en cuenta sistemas con uno o varios procesadores, la segunda clasificación es moderna en la que sólo se tienen en cuenta los sistemas con más de un procesador.

El objetivo de esta sección es presentar de una forma clara los tipos de clasificación que existen en la actualidad desde el punto de vista de distintos autores, así como cuáles son las ventajas e inconvenientes que cada uno ostenta, ya que es común que al resolver un problema particular se usen una o más arquitecturas de Hardware interconectadas generalmente por red.

15.1.1 Clasificación de Flynn

Clasificación clásica de arquitecturas de computadoras que hace alusión a sistemas con uno o varios procesadores, Michael J. Flynn la publicó por primera vez en 1966 y por segunda vez en 1970.

Esta taxonomía se basa en el flujo que siguen los datos dentro de la máquina y de las instrucciones sobre esos datos. Se define como flujo de

instrucciones al conjunto de instrucciones secuenciales que son ejecutadas por un único procesador y como flujo de datos al flujo secuencial de datos requeridos por el flujo de instrucciones.

Con estas consideraciones, Flynn clasifica los sistemas en cuatro categorías:

Single Instruction stream, Single Data stream (SISD) Los sistemas Monoprocesador de este tipo se caracterizan por tener un único flujo de instrucciones sobre un único flujo de datos, es decir, se ejecuta una instrucción detrás de otra. Este es el concepto de arquitectura serie de Von Neumann donde, en cualquier momento, sólo se ejecuta una única instrucción, un ejemplo de estos sistemas son las máquinas secuenciales convencionales.

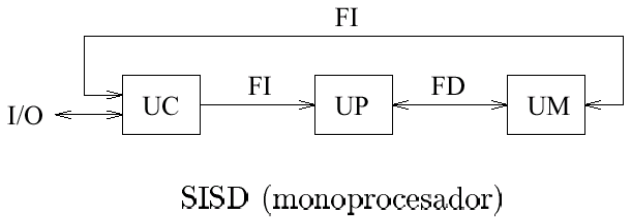


Figura 36: Ejemplo de máquina SISD

Single Instruction stream, Multiple Data stream (SIMD) Estos sistemas de procesador Maticial tienen un único flujo de instrucciones que operan sobre múltiples flujos de datos. Ejemplos de estos sistemas los tenemos en las máquinas vectoriales con Hardware escalar y vectorial.

El procesamiento es síncrono, la ejecución de las instrucciones sigue siendo secuencial como en el caso anterior, todos los elementos realizan una misma instrucción pero sobre una gran cantidad de datos. Por este motivo existirá concurrencia de operación, es decir, esta clasificación es el origen de la máquina paralela.

El funcionamiento de este tipo de sistemas es el siguiente. La unidad de control manda una misma instrucción a todas las unidades de proceso (ALUs). Las unidades de proceso operan sobre datos diferentes pero con la misma instrucción recibida.

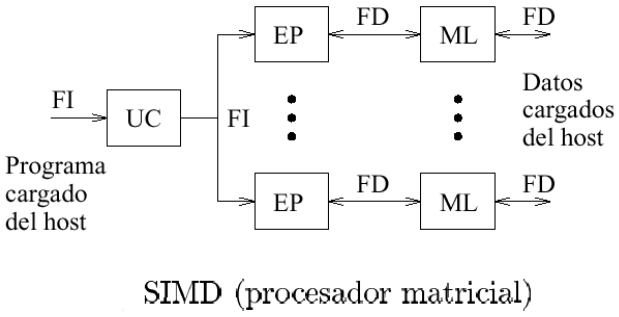


Figura 37: Ejemplo de máquina SIMD

Existen dos alternativas distintas que aparecen después de realizarse esta clasificación:

- Arquitectura Vectorial con segmentación, una CPU única particionada en unidades funcionales independientes trabajando sobre flujos de datos concretos.
- Arquitectura Matricial (matriz de procesadores), varias ALUs idénticas a las que el procesador da instrucciones, asigna una única instrucción pero trabajando sobre diferentes partes del programa.

Multiple Instruction stream, Single Data stream (MISD) Sistemas con múltiples instrucciones Array Sistólico que operan sobre un único flujo de datos. Este tipo de sistemas no ha tenido implementación hasta hace poco tiempo.

Los sistemas MISD se contemplan de dos maneras distintas:

- Varias instrucciones operando simultáneamente sobre un único dato.
- Varias instrucciones operando sobre un dato que se va convirtiendo en un resultado que será la entrada para la siguiente etapa. Se trabaja de forma segmentada, todas las unidades de proceso pueden trabajar de forma concurrente.

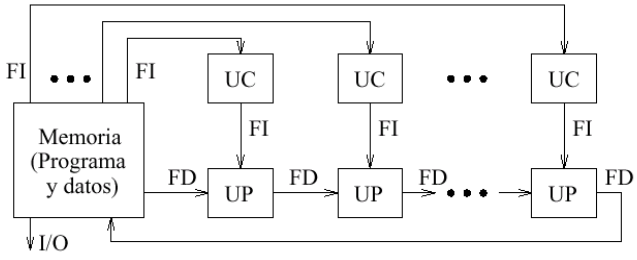


Figura 38: Ejemplo de máquina MISD

Multiple Instruction stream, Multiple Data stream (MIMD) Sistemas con un flujo de múltiples instrucciones Multiprocesador que operan sobre múltiples datos. Estos sistemas empezaron a utilizarse antes de la década de los 80s. Son sistemas con memoria compartida que permiten ejecutar varios procesos simultáneamente (sistema multiprocesador).

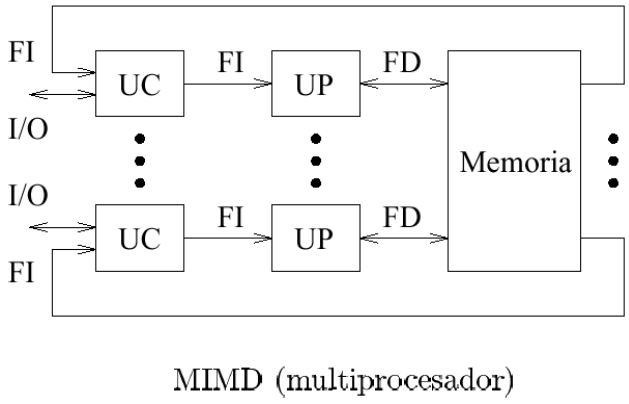


Figura 39: Ejemplo de máquina MIMD

Cuando las unidades de proceso reciben datos de una memoria no compartida estos sistemas reciben el nombre de MULTIPLE SISD (MSISD). En arquitecturas con varias unidades de control (MISD Y MIMD), existe otro nivel superior con una unidad de control que se encarga de controlar todas las

unidades de control del sistema —ejemplo de estos sistemas son las máquinas paralelas actuales—.

15.2 Categorías de Computadoras Paralelas

Clasificación moderna que hace alusión única y exclusivamente a los sistemas que tienen más de un procesador (i.e máquinas paralelas). Existen dos tipos de sistemas teniendo en cuenta su acoplamiento:

- Los sistemas fuertemente acoplados son aquellos en los que los procesadores dependen unos de otros.
- Los sistemas débilmente acoplados son aquellos en los que existe poca interacción entre los diferentes procesadores que forman el sistema.

Atendiendo a esta y a otras características, la clasificación moderna divide a los sistemas en dos tipos: Sistemas multiprocesador (fuertemente acoplados) y sistemas multicomputadoras (débilmente acoplados).

15.2.1 Equipo Paralelo de Memoria Compartida

Un multiprocesador puede verse como una computadora paralela compuesta por varios procesadores interconectados que comparten un mismo sistema de memoria.

Los sistemas multiprocesadores son arquitecturas MIMD con memoria compartida. Tienen un único espacio de direcciones para todos los procesadores y los mecanismos de comunicación se basan en el paso de mensajes desde el punto de vista del programador.

Dado que los multiprocesadores comparten diferentes módulos de memoria, pueden acceder a un mismo módulo varios procesadores, a los multiprocesadores también se les llama sistemas de memoria compartida.

Para hacer uso de la memoria compartida por más de un procesador, se requiere hacer uso de técnicas de semáforos que mantienen la integridad de la memoria; esta arquitectura no puede crecer mucho en el número de procesadores interconectados por la saturación rápida del bus o del medio de interconexión.

Dependiendo de la forma en que los procesadores comparten la memoria, se clasifican en sistemas multiprocesador UMA, NUMA, COMA y Pipeline, que explicamos a continuación:

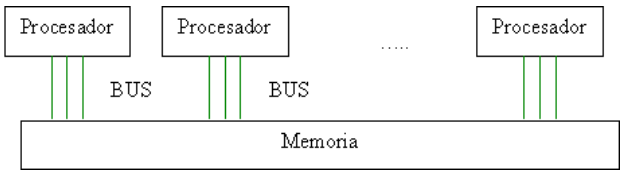


Figura 40: Arquitectura de una computadora paralela con memoria compartida

Uniform Memory Access (UMA) Sistema multiprocesador con acceso uniforme a memoria. La memoria física es uniformemente compartida por todos los procesadores, esto quiere decir que todos los procesadores tienen el mismo tiempo de acceso a todas las palabras de la memoria. Cada procesador tiene su propia caché privada y también se comparten los periféricos.

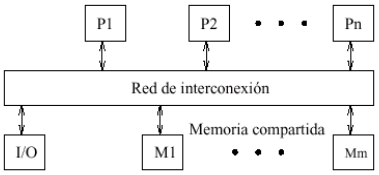


Figura 41: Acceso Uniforme a la memoria UMA

Los multiprocesadores son sistemas fuertemente acoplados (tightly-coupled), dado el alto grado de compartición de los recursos (Hardware o Software) y el alto nivel de interacción entre procesadores, lo que hace que un procesador dependa de lo que hace otro.

El sistema de interconexión debe ser rápido y puede ser de uno de los siguientes tipos: bus común, red Crossbar[62] y red Multietapa. Este modelo es conveniente para aplicaciones de propósito general y de tiempo compartido por varios usuarios, existen dos categorías de sistemas UMA.

- Sistema Simétrico

  Cuando todos los procesadores tienen el mismo tiempo de acceso a todos los componentes del sistema (incluidos los periféricos),

[62] Red reconfigurable que permite la conexión de cada entrada con cualquiera de las salidas, es decir, permite cualquier permutación.

reciben el nombre de sistemas multiprocesador simétrico. Los procesadores tienen el mismo dominio (prioridad) sobre los periféricos y cada procesador tiene la misma capacidad para procesar.

- Sistema Asimétrico

  Los sistemas multiprocesador asimétrico, son sistemas con procesadores maestros y procesadores esclavos, en donde sólo los primeros pueden ejecutar aplicaciones y dónde en tiempo de acceso para diferentes procesadores no es el mismo. Los procesadores esclavos (attached) ejecutan código usuario bajo la supervisión del maestro, por lo tanto cuando una aplicación es ejecutada en un procesador maestro dispondrá de una cierta prioridad.

Non Uniform Memory Access (NUMA) Un sistema multiprocesador NUMA es un sistema de memoria compartida donde el tiempo de acceso varía según donde se encuentre localizado el acceso.

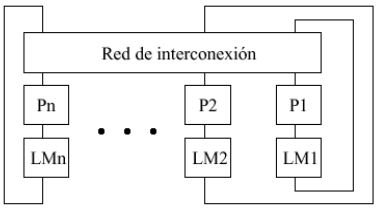


Figura 42: Acceso no uniforme a la memoria NUMA

El acceso a memoria, por tanto, no es uniforme para diferentes procesadores, existen memorias locales asociadas a cada procesador y estos pueden acceder a datos de su memoria local de una manera más rápida que a las memorias de otros procesadores, debido a que primero debe aceptarse dicho acceso por el procesador del que depende el módulo de memoria local.

Todas las memorias locales conforman la memoria global compartida y físicamente distribuida y accesible por todos los procesadores.

Cache Only Memory Access (COMA) Los sistemas COMA son un caso especial de los sistemas NUMA. Este tipo de sistemas no ha tenido mucha trascendencia, al igual que los sistemas SIMD.

Las memorias distribuidas son memorias cachés, por este motivo es un sistema muy restringido en cuanto a la capacidad de memoria global. No hay jerarquía de memoria en cada módulo procesador. Todas las cachés forman un mismo espacio global de direcciones. El acceso a las cachés remotas se realiza a través de los directorios distribuidos de las cachés.

Dependiendo de la red de interconexión utilizada, se pueden utilizar jerarquías en los directorios para ayudar a la localización de copias de bloques de caché.

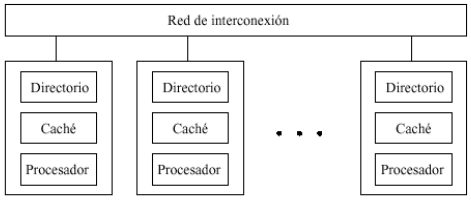


Figura 43: Ejemplo de COMA

Procesador Vectorial Pipeline En la actualidad es común encontrar en un solo procesador los denominados Pipeline o Procesador Vectorial Pipeline del tipo MISD. En estos procesadores los vectores fluyen a través de las unidades aritméticas Pipeline.

Las unidades constan de una cascada de etapas de procesamiento compuestas de circuitos que efectúan operaciones aritméticas o lógicas sobre el flujo de datos que pasan a través de ellas, las etapas estan separadas por registros de alta velocidad usados para guardar resultados intermedios. Así la información que fluye entre las etapas adyacentes esta bajo el control de un reloj que se aplica a todos los registros simultáneamente.

15.2.2 Equipo Paralelo de Memoria Distribuida

Los sistemas multicomputadoras se pueden ver como una computadora paralela en el cual cada procesador tiene su propia memoria local. En estos sistemas la memoria se encuentra distribuida y no compartida como en los sistemas multiprocesador. Los procesadores se comunican a través de paso de mensajes, ya que estos sólo tienen acceso directo a su memoria local y no a las memorias del resto de los procesadores.

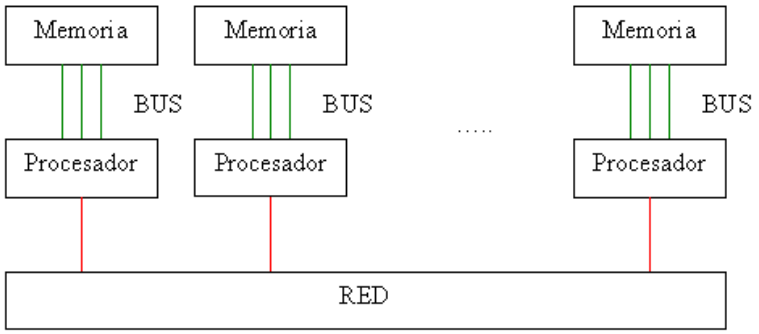


Figura 44: Arquitectura de una computadora paralela con memoria distribuida

La transferencia de los datos se realiza a través de la red de interconexión que conecta un subconjunto de procesadores con otro subconjunto. La transferencia de unos procesadores a otros se realiza por múltiples transferencias entre procesadores conectados dependiendo del establecimiento de dicha red.

Dado que la memoria esta distribuida entre los diferentes elementos de proceso, estos sistemas reciben el nombre de distribuidos. Por otra parte, estos sistemas son débilmente acoplados, ya que los módulos funcionan de forma casi independiente unos de otros. Este tipo de memoria distribuida es de acceso lento por ser peticiones a través de la red, pero es una forma muy efectiva de tener acceso a un gran volumen de memoria.

15.2.3 Equipo Paralelo de Memoria Compartida-Distribuida

La tendencia actual en las máquinas paralelas es de aprovechar las facilidades de programación que ofrecen los ambientes de memoria compartida y la escalabilidad de los ambientes de memoria distribuida. En este modelo se conectan entre sí módulos de multiprocesadores, pero se mantiene la visión global de la memoria a pesar de que es distribuida.

Clusters El desarrollo de sistemas operativos y compiladores del dominio público (Linux y Software GNU), estandares para interfaz de paso de mensajes (Message Passing Interface MPI), conexión universal a periféricos (Periferial Component Interconnect PCI), entre otros, han hecho posible

tomar ventaja de los recursos económicos computacionales de producción masiva (procesadores, discos, redes).

La principal desventaja que presenta a los proveedores de multicomputadoras es que deben satisfacer una amplia gama de usuarios, es decir, deben ser generales. Esto aumenta los costos de diseños y producción de equipos, así como los costos de desarrollo de Software que va con ellos: sistema operativo, compiladores y aplicaciones. Todos estos costos deben ser añadidos cuando se hace una venta. Por supuesto alguien que sólo necesita procesadores y un mecanismo de pase de mensajes no debería pagar por todos estos añadidos que nunca usará. Estos usuarios son los que estan impulsando el uso de Clusters principalmente de computadoras personales (PC), cuya arquitectura se muestra a continuación:

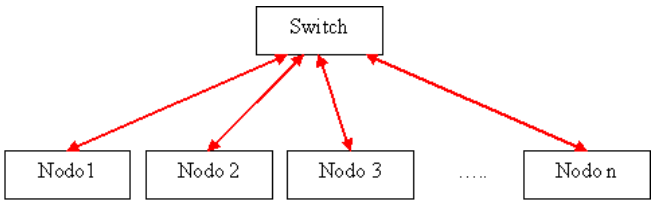


Figura 45: Arquitectura de un cluster

Los Cluster se pueden clasificar en dos tipos según sus características físicas:

- Cluster homogéneo: si todos los procesadores y/o nodos participantes en el equipo paralelo son iguales en capacidad de cómputo —en la cual es permitido variar la cantidad de memoria o disco duro en cada procesador—
- Cluster heterogéneo: es aquel en que al menos uno de los procesadores y/o nodos participantes en el equipo paralelo son de distinta capacidad de cómputo

Los Clusters pueden formarse de diversos equipos; los más comunes son los de computadoras personales, pero es creciente el uso de computadoras multiprocesador de más de un procesador de memoria compartida interconectados por red con los demás nodos del mismo tipo, incluso el uso de computadoras multiprocesador de procesadores vectoriales Pipeline. Los Clusters armados

con la configuración anterior tienen grandes ventajas para procesamiento paralelo:

- La reciente explosión en redes implica que la mayoría de los componentes necesarios para construir un Cluster son vendidos en altos volúmenes y por lo tanto son económicos. Ahorros adicionales se pueden obtener debido a que sólo se necesitará una tarjeta de vídeo, un monitor y un teclado por Cluster. El mercado de los multiprocesadores es más reducido y más costoso
- El remplazar un componente defectuoso en un Cluster es relativamente trivial comparado con hacerlo en un multiprocesador, permitiendo una mayor disponibilidad de Clusters cuidadosamente diseñados

Desventajas del uso de Clusters de computadoras personales para procesamiento paralelo:

- Con raras excepciones, los equipos de redes generales producidos masivamente no estan diseñados para procesamiento paralelo y típicamente su latencia es alta y los anchos de banda pequeños comparados con multiprocesadores. Dado que los Clusters explotan tecnología que sea económica, los enlaces en el sistema no son veloces implicando que la comunicación entre componentes debe pasar por un proceso de protocolos de negociación lentos, incrementando seriamente la latencia. En muchos y en el mejor de los casos (debido a costos) se recurre a una red tipo Fast Ethernet restringimiento la escalabilidad del Cluster
- Hay poco soporte de Software para manejar un Cluster como un sistema integrado
- Los procesadores no son tan eficientes como los procesadores usados en los multiprocesadores para manejar múltiples usuarios y/o procesos. Esto hace que el rendimiento de los Clusters se degrade con relativamente pocos usuarios y/o procesos
- Muchas aplicaciones importantes disponibles en multiprocesadores y optimizadas para ciertas arquitecturas, no lo estan en Clusters

Sin lugar a duda los Clusters presentan una alternativa importante para varios problemas particulares, no sólo por su economía, si no también porque pueden ser diseñados y ajustados para ciertas aplicaciones. Las aplicaciones que pueden sacar provecho de Clusters son en donde el grado de comunicación entre procesos es de bajo a medio.

Tipos de Cluster Básicamente existen tres tipo de Clusters, cada uno de ellos ofrece ventajas y desventajas, el tipo más adecuado para el cómputo científico es del de alto-rendimiento, pero existen aplicaciones científicas que pueden usar más de un tipo al mismo tiempo.

- Alta disponibilidad (Fail-over o High-Availability): este tipo de Cluster esta diseñado para mantener uno o varios servicios disponibles incluso a costa de rendimiento, ya que su función principal es que el servicio jamás tenga interrupciones como por ejemplo un servicio de bases de datos de transacciones bancarias
- Alto rendimiento (HPC o High Performance Computing): este tipo de Cluster esta diseñado para obtener el máximo rendimiento de la aplicación utilizada incluso a costa de la disponibilidad del sistema, es decir el Cluster puede sufrir caídas, este tipo de configuración esta orientada a procesos que requieran mucha capacidad de cálculo.
- Balanceo de Carga (Load-balancing): este tipo de Cluster esta diseñado para balancear la carga de trabajo entre varios servidores, lo que permite tener, por ejemplo, un servicio de cálculo intensivo multiusuarios que detecte tiempos muertos del proceso de un usuario para ejecutar en dichos tiempos procesos de otros usuarios.

Grids Son cúmulos (grupo de Clusters) de arquitecturas en paralelo interconectados por red, los cuales distribuyen tareas entre los Clusters que lo forman, estos pueden ser homogéneos o heterogéneos en cuanto a los nodos componentes del cúmulo. Este tipo de arquitecturas trata de distribuir cargas de trabajo acorde a las características internas de cada Cluster y las necesidades propias de cada problema, esto se hace a dos niveles, una en la parte de programación en conjunto con el balance de cargas y otra en la parte

de Hardware que tiene que ver con las características de cada arquitectura que conforman al cúmulo.

15.2.4 Cómputo Paralelo en Multihilos

En una computadora, sea secuencial o paralela, para aprovechar las capacidades crecientes del procesador, el sistema operativo divide su tiempo de procesamiento entre los distintos procesos, de forma tal que para poder ejecutar a un proceso, el kernel les asigna a cada uno una prioridad y con ello una fracción del tiempo total de procesamiento, de forma tal que se pueda atender a todos y cada uno de los procesos de manera eficiente.

En particular, en la programación en paralelo usando MPI, cada proceso —que eventualmente puede estar en distinto procesador— se lanza como una copia del programa con datos privados y un identificador del proceso único, de tal forma que cada proceso sólo puede compartir datos con otro proceso mediante paso de mensajes.

Esta forma de lanzar procesos por cada tarea que se desee hacer en paralelo es costosa, por llevar cada una de ellas toda una gama de subprocesos para poderle asignar recursos por parte del sistema operativo. Una forma más eficiente de hacerlo es que un proceso pueda generar bloques de subprocesos que puedan ser ejecutados como parte del proceso (como subtareas), así en el tiempo asignado se pueden atender a más de un subproceso de manera más eficiente, esto es conocido como programación multihilos.

Los hilos realizarán las distintas tareas necesarias en un proceso. Para hacer que los procesos funcionen de esta manera, se utilizan distintas técnicas que le indican al kernel cuales son las partes del proceso que pueden ejecutarse simultáneamente y el procesador asignará una fracción de tiempo exclusivo al hilo del tiempo total asignado al proceso.

Los datos pertenecientes al proceso pasan a ser compartidos por los subprocesos lanzados en cada hilo y mediante una técnica de semáforos el kernel mantiene la integridad de estos. Esta técnica de programación puede ser muy eficiente si no se abusa de este recurso, permitiendo un nivel más de paralelización en cada procesador. Esta forma de paralelización no es exclusiva de equipos multiprocesadores o multicomputadoras, ya que pueden ser implementados a nivel de sistema operativo.

15.2.5 Cómputo Paralelo en CUDA

Son las siglas de arquitectura unificada de dispositivos de cómputo (Compute Unified Device Architecture CUDA) que hace referencia a una plataforma de computación en paralelo incluyendo un compilador y un conjunto de herramientas de desarrollo que permiten a los programadores usar una variación del lenguaje de programación C —Por medio de Wrappers se puede usar Python, Fortran y Java en vez de C/C++— para codificar algoritmos en las unidades de procesamiento de gráficos (Graphics Processing Unit GPU).

CUDA intenta explotar las ventajas de las GPU frente a las CPU de propósito general utilizando el paralelismo que ofrecen sus múltiples núcleos, que permiten el lanzamiento de un altísimo número de hilos simultáneos. Por ello, si una aplicación esta diseñada utilizando numerosos hilos que realizan tareas independientes (que es lo que hacen las GPU al procesar gráficos, su tarea natural). Ahora, miles de desarrolladores, científicos e investigadores estan encontrando innumerables aplicaciones prácticas para esta tecnología en campos como el procesamiento de vídeo e imágenes, la biología y la química computacional, la simulación de la dinámica de fluidos, la reconstrucción de imágenes de Tomografía Axial Computarizada TAC, el análisis sísmico o el trazado de rayos, entre otros.

Procesamiento paralelo con CUDA Los sistemas informáticos estan pasando de realizar el «procesamiento central» en la CPU a realizar «coprocesamiento» repartido entre la CPU y la GPU. Para posibilitar este nuevo paradigma computacional, NVIDIA ha inventado la arquitectura de cálculo paralelo CUDA, que ahora se incluye en las GPUs GeForce, ION Quadro y Tesla GPUs, lo cual representa una base instalada considerable para los desarrolladores de aplicaciones.

CUDA ha sido recibida con entusiasmo por la comunidad científica. Por ejemplo, se esta utilizando para acelerar AMBER, un simulador de dinámica molecular empleado por más de 60.000 investigadores del ámbito académico y farmacéutico de todo el mundo para acelerar el descubrimiento de nuevos medicamentos. En el mercado financiero, Numerix y CompatibL introdujeron soporte de CUDA para una nueva aplicación de cálculo de riesgo de contraparte y, como resultado, se ha multiplicado por 18 la velocidad de la aplicación. Cerca de 400 instituciones financieras utilizan Numerix en la actualidad.

Un buen indicador de la excelente acogida de CUDA es la rápida adopción

de la GPU Tesla para aplicaciones de GPU Computing. En la actualidad existen más de 700 Clusters de GPUs instalados en compañías publicadas en Fortune 500 de todo el mundo, lo que incluye empresas como Schlumberger y Chevron en el sector energético o BNP Pariba en el sector bancario.

Por otra parte, la reciente llegada de los últimos sistemas operativos de Microsoft y Apple esta convirtiendo el GPU Computing en una tecnología de uso masivo. En estos nuevos sistemas, la GPU no actúa únicamente como procesador gráfico, sino como procesador paralelo de propósito general accesible para cualquier aplicación.

Plataforma de Cálculo Paralelo CUDA proporciona unas cuantas extensiones de C y C++ que permiten implementar el paralelismo en el procesamiento de tareas y datos con diferentes niveles de granularidad. El programador puede expresar ese paralelismo mediante diferentes lenguajes de alto nivel como C, C++ y Fortran o mediante estandares abiertos como las directivas de OpenACC —que es un estandar de programación para el cómputo en paralelo desarrollado por Cray, CAPS, Nvidia y PGI diseñado para simplificar la programación paralela de sistemas heterogéneos de CPU/GPU—. En la actualidad, la plataforma CUDA se utiliza en miles de aplicaciones aceleradas en la GPU y en miles de artículos de investigación publicados, en las áreas de:

- Bioinformática
- Cálculo financiero
- Dinámica de fluidos computacional (CFD)
- Ciencia de los datos, analítica y bases de datos
- Defensa e Inteligencia
- Procesamiento de imágenes y visión computarizadas
- EDA (diseño automatizado)
- Aprendizaje automático
- Ciencia de los materiales
- Medios audiovisuales y entretenimiento

- Imágenes médicas
- Dinámica molecular
- Análisis numérico
- Física
- Química cuántica
- Exploración sísmica
- Mecánica estructural computacional
- Visualización e interacción de proteínas
- Modelos meteorológicos y climáticos

Librerías aceleradas en la GPU:

- Thrust C++ Template
- cuBLAS
- cuSPARSE
- NPP
- cuFFT

Lenguajes de programación:

- CUDA C/C++
- CUDA Fortran
- Python
- .NET

Compiladores disponibles:

- OpenACC, paraleliza automáticamente los bucles de código Fortran o C utilizando directivas
- Compilador de autoparalelización de C y Fortran (de PGI) para CUDA C
- Compilador de autoparalelización HMPP de CAPS para CUDA C basado en C y Fortran
- Fortran
- Compilador de Fortran para CUDA de PGI
- Traductor de Fortran a C para CUDA
- FLAGON: librería de Fortran 95 para cálculo en la GPU
- Interfaz (Wrapper) de Python para CUDA: PyCUDA
- Wrapper de Java
- jCUDA: Java para CUDA
- Vínculos para las librerías BLAS y FFT de CUDA
- JaCUDA
- Integración de .NET para CUDA
- Thrust: librería de plantillas de C++ para CUDA
- CuPP : infraestructura de C++ para CUDA
- Libra: capa de abstracción de C/C++ para CUDA
- F# para CUDA
- Librería ArrayFire para acelerar el desarrollo de aplicaciones de GPU Computing en C, C++, Fortran y Python

Soporte de MATLAB, Mathematica, R, LabView:

- MATLAB
- MathWorks: Librerías MATLAB procesadas con GPUs NVIDIA
- Plugin Jacket basado en CUDA para MATLAB
- GPULib: librería de funciones matemáticas con vínculos para IDL y MATLAB
- Mathematica
- Programación con CUDA en Mathematica de Wolfram
- Plugin de Mathematica para CUDA
- Habilitación del GPU Computing en el entorno estadístico de R
- Librería CUDA para LabVIEW de National Instruments
- Formas de usar CUDA desde LabVIEW CVI

Además existen herramientas de productividad y clúster:

- Soporte de Eclipse para CUDA
- CUDA Occupancy Calculator
- Administrador de Clusters de cálculo para GPUs Tesla
- PBS Works para GPUs Tesla
- Scyld de Penguin Computing

15.3 Escalabilidad

Se entiende por escalabilidad a la capacidad de adaptación y respuesta de un sistema con respecto al rendimiento del mismo a medida que aumentan de forma significativa la carga computacional del mismo. Aunque parezca un concepto claro, la escalabilidad de un sistema es un aspecto complejo e importante del diseño.

La escalabilidad esta íntimamente ligada al diseño del sistema. Influye en el rendimiento de forma significativa. Si una aplicación esta bien diseñada, la escalabilidad no constituye un problema. Analizando la escalabilidad, se deduce de la implementación y del diseño general del sistema. No es atributo del sistema configurable.

La escalabilidad supone un factor crítico en el crecimiento de un sistema. Si un sistema tiene como objetivo crecer la carga computacional —en el número de usuarios o procesos— manteniendo su rendimiento actual, tiene que evaluar dos posibles opciones:

- Con un Hardware de mayor potencia o
- Con una mejor combinación de Hardware y Software

Se pueden distinguir dos tipos de escalabilidad, vertical y horizontal:

- El escalar verticalmente o escalar hacia arriba, significa el añadir más recursos a un solo nodo en particular dentro de un sistema, tal como el añadir memoria o un disco duro más rápido a una computadora.
- La escalabilidad horizontal, significa agregar más nodos a un sistema, tal como añadir una computadora nueva a un programa de aplicación para espejo.

Escalabilidad Vertical El escalar hacia arriba de un sistema viene a significar una migración de todo el sistema a un nuevo Hardware que es más potente y eficaz que el actual. Una vez se ha configurado el sistema futuro, se realizan una serie de validaciones y copias de seguridad y se pone en funcionamiento. Las aplicaciones que esten funcionando bajo la arquitectura Hardware antigua no sufren con la migración, el impacto en el código es mínimo.

Este modelo de escalabilidad tiene un aspecto negativo. Al aumentar la potencia en base a ampliaciones de Hardware, llegara un momento que

existirá algún tipo de limitación de Hardware. Además a medida que se invierte en Hardware de muy altas prestaciones, los costos se disparan tanto de forma temporal —ya que si se ha llegado al umbral máximo, hay componentes de Hardware que tardan mucho tiempo en ampliar su potencia de forma significativa— como económicos. Sin embargo a nivel estructural no supone ninguna modificación reseñable, lo que la convierte en una buena opción si los costos anteriores son asumibles.

Escalabilidad Horizontal La escalabilidad horizontal consiste en potenciar el rendimiento del sistema desde un aspecto de mejora global, a diferencia de aumentar la potencia de una única parte del mismo. Este tipo de escalabilidad se basa en la modularidad de su funcionalidad. Por ello suele estar conformado por una agrupación de equipos que dan soporte a la funcionalidad completa. Normalmente, en una escalabilidad horizontal se añaden equipos para dar mas potencia a la red de trabajo.

Con un entorno de este tipo, es lógico pensar que la potencia de procesamiento es directamente proporcional al número de equipos de la red. El total de la potencia de procesamiento es la suma de la velocidad física de cada equipo transferida por la partición de aplicaciones y datos extendida a través de los nodos.

Si se aplica un modelo de escalabilidad basado en la horizontalidad, no existen limitaciones de crecimiento a priori. Como principal defecto, este modelo de escalabilidad supone una gran modificación en el diseño, lo que conlleva a una gran trabajo de diseño y reimplantación. Si la lógica se ha concebido para un único servidor, es probable que se tenga que estructurar el modelo arquitectónico para soportar este modelo de escalabilidad.

El encargado de como realizar el modelo de partición de datos en los diferentes equipos es el desarrollador. Existen dependencias en el acceso a la aplicación. Es conveniente, realizar una análisis de actividad de los usuarios para ir ajustando el funcionamiento del sistema. Con este modelo de escalabilidad, se dispone de un sistema al que se pueden agregar recursos de manera casi infinita y adaptable al crecimiento de cargas de trabajo y nuevos usuarios.

La escalabilidad cuenta como factor crítico en el crecimiento de usuarios. Es mucho más sencillo diseñar un sistema con un número constante de usuarios —por muy alto que sea este— que diseñar un sistema con un número creciente y variable de usuarios. El crecimiento relativo de los números es

mucho más importante que los números absolutos.

Balance de carga A la hora de diseñar un sistema con compartición de recursos, es necesario considerar como balancear la carga de trabajo. Se entiende este concepto, como la técnica usada para dividir el trabajo a compartir entre varios procesos, ordenadores, u otros recursos. Esta muy relacionada con lo sistemas multiprocesales, que trabajan o pueden trabajar con mas de una unidad para llevar a cabo su funcionalidad. Para evitar los cuellos de botella, el balance de la carga de trabajo se reparte de forma equitativa a través de un algoritmo que estudia las peticiones del sistema y las redirecciona a la mejor opción.

Balance de Carga por Hardware Presenta las siguientes características:

- A partir de un algoritmo de planificación de procesos —Round Robin, LRU—, examina las peticiones HTTP entrantes y selecciona el más apropiado entre los distintos clones del sistema
- La selección del clon del sistema esta basada en el algoritmo de sustitución y es aleatoria
- Esto último punto provoca problemas en el diseño, ya que no garantiza que si un usuario realiza varias peticiones sean atendidas por el mismo clon del sistema. Por lo tanto, no hay mantenimiento de la sesión del usuario en servidor y condiciona el diseño
- La sesión debe de ser mantenida por el desarrollador
- Al ser un proceso de Hardware, es muy rápido

Balance de carga por Sotfware Presenta las siguientes características:

- Examinan el paquete a nivel del protocolo HTTP para garantizar el mantenimiento de la sesión de usuario
- Distintas peticiones del mismo usuario son servidas por el mismo clon del servidor
- Más lentos que los balanceadores de Hardware
- Normalmente son soluciones baratas

Cluster sobre servidores El concepto de Clustering introduce la capacidad de unir varios servidores para que trabajen en un entorno en paralelo. Es decir, trabajar como si fuera un solo servidor el existente. En las etapas primigenias del Clustering, los diseños presentaban graves problemas que se han ido subsanando con la evolución de este campo. Actualmente se pueden crear Clusters en función de las necesidades

- Unión de Hardware
- Clusters de Software
- Alto rendimiento de bases de datos

En resumen, Cluster es un grupo de múltiples ordenadores unidos mediante una red de alta velocidad, de tal forma que el conjunto es visto como un único equipo, más potente. Con ello se pretende mejorar los siguientes parámetros de la arquitectura:

- Alto rendimiento
- Alta disponibilidad
- Equilibrio de carga
- Escalabilidad

El Clustering no presenta dependencias a nivel de Hardware (no todos los equipos necesitan el mismo Hardware) ni a nivel de Software (no necesitan el mismo sistema operativo). Este tipo de sistemas disponen de una interfaz que permite dirigir el comportamiento de los Clusters. Dicha interfaz es la encargada de la interacción con usuarios y procesos, realizando la división de la carga entre los diversos servidores que compongan el Cluster.

Tipos de Cluster

Cluster Balanceado Este tipo de Cluster es capaz de repartir el tráfico entrante entre múltiples servidores corriendo las mismas aplicaciones. Todos los nodos del Cluster pueden aceptar y responder peticiones. Si un nodo falla, el tráfico se sigue repartiendo entre los nodos restantes.

Alta Disponibilidad Enfocados a garantizar un servicio ininterrumpido, al duplicar toda la infraestructura e introducir sistemas de detección y reenrutamiento, en caso de fallo. El propósito de este tipo de Clusters es garantizar que si un nodo falla, los servicios y aplicaciones que estaban corriendo en ese nodo, sean trasladados de forma automática a un nodo que se encuentra en Stand-by. Este tipo de Cluster dispone de herramientas con capacidad para monitorizar los servidores o servicios caídos y automáticamente migrarlos a un nodo secundario para garantizar la disponibilidad del servicio. Los datos son replicados de forma periódica, o de ser posible en tiempo real, a los nodos en Stand-by.

15.4 Métricas de Desempeño

Las métricas de desempeño del procesamiento de alguna tarea en paralelo es un factor importante para medir la eficiencia y consumo de recursos al resolver una tarea con un número determinado de procesadores y recursos relacionados de la interconexión de estos.

Entre las métricas para medir desempeño en las cuales como premisa se mantiene fijo el tamaño del problema, destacan las siguientes: Factor de aceleración, eficiencia y fracción serial. Cada una de ellas mide algo en particular y sólo la combinación de estas dan un panorama general del desempeño del procesamiento en paralelo de un problema en particular en una arquitectura determinada al ser comparada con otras.

Factor de Aceleración (o Speed-Up) Se define como el cociente del tiempo que se tarda en completar el cómputo de la tarea usando un sólo procesador entre el tiempo que necesita para realizarlo en p procesadores trabajando en paralelo:

$$s = \frac{T(1)}{T(p)} \tag{15.1}$$

se asume que se usará el mejor algoritmo tanto para un solo procesador como para p procesadores.

Esta métrica en el caso ideal debería de aumentar de forma lineal al aumento del número de procesadores.

Eficiencia Se define como el cociente del tiempo que se tarda en completar el cómputo de la tarea usando un solo procesador entre el número de

procesadores multiplicado por el tiempo que necesita para realizarlo en p procesadores trabajando en paralelo:

$$e = \frac{T(1)}{pT(p)} = \frac{s}{p}. \tag{15.2}$$

Este valor será cercano a la unidad cuando el Hardware se este usando de manera eficiente, en caso contrario el Hardware será desaprovechado.

Fracción serial Se define como el cociente del tiempo que se tarda en completar el cómputo de la parte secuencial de una tarea entre el tiempo que se tarda el completar el cómputo de la tarea usando un solo procesador:

$$f = \frac{T_s}{T(1)} \tag{15.3}$$

pero usando la ley de Amdahl:

$$T(p) = T_s + \frac{T_p}{p}$$

y reescribiéndola en términos de factor de aceleración, obtenemos la forma operativa del cálculo de la fracción serial que adquiere la forma siguiente:

$$f = \frac{\frac{1}{s} - \frac{1}{p}}{1 - \frac{1}{p}}. \tag{15.4}$$

Esta métrica permite ver las inconsistencias en el balance de cargas, ya que su valor debierá de tender a cero en el caso ideal, por ello un incremento en el valor de f es un aviso de granularidad fina con la correspondiente sobrecarga en los procesos de comunicación.

Costo o Trabajo Se define el costo o trabajo de resolver un problema en paralelo como el producto del tiempo de cálculo en paralelo T_p por el número de procesadores usando p y se representa por:

$$C_p = p * T_p.$$

Aceleración y Eficiencia Relativa Cuando se trabaja en más de un equipo paralelo —supongamos con p y p' procesadores con $p \geq p'$— es común comparar el desempeño entre dichos equipos. Para ello se define la aceleración relativa como:

$$S_p^{p'} = \frac{T_{p'}}{T_p}$$

para $p \geq p'$, en la cual se espera que:

$$S_p^{p'} \simeq \frac{p}{p'}$$

y eficiencia relativa como:

$$E_p^{p'} = \frac{p'}{p} S_p^{p'} = \frac{p'}{p} \frac{T_{p'}}{T_p}.$$

Análisis de Rendimiento Usando Métricas Suponiendo un Cluster con 17 Cores o núcleos[63], se muestran una ejemplificación de las métricas para un problema de ejemplo:

Cores	Tiempo	Aceleración	Eficiencia	Frac. Ser.
1	5295			
3	2538	2.08	0.69	0.218
5	1391	3.80	0.76	0.078
9	804	6.58	0.73	0.045
17	441	12.00	0.70	0.025

Nótese que en todos los casos la fracción serial disminuye sustancialmente con el aumento del número de procesadores, pero la aceleración esta por debajo del valor esperado.

Suponiendo un Cluster A con 100 Cores y un Cluster B con 128 Cores, se muestra una ejemplificación de las métricas para un problema de ejemplo en ambos Clusters con los siguientes resultados:

[63] A cada procesador encapsulado se le llama Core o núcleo, logrando que la comunicación entre ellos se realiza de una forma más rápida a través de un bus interno integrado en la propia pastilla de silicio sin tener que recurrir por tanto al bus del sistema mucho más lento. Al contrario del caso de la tecnología HyperThreading, en este caso si tenemos todos los efectos de varias CPUS completamente independientes una por cada Core o núcleo.

Cores	Cluster A	Cluster B
16	9158 seg	ND
32	5178 seg	5937 seg
64	3647 seg	4326 seg
100	2661 seg	
128		2818 seg

Como se muestra en la tabla, en todos los casos el Cluster A usando como máximo 100 Cores obtiene un tiempo de cálculo inferior al que requiere Cluster B usando a lo más los 128 Cores.

Haciendo uso de las métricas de aceleración y eficiencia relativa[64] se tiene que para el Cluster B:

$$S_{128}^{32} = 5937/2818 = 2.10$$

donde lo esperado sería:

$$S_{128}^{32} = 32/128 = 4.00,$$

para el caso de la eficiencia:

$$E_{128}^{32} = (32/128) * (5937/2818) = 0.52.$$

En el caso del Cluster A se tiene que:

$$S_{100}^{16} = 9158/2661 = 3.44$$

donde lo esperado sería:

$$S_{100}^{16} = 16/100 = 6.35,$$

para el caso de la eficiencia:

$$E_{100}^{16} = (16/100) * (9158/2661) = 0.55.$$

Haciendo uso del mismo número de Cores base para el Cluster A que para Cluster B, se tiene que:

$$S_{100}^{32} = 5178/2661 = 1.94$$

[64] Aceleración relativa es $S_p^{p'} = \frac{T_{p'}}{T_p}$ para $p \geq p'$, en la cual se espera que $S_p^{p'} \simeq \frac{p}{p'}$ y eficiencia relativa es $E_p^{p'} = \frac{p'}{p} S_p^{p'} = \frac{p'}{p} \frac{T_{p'}}{T_p}$.

donde lo esperado sería:

$$S_{100}^{16} = 32/100 = 3.12,$$

para el caso de la eficiencia:

$$E_{100}^{16} = (32/100) * (5178/2661) = 0.62.$$

De todo lo anterior, se desprende que el Cluster A obtiene valores de una aceleración y eficiencias relativas ligeramente mejores que el Cluster B, pero esto no se refleja en la disminución de casi 6% del tiempo de ejecución y del uso de 28 Cores menos.

Además, el costo computacional[65]:

$$C_p = P * T_p,$$

que para el caso del Cluster B es:

$$C_{128} = 360,704$$

y en Cluster A es:

$$C_{100} = 266,100$$

que representa una disminución de 27%; además de un factor muy importante, el Cluster A tuvo un costo monetario mucho menor con respecto del Cluster B.

15.5 Programación de Cómputo de Alto Rendimiento

Hay muchas aplicaciones a las herramientas computacionales, pero nos interesan aquellas que permitan resolver problemas concomitantes en Ciencia e Ingeniería. Muchas de estas aplicaciones caen en lo que comúnmente se llama cómputo científico. La computación científica es el campo de estudio relacionado con la construcción de modelos matemáticos, técnicas numéricas para resolver problemas científicos y de ingeniería; y su respectiva implementación computacional. La solución de estos problemas genera un alto consumo de memoria, espacio de almacenamiento o tiempo de cómputo; por

[65] El costo o trabajo de resolver un problema en paralelo es el producto del tiempo de cálculo en paralelo T_p por el número de procesadores usando P y se representa por $C_p = P * T_p$.

ello nos interesa trabajar en computadoras que nos puedan satisfacer estas demandas.

La computación de alto rendimiento (véase **??**) —High performance Computing o HPC en inglés— es la agregación de potencia de cálculo para resolver problemas complejos en Ciencia e Ingeniería o gestión. Para lograr este objetivo, la computación de alto rendimiento se apoya en tecnologías computacionales como los Clusters, las supercomputadoras o la computación paralela. La mayoría de las ideas actuales de la computación distribuida se han basado en la computación de alto rendimiento.

La computación paralela o de alto rendimiento es una forma de cómputo en la que muchas instrucciones se ejecutan simultáneamente, operando sobre el principio de que problemas grandes, a menudo se pueden dividir en unos más pequeños, que luego son resueltos simultáneamente (en paralelo). Hay varias formas diferentes de computación paralela: paralelismo a nivel de bits, paralelismo a nivel de instrucción, paralelismo de datos y paralelismo de tareas. El paralelismo se ha empleado durante muchos años, sobre todo en la computación de altas prestaciones, pero el interés en ella ha crecido últimamente debido a las limitaciones físicas que impiden el aumento de la frecuencia. Como el consumo de energía –y por consiguiente la generación de calor– de las computadoras constituye una preocupación en los últimos años, la computación en paralelo se ha convertido en el paradigma dominante en la arquitectura de computadoras, principalmente en forma de procesadores multinúcleo.

Las computadoras paralelas pueden clasificarse según el nivel de paralelismo que admite su Hardware: equipos con procesadores multinúcleo y multiprocesador que tienen múltiples elementos de procesamiento dentro de una sola máquina, procesadores masivamente paralelos, Cluster y cúmulos de Clusters (Grids) que utilizan varios equipos para trabajar en la misma tarea. Muchas veces, para acelerar tareas específicas, se utilizan arquitecturas especializadas de computación en paralelo junto a procesadores tradicionales.

Existen múltiples vertientes en el cómputo en paralelo, algunas de ellas son:

- Cómputo en memoria compartida usando OpenMP
- Cómputo en memoria distribuida usando MPI

Como es de esperarse, los programas informáticos paralelos son más complejos y difíciles de escribir que los secuenciales, porque la concurrencia introduce nuevos tipos de errores de Software —por ello existe una creciente gama de herramientas que coadyuvan a mejorar la escritura, depuración y desempeño de los programas en paralelo—, pero la comunicación y sincronización entre diferentes subtareas son algunos de los mayores obstáculos para obtener un buen rendimiento del programa paralelo.

Actualmente, en muchos centros de cómputo es una práctica común usar directivas de compilación en equipos paralelos sobre programas escritos de forma secuencial, con la esperanza que sean puestos por el compilador como programas paralelos. Esto en la gran mayoría de los casos genera códigos poco eficientes, pese a que corren en equipos paralelos y pueden usar toda la memoria compartida de dichos equipos, el algoritmo ejecutado continua siendo secuencial en la gran mayoría del código.

Si la arquitectura paralela donde se implemente el programa es UMA de acceso simétrico, los datos serán accesados a una velocidad de memoria constante. En caso contrario, al acceder a un conjunto de datos es común que una parte de estos sean locales a un procesador (con un acceso del orden de nanosegundos), pero el resto de los datos deberán ser accesados mediante red (con acceso del orden de milisegundos), siendo esto muy costoso en tiempo de procesamiento.

Por lo anterior, si se cuenta con computadoras con memoria compartida o que tengan interconexión por bus, salvo en casos particulares no será posible explotar estas características eficientemente. Pero en la medida en que se adecuen los programas para usar bibliotecas y compiladores acordes a las características del equipo disponible —algunos de ellos sólo existen de manera comercial— la eficiencia aumentará de manera importante.

15.5.1 Programando con OpenMP para Memoria Compartida

OpenMP es una interfaz de programación de aplicaciones (API) para la programación multiproceso de memoria compartida en múltiples plataformas. Permite añadir concurrencia a los programas escritos en C, C++ y Fortran sobre la base del modelo de ejecución Fork-join. esta disponible en muchas arquitecturas, incluidas las plataformas de Unix, Linux y de Microsoft Windows. Se compone de un conjunto de directivas de compilador, rutinas de biblioteca, y variables de entorno que influyen en el comportamiento en tiempo de ejecución.

Definido conjuntamente por proveedores de Hardware y de Software, OpenMP es un modelo de programación portable y escalable que proporciona a los programadores una interfaz simple y flexible para el desarrollo de aplicaciones paralelas, para plataformas que van desde las computadoras de escritorio hasta supercomputadoras. Una aplicación construida con un modelo de programación paralela híbrido se puede ejecutar en un Cluster de computadoras utilizando OpenMP y MPI, o a través de las extensiones de OpenMP para los sistemas de memoria distribuida.

OpenMP se basa en el modelo *Fork-join*, paradigma que proviene de los sistemas Unix, donde una tarea muy pesada se divide en K hilos (Fork) con menor peso, para luego «recolectar» sus resultados al final y unirlos en un solo resultado (Join).

Cuando se incluye una directiva de compilador OpenMP esto implica que se incluye una sincronización obligatoria en todo el bloque. Es decir, el bloque de código se marcará como paralelo y se lanzarán hilos según las características que nos dé la directiva, y al final de ella habrá una barrera para la sincronización de los diferentes hilos (salvo que implícitamente se indique lo contrario con la directiva Nowait). Este tipo de ejecución se denomina *Fork-join*.

OpenMP también soporta el modelo de paralelismo de tareas. El equipo de hilos del bloque de código paralelo ejecuta las tareas especificadas dentro de dicho bloque. Las tareas permiten un paralelismo asíncrono. Desde la versión 4.0 lanzada en 2013 admite la especificación de dependencias entre tareas, relegando a la biblioteca de tiempo de ejecución de OpenMP el trabajo de planificar las tareas y ponerlas en ejecución. Los hilos de ejecución irán ejecutando las tareas a medida que estas esten disponibles (sus dependencias ya esten satisfechas). El uso de tareas da lugar a sincronización con una granularidad más fina. El uso de barreras no es estrictamente necesario, de manera que los hilos pueden continuar ejecutando tareas disponibles sin necesidad de esperar a que todo el equipo de hilos acabe un bloque paralelo. El uso de tareas con dependencias crea un grafo, pudiéndose aplicar propiedades de grafos a la hora de escoger tareas para su ejecución.

Salvo el uso de implementaciones de Hardware de la biblioteca de tiempo de ejecución OpenMP (p.ej. en una matriz de puertas programables FPGAs), los sobrecostes de las tareas es mayor, este sobrecoste ha de ser amortizado mediante el potencial paralelismo adicional que las tareas exponen.

Estructura del Programa en C++ Ejemplo de cálculo de Pi usando OpenMP:

```
#include <stdio.h>
// Indica si se carga lo referente a OpenMP
#ifdef _OPENMP
#include <omp.h>
int threads=omp_get_num_threads();
#else
int threads=0;
#endif
#define STEPCOUNTER 1000000000
int main (void)
{
  long i;
  double pi=0;
  printf("threads %d", threads);
#pragma omp parallel for reduction(+:pi)
  for (i=0; i < STEPCOUNTER; i++)
  {
    pi += 1.0/(i*4.0 +1.0);
    pi -= 1.0/(i*4.0 +3.0);
  }
  pi = pi*4.0;
  printf("PI = %2.16lf ",pi);
  return 0;
}
```

El compilador de OpenMP es el mismo que para los lenguajes C, C++ o Fortran respectivamente (véase **??**). Por ello, para usarlo en C++ en línea de comandos (véase **??**), instalamos el compilador g++, mediante:

```
# apt install g++
```

Así, para compilar con g++[66], sin usar OpenMP, usamos:

```
$ g++ pi.cpp -o pi
```

[66] Compilar fuentes en C++ solicitando que el ejecutable tenga el nombre *ejemp*:

Ejecutar midiendo el tiempo:

```
$ time ./pi
```

Ahora, usando el compilar para OpenMP usamos:

```
$ g++ -o pi -fopenmp pi.cpp
```

Indicar el número de hilos, por ejemplo 2:

```
$ export OMP_NUM_THREADS=2
```

Ejecutar:

```
$ time ./pi
```

Aprender a Programar en OpenMP en Múltiples Lenguajes En la red existen múltiples sitios especializados y una amplia bibliografía para aprender a programar cada uno de los distintos aspectos de OpenMP, nosotros hemos seleccionado diversos textos que ponemos a su disposición en:

http://132.248.182.159/acl/Herramientas/Lenguajes/OpenMP/

```
$ g++ *.cpp -o ejemp
```

para ejecutar el programa ya compilado midiendo el tiempo de ejecución:

```
$ time ./ejemp
```

en este caso no se usa ninguna directiva para optimizar el ejecutable generado. Para compilar usando diversas optimizaciones (O1, -O2 o -O3) usar por ejemplo:

```
$ g++ -O1 *.cpp
```

ahora ya se puede ver el resultado de las optimizaciones, para ejecutar el programa ya compilado usamos:

```
$ time ./a.out
```

15.5.2 Programando con MPI para Memoria Distribuida

Para poder intercomunicar dos o más Cores en una o en múltiples computadoras se usa la «interfaz de paso de mensajes (Message Passing Interface MPI)» (véase [19], [20], [73] y [21]), una biblioteca de comunicación para procesamiento en paralelo. MPI ha sido desarrollado como un estandar para el paso de mensajes y operaciones relacionadas.

Este enfoque es adoptado por usuarios e implementadores de bibliotecas, en el cual se proveen a los programas de procesamiento en paralelo de portabilidad y herramientas necesarias para desarrollar aplicaciones que puedan usar el cómputo paralelo de alto desempeño.

El modelo de paso de mensajes posibilita a un conjunto de procesos que tienen solo memoria local, la comunicación con otros procesos (usando Bus o red) mediante el envío y recepción de mensajes. Por definición el paso de mensajes posibilita transferir datos de la memoria local de un proceso a la memoria local de cualquier otro proceso que lo requiera.

En el modelo de paso de mensajes para equipos paralelos, los procesos se ejecutan en paralelo, teniendo direcciones de memoria separada para cada proceso, la comunicación ocurre cuando una porción de la dirección de memoria de un proceso es copiada mediante el envío de un mensaje dentro de otro proceso en la memoria local mediante la recepción del mismo.

Las operaciones de envío y recepción de mensajes es cooperativa y ocurre sólo cuando el primer proceso ejecuta una operación de envío y el segundo proceso ejecuta una operación de recepción, los argumentos base de estas funciones son:

- Para el que envía, la dirección de los datos a transmitir y el proceso destino al cual los datos se enviarán.
- Para el que recibe, debe tener la dirección de memoria donde se pondrán los datos recibidos, junto con la dirección del proceso que los envío.

Es decir:
Send(dir, lg, td, dest, etiq, com)

$\{dir, lg, td\}$ describe cuántas ocurrencias lg de elementos del tipo de dato td se transmitirán empezando en la dirección de memoria dir.

$\{des, etiq, com\}$ describe el identificador *etiq* de destino *des* asociado con la comunicación *com*.

Recv(dir, mlg, td, fuent, etiq, com, st)

$\{dir, lg, td\}$ describe cuántas ocurrencias *lg* de elementos del tipo de dato *td* se transmitirán empezando en la dirección de memoria *dir*.

$\{fuent, etiq, com, est\}$ describe el identificador *etiq* de la fuente *fuent* asociado con la comunicación *com* y el estado *est*.

El conjunto básico de directivas (en nuestro caso sólo se usan estas) en C++ de MPI son (véase [19] y [20]):

MPI::Init	Inicializa al MPI
MPI::COMM_WORLD.Get_size	Busca el número de procesos existentes
MPI::COMM_WORLD.Get_rank	Busca el identificador del proceso
MPI::COMM_WORLD.Send	Envía un mensaje
MPI::COMM_WORLD.Recv	Recibe un mensaje
MPI::Finalize	Termina al MPI

Estructura del Programa en C++ Ejemplo de Hola_Mundo en MPI:

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
int main(int argc, char *argv[])
{
int rank, size;
MPI_Init(&argc, &argv);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &size);
printf("Hola! Soy el %d de %d\n", rank, size);
MPI_Finalize();
return 0;
}
```

Otro ejemplo, para realizar una suma en MPI:

```
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <mpi.h>
using namespace std;
int main(int argc, char ** argv){
int mynode, totalnodes;
int sum = 0,startval,endval,accum;
MPI_Status status;
MPI_Init(&argc,&argv);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &totalnodes);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &mynode);
startval = 1000*mynode/totalnodes+1;
endval =1000*(mynode+1)/totalnodes;
for(int i=startval;i<=endval;i=i+1) sum = sum + i;
if(mynode!=0)
MPI_Send(&sum, 1, MPI_INT, 0, 1, MPI_COMM_WORLD);
else
for(int j=1;j<totalnodes;j=j+1){
MPI_Recv(&accum, 1, MPI_INT, j, 1,
MPI_COMM_WORLD, &status);
sum = sum + accum;
}
if(mynode == 0)
cout << "The sum from 1 to 1000 is: "<< sum << endl;
MPI_Finalize();
}
```

Existe una gran variedad de compiladores de MPI en línea de comandos (véase **??**), algunos disponibles en GNU/Linux Debian son instalados mediante:

```
# aptitude install lam-runtime xmpi libmpich-dev mpich mpi-
default-dev mpi-default-bin openmpi-bin valgrind-mpi
```

Para compilar y ejecutar es posible usar alguna de estas opciones:

mpic++, mpic++.openmpi, mpiexec.mpich, mpif90.openmpi, mpirun.lam, mpicc, mpicxx, mpiexec.openmpi, mpifort, mpirun.mpich, mpiCC, mpicxx.mpich, mpif77, mpifort.mpich, mpirun.openmpi, mpicc.mpich, mpicxx.openmpi, mpif77.mpich, mpifort.openmpi, mpitask, mpicc.openmpi, mpiexec, mpif77.openmpi, mpimsg, mpivars, mpiCC.openmpi, mpiexec.hydra, mpif90, mpipython, mpichversion, mpipython, mpiexec.lam, mpif90.mpich, mpirun

Por ejemplo, para compilar *ejemp.cpp* en *mpic++* solicitando que el ejecutable tenga el nombre *ejemp*, usamos:

```
$ mpic++ ejemp.cpp -o ejemp
```

en este caso no se uso ninguna opción de optimización en tiempo de compilación (véase **??**), se puede hacer uso de ellas (-O1, -O2 o -O3), mediante:

```
$ mpic++ -O3 ejemp.cpp -o ejemp
```

para ejecutar el programa ya compilado y medir el tiempo de ejecución (véase **??**):

```
$ time mpirun -np 4 ejemp
```

También podemos compilar *ejemp.c* en *mpicc* solicitando que el ejecutable tenga el nombre *ejemp*:

```
$ mpicc ejemp.cpp -o ejemp
```

en este caso no se uso ninguna opción de optimización en tiempo de compilación, se puede hacer uso de ellas (-O1, -O2 o -O3), mediante:

```
$ mpicc -O3 ejemp.c -o ejemp
```

para ejecutar el programa ya compilado, usamos:

```
$ mpirun -np 4 ejemp
```

Un último ejemplo, en el caso de usar *mpiCC.mpic* y *lamboot*, entoces es necesario compilar usando:

$ mpiCC.mpich -O2 ejemp.cpp -o ejemp -lm

iniciar ambiente de ejecución paralelo:

$ lamboot -v

correr usando 8 procesadores por ejemplo:

$ mpirun.mpich -np 8 ejemp

correr usando 4 procesadores segun lista *machines.lolb* por ejemplo:

$ mpirun.mpich -machinefile machines.lolb -np 5 ejemp

terminar ambiente de ejecución paralelo:

$ lamhalt -v

Observación 6 *Para que en la ejecución de MPI no pida la clave de usuario:*
$ ssh-keygen -t rsa
En cada pregunta responder con ENTER, para después copiar usando:
$ cp ~/.ssh/id_rsa.pub ~/.ssh/authorized_keys
Ojo: Si continúa pidiendo clave, es que esta instalado rsh o lsh.

Aprender a Programar en MPI en Múltiples Lenguajes En la red existen múltiples sitios especializados y una amplia bibliografía para aprender a programar cada uno de los distintos aspectos de MPI, nosotros hemos seleccionado diversos textos que ponemos a su disposición en:

http://132.248.182.159/acl/Herramientas/Lenguajes/MPI/

15.5.3 Esquema de Paralelización Maestro-Esclavo

El esquema de paralelización Maestro-Esclavo, permite sincronizar por parte del nodo maestro las tareas que se realizan en paralelo usando varios nodos esclavos, éste modelo puede ser explotado de manera eficiente si existe poca comunicación entre el maestro y el esclavo y los tiempos consumidos en realizar las tareas asignadas son mayores que los períodos involucrados en las comunicaciones para la asignación de dichas tareas. De esta manera se garantiza que la mayoría de los procesadores estarán trabajando de manera continua y existirán pocos tiempos muertos.

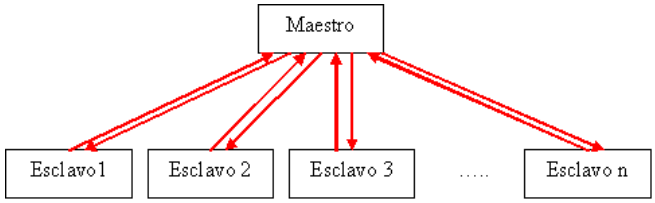


Figura 46: Esquema del maestro-esclavo

Donde, tomando en cuenta la implementación en estrella del Cluster, el modelo de paralelismo de MPI y las necesidades propias de comunicación del programa, el nodo maestro tendrá comunicación sólo con cada nodo esclavo y no existirá comunicación entre los nodos esclavos, esto reducirá las comunicaciones y optimizará el paso de mensajes.

Un factor limitante en este esquema es que el nodo maestro deberá de atender todas las peticiones hechas por cada uno de los nodos esclavos, esto toma especial relevancia cuando todos o casi todos los nodos esclavos compiten por ser atendidos por el nodo maestro.

Se recomienda implementar este esquema en un Cluster heterogéneo en donde el nodo maestro sea más poderoso computacionalmente que los nodos esclavos. Si a este esquema se le agrega una red de alta velocidad y de baja latencia, se le permitirá operar al Cluster en las mejores condiciones posibles, pero este esquema se verá degradado al aumentar el número de nodos esclavos inexorablemente.

Pero hay que ser cuidadosos en cuanto al número de nodos esclavos que se usan en la implementación en tiempo de ejecución versus el rendimiento general del sistema al aumentar estos, algunas observaciones posibles son:

- El esquema Maestro-Esclavo programado en C++ y usando MPI (véase 15.5.2) lanza P procesos (uno para el nodo maestro y $P-1$ para los nodos esclavos), estos en principio corren en un solo procesador pero pueden ser lanzados en múltiples procesadores usando una directiva de ejecución, de esta manera es posible que en una sola máquina se programe, depure y sea puesto a punto el código usando mallas pequeñas (del orden de cientos de nodos) y cuando este listo puede mandarse a producción en un Cluster.
- El esquema Maestro-Esclavo no es eficiente si sólo se usan dos procesadores (uno para el nodo maestro y otro para el nodo esclavo), ya que el nodo maestro en general no realiza los cálculos pesados y su principal función será la de distribuir tareas; los cálculos serán delegados al nodo esclavo.

Estructura del Programa Maestro-Esclavo La estructura del programa se realizo para que el nodo maestro mande trabajos de manera síncrona a los nodos esclavos. Cuando los nodos esclavos terminan la tarea asignada, avisan al nodo maestro para que se les asigne otra tarea (estas tareas son acordes a la etapa correspondiente del método de descomposición de dominio ejecutándose en un instante dado). En la medida de lo posible se trata de mandar paquetes de datos a cada nodo esclavo y que estos regresen también paquetes al nodo maestro, a manera de reducir las comunicaciones al mínimo y tratar de mantener siempre ocupados a los nodos esclavos para evitar los tiempos muertos, logrando con ello una granularidad gruesa, ideal para trabajar con Clusters.

La estructura básica del programa bajo el esquema Maestro-Esclavo codificada en C++ y usando MPI (véase 15.5.2) es:

```
main(int argc, char *argv[])
{
   MPI::Init(argc,argv);
   ME_id = MPI::COMM_WORLD.Get_rank();
   MP_np = MPI::COMM_WORLD.Get_size();
   if (ME_id == 0) {
     // Operaciones del Maestro
```

```
    } else {
      // Operaciones del esclavo con identificador ME_id
    }
    MPI::Finalize();
}
```

En este único programa se deberá de codificar todas las tareas necesarias para el nodo maestro y cada uno de los nodos esclavos, así como las formas de intercomunicación entre ellos usando como distintivo de los distintos procesos a la variable *ME_id*. Para más detalles de esta forma de programación y otras funciones de MPI (véase 15.5.2, [19] y [20]).

El principal factor limitante para el esquema Maestro-Esclavo es que se presupone contar con un nodo maestro lo suficientemente poderoso para atender simultáneamente las tareas síncronas del método, ya que este distribuye tareas acorde al número de nodos esclavos, estas si son balanceadas, ocasionaran que muchos de los procesadores esclavos terminen aproximadamente al mismo tiempo y el nodo maestro tendrá que atender múltiples comunicaciones simultáneamente, degradando su rendimiento al aumentar el número de nodos esclavos que atender. Para los factores limitantes inherente al propio esquema Maestro-Esclavo, es posible implementar algunas operaciones del nodo maestro en paralelo, ya sea usando equipos multiprocesador o en más de un nodo distinto a los nodos esclavos.

El número de procesadores P que se usen para resolver un dominio Ω y tener buen balance de cargas puede ser conocido si aplicamos el siguiente procedimiento: Si el dominio Ω se descompone en $n \times m$ subdominios (la partición gruesa), entonces se generarán $s = n * m$ subdominios Ω_i, en este caso, se tiene un buen balanceo de cargas si $(P-1) \mid s$. La partición fina se obtiene al descomponer a cada subdominio Ω_i en $p \times q$ subdominios.

Como ejemplo, supongamos que deseamos resolver el dominio Ω usando 81×81 nodos ($nodos = n*p+1$ y $nodos = m*q+1$), de manera inmediata nos surgen las siguientes preguntas: ¿cuales son las posibles descomposiciones validas? y ¿en cuantos procesadores se pueden resolver cada descomposición?. Para este ejemplo, sin hacer la tabla exhaustiva obtenemos:

Partición	Subdominios	Procesadores
1x2 y 80x40	2	2,3
1x4 y 80x20	5	2,5
1x5 y 80x16	6	2,6
2x1 y 40x80	2	2,3
2x2 y 40x40	4	2,3,5
2x4 y 40x20	8	2,3,5,9
2x5 y 40x16	10	2,3,6,11
2x8 y 40x10	16	2,3,5,9,17
4x1 y 20x80	4	2,3,5
4x2 y 20x40	8	2,3,5,9
4x4 y 20x20	16	2,3,5,9,17
4x5 y 20x16	20	2,3,5,6,11,21
5x1 y 16x80	5	2,6
5x2 y 16x40	10	2,3,6,11
5x4 y 16x20	20	2,3,5,6,11,21
5x5 y 16x16	25	2,6,26

De esta tabla es posible seleccionar (para este ejemplo en particular), las descomposiciones que se adecuen a las necesidades particulares del equipo con que se cuente. Sin embargo hay que tomar en cuenta siempre el número de nodos por subdominio de la partición fina, ya que un número de nodos muy grande puede que exceda la cantidad de memoria que tiene el nodo esclavo y un número pequeño estaría infrautilizando el poder computacional de los nodos esclavos. De las particiones seleccionadas se pueden hacer corridas de prueba para evaluar su rendimiento, hasta encontrar la que menor tiempo de ejecución consuma, maximizando así la eficiencia del equipo paralelo.

15.5.4 Opciones de Paralelización Híbridas

En la actualidad, casi todos los equipos de cómputo usados en estaciones de trabajo y Clusters cuentan con dos o más Cores, en ellos siempre es posible usar MPI para intercambiar mensajes entre procesos corriendo en el mismo equipo de cómputo, pero no es un proceso tan eficiente como se puede querer. En estas arquitecturas llamadas de memoria compartida es mejor usar OpenMP o cualquiera de sus variantes para trabajar en paralelo. Por otro lado es común contar con las cada vez más omnipresentes tarjetas NVIDIA, y con los cada vez más numerosos Cores CUDA —que una sola

tarjeta NVIDIA TESLA puede tener del orden de cientos de ellos— y que en un futuro serán cada vez más numerosos.

Para lograr obtener la mayor eficiencia posible de estos tres niveles de paralelización, se estan implementando procesos híbridos (véase [70] y [71]), en donde la intercomunicación de equipos con memoria compartida se realiza mediante MPI y la intercomunicación entre Cores que comparten la misma memoria se realiza con OpenMP, además las operaciones matriciales, vectoriales, etc. se le encargan a los numerosos Cores CUDA de las tarjetas NVIDIA.

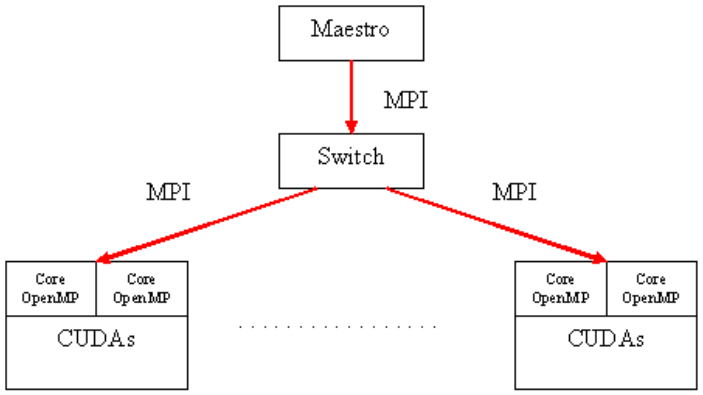


Figura 47: Paralelización Híbrida

Los métodos de descomposición de dominio sin traslape para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales concomitantes en Ciencias e Ingenierías pueden hacer uso de esta forma integradora de paralelismo. Para ello, la interconexión de equipos de memoria compartida se realizaría mediante MPI y en cada equipo de memoria compartida se manipularían uno o más subdominios mediante OpenMP —ya que cada subdominio es independiente de los demás— y la manipulación de matrices y operaciones entre matrices y vectores que requiere cada subdominio se realizarían en las tarjetas NVIDIA mediante los numerosos Cores CUDA sin salir a la RAM de la computadora.

Permitiendo así, tener una creciente eficiencia de paralelización que optimizan en gran medida los recursos computacionales, ya que todas las matrices y vectores se generarían en la RAM de la tarjeta NVIDIA. De forma tal que sea reutilizable y que pueda usarse en problemas en los que el número de grados de libertad sea grande, permitiendo hacer uso de equipos de cómputo

cada vez más asequibles y de menor costo, pero con una creciente eficiencia computacional que compiten con los grandes equipos de cómputo de alto desempeño.

16 Apéndice G: Implementación Computacional del Método de Diferencias Finitas para la Resolución de Ecuaciones Diferenciales Parciales

Existen diferentes paquetes y lenguajes de programación en los cuales se puede implementar eficientemente la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales mediante el método de Diferencias Finitas, en este capítulo se describe la implementación[67] en los paquetes de cómputo OCTAVE (MatLab), SciLab y en los lenguajes de programación C++, Python, Java, Mono (C#), Fortran y C.

Estos ejemplos y el presente texto se pueden descargar de la página WEB:

http://132.248.182.159/acl/MDF/

desde GitHub[68] (https://github.com/antoniocarrillo69/MDF) mediante:

git clone git://github.com/antoniocarrillo69/MDF.git

desde GitLab[69] (https://githlab.com/antoniocarrillo69/MDF) mediante:

git clone https://gitlab.com/antoniocarrillo69/MDF.git

16.1 Implementación en Octave (MatLab)

GNU OCTAVE[70] es un paquete de cómputo open source para el cálculo numérico —muy parecido a MatLab[71] pero sin costo alguno para el usuario— el cual provee un poderoso ambiente de cálculo para aplicaciones Científicas y de Ingeniería.

[67] En los ejemplos cuando es posible se definen matrices que minimizan la memoria usada en el almacenamiento y maximizan la eficiencia de los métodos numéricos de solución del sistema lineal asociado. En el caso de Octave (MatLab) se define a una matriz mediante A = zeros(N,N), esta puede ser remplazada por una matriz que no guarda valores innecesarios (ceros), esto se hace mediante la declaración de la matriz como A = sparse(N,N).

[68] GitHub es una plataforma de desarrollo colaborativo para alojar proyectos usando el sistema de control de versiones GIT.

[69] GitLab es una plataforma de desarrollo colaborativo para alojar proyectos usando el sistema de control de versiones GIT.

[70] GNU Octave [http://www.gnu.org/software/octave/]

[71] MatLab [http://www.mathworks.com/products/matlab/]

Ejemplo 16 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz densa queda implementado como:

```
function [A,b,x] = mdf1DDD(n)
  xi = 0.0; % Inicio de dominio
  xf = 1.0; % Fin de dominio
  vi = 1.0; % Valor en la forntera xi
  vf = -1.0; % Valor en la frontera xf
  N=n-2; % Nodos interiores
  h=(xf-xi)/(n-1); % Incremento en la malla
  A=zeros(N,N); % Matriz A
  b=zeros(N,1); % Vector b
  %Stencil
  R=1/(h^2);
  P=-2/(h^2);
  Q=1/(h^2);
  % Primer renglon de la matriz A y vector b
  A(1,1)=P;
  A(1,2)=Q;
  b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
  % Renglones intermedios de la matriz A y vector b
  for i=2:N-1
    A(i,i-1)=R;
    A(i,i)=P;
    A(i,i+1)=Q;
    b(i)=LadoDerecho(xi+h*(i));
  end
  % Relglon final de la matriz A y vector b
  A(N,N-1)=R;
  A(N,N)=P;
  b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
  % Resuleve el sistema lineal Ax=b
  x=Gauss(A,b,N,N*7);
  % Prepara la graficacion
  xx=zeros(n,1);
  zz=zeros(n,1);
```

```
    for i=1:n
      xx(i)=xi+h*(i-1);
      zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
    end
    yy=zeros(n,1);
    yy(1)=vi; % Condicion inicial
    for i=1:N
      yy(i+1)=x(i);
    end
    yy(n)=vf; % Condicion inicial
    % Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
    plot(xx,[yy,zz]);
    %plot(xx,zz);
    % Resuleve el sistema lineal Ax=b
    x=Jacobi(A,b,N,N*14);
    % Prepara la graficacion
    xx=zeros(n,1);
    zz=zeros(n,1);
    for i=1:n
      xx(i)=xi+h*(i-1);
      zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
    end
    yy=zeros(n,1);
    yy(1)=vi; % Condicion inicial
    for i=1:N
      yy(i+1)=x(i);
    end
     yy(n)=vf; % Condicion inicial
    % Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
    plot(xx,[yy,zz]);
  endfunction
  % Lado derecho de la ecuacion
  function y=LadoDerecho(x)
    y=-pi*pi*cos(pi*x);
  endfunction
  % Solucion analitica a la ecuacion
  function y=SolucionAnalitica(x)
    y=cos(pi*x);
```

```
endfunction
% Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
function x=Jacobi(A,b,N, iter)
  x=zeros(N,1);
  xt=zeros(N,1);
  for it = 1: iter
    for i = 1: N
      sum = 0.0;
      for j = 1: N
        if i == j
          continue;
        end
        sum = sum + A(i,j) * x(j);
      end
      xt(i) = (b(i) - sum) / A(i,i);
    end
     for i = 1: N
      x(i)=xt(i);
    end
  end
endfunction
% Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
function x=Gauss(A,b,N, iter)
  x=zeros(N,1);
  for it = 1: iter
    for i = 1: N
      sum = 0.0;
      for j = 1: N
        if i == j
          continue;
        end
        sum = sum + A(i,j) * x(j);
      end
      x(i) = (b(i) - sum) / A(i,i)
    end
  end
endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1DD.m**, entonces se puede ejecutar en la consola de OCTAVE (MatLab) mediante

$$[A, b, x] = fdm1DDD(11);$$

donde es necesario indicar el número de nodos (11) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz y los vectores A, b, x generados por la función.

Ejemplo 17 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
function [A,b,x] = mdf1DDDBand(n)
  xi = 0.0; % Inicio de dominio
  xf = 1.0; % Fin de dominio
  vi = 1.0; % Valor en la forntera xi
  vf = -1.0; % Valor en la frontera xf
  N=n-2; % Nodos interiores
  h=(xf-xi)/(n-1); % Incremento en la malla
  A=zeros(N,3); % Matriz A
  b=zeros(N,1); % Vector b
  % Stencil
  R=1/(h^2);
  P=-2/(h^2);
  Q=1/(h^2);
  % Primer renglon de la matriz A y vector b
  A(1,2)=P;
  A(1,3)=Q;
  b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
  % Renglones intermedios de la matriz A y vector b
  for i=2:N-1
    A(i,1)=R;
    A(i,2)=P;
    A(i,3)=Q;
    b(i)=LadoDerecho(xi+h*(i));
  end
```

```
% Relglon final de la matriz A y vector b
A(N,1)=R;
A(N,2)=P;
b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
% Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=Gauss(A,b,N,200);
% Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
   xx(i)=xi+h*(i-1);
   zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(n,1);
yy(1)=vi; % Condicion inicial
for i=1:N
   yy(i+1)=x(i);
end
 yy(n)=vf; % Condicion inicial
% Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot(xx,[yy,zz]);
%plot(xx,zz);
% Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=Jacobi(A,b,N,N*14);
 % Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
   xx(i)=xi+h*(i-1);
   zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(n,1);
yy(1)=vi; % Condicion inicial
for i=1:N
   yy(i+1)=x(i);
end
yy(n)=vf; % Condicion inicial
% Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
```

```
   plot(xx,[yy,zz]);
   %plot(xx,zz);
endfunction
% Lado derecho de la ecuacion
function y=LadoDerecho(x)
   y=-pi*pi*cos(pi*x);
endfunction
% Solucion analitica a la ecuacion
function y=SolucionAnalitica(x)
   y=cos(pi*x);
endfunction
% Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
function x=Jacobi(A,b,N,iter)
   x=zeros(N,1);
   xt=zeros(N,1);
   for it = 1: iter
      sum = A(1,3) * x(2);
      xt(1) = (1.0 / A(1,2)) * (b(1) - sum);
      for i = 2: N-1
         sum = A(i,1) * x(i-1) + A(i,3) * x(i+1);
         xt(i) = (1.0 / A(i,2)) * (b(i) - sum);
      end
      sum = A(N,1) * x(N-1);
      xt(N) = (1.0 / A(N,2)) * (b(N) - sum);
      for i = 1: N
         x(i)=xt(i);
      end
   end
endfunction
% Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
function x=Gauss(A,b,N,iter)
   x=zeros(N,1);
   for it = 1: iter
      sum = A(1,3) * x(2);
      x(1) = (1.0 / A(1,2)) * (b(1) - sum);
      for i = 2: N-1
         sum = A(i,1) * x(i-1) + A(i,3) * x(i+1);
         x(i) = (1.0 / A(i,2)) * (b(i) - sum);
```

```
    end
    sum = A(N,1) * x(N-1);
    x(N) = (1.0 / A(N,2)) * (b(N) - sum);
  end
endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1DDBand.m**, entonces se puede ejecutar en la consola de OCTAVE (MatLab) mediante

$$[A, b, x] = fdm1DDDBand(11);$$

donde es necesario indicar el número de nodos (11) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz y los vectores A, b, x generados por la función.

Dado que esta ecuación se puede extender a todo es espacio, entonces se puede reescribir así

Ejemplo 18 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad xi \leq x \leq xf, \qquad u(xi) = vi, \qquad u(xf) = xf$$

entonces el programa queda implementado como:

```
function [A,b,x] = fdm1d(xi,xf,vi,vf,n)
  N=n-2; % Nodos interiores
  h=(xf-xi)/(n-1); % Incremento en la malla
  A=zeros(N,N); % Matriz A
  b=zeros(N,1); % Vector b
  R=1/(h^2);
  P=-2/(h^2);
  Q=1/(h^2);
  % Primer renglon de la matriz A y vector b
  A(1,1)=P;
  A(1,2)=Q;
  b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
  % Renglones intermedios de la matriz A y vector b
  for i=2:N-1
```

```
    A(i,i-1)=R;
    A(i,i)=P;
    A(i,i+1)=Q;
    b(i)=LadoDerecho(xi+h*(i-1));
  end
  % Renglon final de la matriz A y vector b
  A(N,N-1)=R;
  A(N,N)=P;
  b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
  % Resuleve el sistema lineal Ax=b
  x=inv(A)*b;
  % Prepara la graficacion
  xx=zeros(n,1);
  zz=zeros(n,1);
  for i=1:n
    xx(i)=xi+h*(i-1);
    zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
  end
  yy=zeros(n,1);
  yy(1)=vi; % Condicion inicial
  for i=1:N
    yy(i+1)=x(i);
  end
  yy(n)=vf; % Condicion inicial
  % Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
  plot(xx,[yy,zz]);
endfunction
function y=LadoDerecho(x)
  y=-pi*pi*cos(pi*x);
endfunction
function y=SolucionAnalitica(x)
  y=cos(pi*x);
endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1d.m**, entonces se puede ejecutar en la consola de OCTAVE (MatLab) mediante

$$[A, b, x] = fdm1d(-1, 2, -1, 1, 30);$$

donde es necesario indicar el inicio (-1) y fin (2) del dominio, el valor de la condición de frontera de inicio (-1) y fin (1), además de el número de nodos (30) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz y los vectores A, b, x generados por la función.

16.2 Implementación en SciLab

Scilab[72] es un paquete de cómputo open source para el cálculo numérico el cual provee un poderoso ambiente de cálculo para aplicaciones Científicas y de Ingeniería.

Ejemplo 19 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

El programa usando matriz densa queda implementado como:

```
function [A,b,x] = mdf1DDD(n)
  xi = 0 // Inicio de dominio
  xf = 1; // Fin de dominio
  vi = 1; // Valor en la forntera xi
 vf = -1; // Valor en la frontera xf
  N=n-2; // Nodos interiores
  h=(xf-xi)/(n-1); // Incremento en la malla
  A=zeros(N,N); // Matriz A
  b=zeros(N,1); // Vector b
 // Stencil
 R=1/(h^2);
 P=-2/(h^2);
 Q=1/(h^2);
  // Primer renglon de la matriz A y vector b
 A(1,1)=P;
 A(1,2)=Q;
 b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
 // Renglones intermedios de la matriz A y vector b
 for i=2:N-1
    A(i,i-1)=R;
    A(i,i)=P;
    A(i,i+1)=Q;
    b(i)=LadoDerecho(xi+h*i);
 end
 // Renglon final de la matriz A y vector b
  A(N,N-1)=R;
```

[72] Scilab [http://www.scilab.org]

```
 A(N,N)=P;
b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=Gauss(A,b,N,N*14);
 // Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
   xx(i)=xi+h*(i-1);
   zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(n,1);
yy(1)=vi; // Condicion inicial
for i=1:N
   yy(i+1)=x(i);
end
yy(n)=vf; // Condicion inicial
// Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz]);
 // Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=Jacobi(A,b,N,N*7);
// Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
xx(i)=xi+h*(i-1);
zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
 yy=zeros(n,1);
yy(1)=vi; // Condicion inicial
for i=1:N
   yy(i+1)=x(i);
end
yy(n)=vf; // Condicion inicial
 // Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz]);
endfunction
// Lado derecho de la ecuacion
```

```
function y=LadoDerecho(x)
   y=-%pi*%pi*cos(%pi*x);
endfunction
// Solucion analitica a la ecuacion
function y=SolucionAnalitica(x)
   y=cos(%pi*x);
endfunction
// Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
function x=Jacobi(A,b,N, iter)
   x=zeros(N,1);
   xt=zeros(N,1);
   for it = 1: iter
      for i = 1: N
         sum = 0.0;
         for j = 1: N
            if i == j then
               continue;
            end
            sum = sum + A(i,j) * x(j);
         end
         xt(i) = (b(i) - sum) / A(i,i);
      end
      sw = 0;
      for i = 1: N
         x(i)=xt(i);
      end
   end
endfunction
// Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
function x=Gauss(A,b,N, iter)
   x=zeros(N,1);
   for it = 1: iter
      for i = 1: N
         sum = 0.0;
         for j = 1: N
            if i == j then
               continue;
            end
```

```
            sum = sum + A(i,j) * x(j);
          end
          x(i) = (b(i) - sum) / A(i,i);
        end
      end
    endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1DDD.sci**, entonces para poder ejecutar la función es necesario cargarla en la consola de SCILAB mediante

exec('./fdm1DDD.sci',-1)

para después ejecutar la función mediante:

$$[A, b, x] = fdm1DDD(11);$$

donde es necesario indicar el número de nodos (11) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz y los vectores A, b, x generados por la función.

Ejemplo 20 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

El programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
function [A,b,x] = mdf1DDDBand(n)
  xi = 0 // Inicio de dominio
  xf = 1; // Fin de dominio
  vi = 1; // Valor en la forntera xi
  vf = -1; // Valor en la frontera xf
  N=n-2; // Nodos interiores
  h=(xf-xi)/(n-1); // Incremento en la malla
  A=zeros(N,3); // Matriz A
  b=zeros(N,1); // Vector b
  // Stencil
  R=1/(h^2);
  P=-2/(h^2);
  Q=1/(h^2);
```

```
// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,2)=P;
A(1,3)=Q;
b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
   A(i,1)=R;
   A(i,2)=P;
   A(i,3)=Q;
   b(i)=LadoDerecho(xi+h*i);
end
// Renglon final de la matriz A y vector b
A(N,1)=R;
A(N,2)=P;
b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=Gauss(A,b,N,N*7);
 // Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
   xx(i)=xi+h*(i-1);
   zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(n,1);
yy(1)=vi; // Condicion inicial
for i=1:N
   yy(i+1)=x(i);
end
yy(n)=vf; // Condicion inicial
// Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz]);
// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=Jacobi(A,b,N,N*14);
// Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
```

```
    xx(i)=xi+h*(i-1);
    zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
  end
   yy=zeros(n,1);
  yy(1)=vi; // Condicion inicial
  for i=1:N
    yy(i+1)=x(i);
  end
  yy(n)=vf; // Condicion inicial
   // Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
  plot2d(xx,[yy,zz]);
endfunction
// Lado derecho de la ecuacion
function y=LadoDerecho(x)
  y=-%pi*%pi*cos(%pi*x);
endfunction
// Solucion analitica a la ecuacion
function y=SolucionAnalitica(x)
  y=cos(%pi*x);
endfunction
// Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
function x=Jacobi(A,b,N, iter)
  x=zeros(N,1);
  xt=zeros(N,1);
  for it = 1: iter
    sum = A(1,3) * x(2);
    xt(1) = (1.0 / A(1,2)) * (b(1) - sum);
    for i = 2: N-1
      sum = A(i,1) * x(i-1) + A(i,3) * x(i+1);
      xt(i) = (1.0 / A(i,2)) * (b(i) - sum);
    end
    sum = A(N,1) * x(N-1);
    xt(N) = (1.0 / A(N,2)) * (b(N) - sum);
    for i = 1: N
      x(i)=xt(i);
    end
  end
endfunction
```

```
// Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
function x=Gauss(A,b,N, iter)
  x=zeros(N,1);
  for it = 1: iter
    sum = A(1,3) * x(2);
    x(1) = (1.0 / A(1,2)) * (b(1) - sum);
    for i = 2: N-1
      sum = A(i,1) * x(i-1) + A(i,3) * x(i+1);
      x(i) = (1.0 / A(i,2)) * (b(i) - sum);
    end
    sum = A(N,1) * x(N-1);
    x(N) = (1.0 / A(N,2)) * (b(N) - sum);
  end
endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1DDDBand.sci**, entonces para poder ejecutar la función es necesario cargarla en la consola de SCILAB mediante

exec('./fdm1DDDBand.sci',-1)

para después ejecutar la función mediante:

$$[A, b, x] = fdm1DDDBand(11);$$

donde es necesario indicar el número de nodos (11) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz y los vectores A, b, x generados por la función.

Dado que esta escuación se puede extender a todo es espacio, entonces se puede reescribir así

Ejemplo 21 *Sea*

$$-u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad xi \leq x \leq xf, \qquad u(xi) = vi, \qquad u(xf) = vf$$

El programa queda implementado como:

```
function [A,b,x] = fdm1d(xi,xf,vi,vf,n)
  N=n-2; // Nodos interiores
```

```
h=(xf-xi)/(n-1); // Incremento en la malla
A=zeros(N,N); // Matriz A
b=zeros(N,1); // Vector b
R=1/(h^2);
P=-2/(h^2);
Q=1/(h^2);
// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,1)=P;
A(1,2)=Q;
b(1)=LadoDerecho(xi)-vi*R;
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
   A(i,i-1)=R;
   A(i,i)=P;
   A(i,i+1)=Q;
   b(i)=LadoDerecho(xi+h*(i-1));
end
// Renglon final de la matriz A y vector b
A(N,N-1)=R;
A(N,N)=P;
b(N)=LadoDerecho(xi+h*N)-vf*Q;
// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=inv(A)*b;
// Prepara la graficacion
xx=zeros(n,1);
zz=zeros(n,1);
for i=1:n
   xx(i)=xi+h*(i-1);
   zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(n,1);
yy(1)=vi; // Condicion inicial
for i=1:N
   yy(i+1)=x(i);
end
yy(n)=vf; // Condicion inicial
// Grafica la solucion de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz]);
```

```
endfunction
function y=LadoDerecho(x)
   y=-%pi*%pi*cos(%pi*x);
endfunction
function y=SolucionAnalitica(x)
   y=cos(%pi*x);
endfunction
```

Si el programa lo grabamos en el directorio de trabajo con el nombre **fdm1d.sci**, entonces para poder ejecutar la función es necesario cargarla en la consola de SCILAB mediante

exec('./fdm1d.sci',-1)

para después ejecutar la función mediante:

$$[A, b, x] = fdm1d(-1, 2, -1, 1, 30);$$

donde es necesario indicar el inicio (-1) y fin (2) del dominio, el valor de la condición de frontera de inicio (-1) y fin (1), además de el numero de nodos (30) en la partición. La ejecución genera la gráfica de la solución calculada por el método de diferencias finitas y la solución analítica en los mismos puntos de la malla, además devuelve la matriz y los vectores A, b, x generados por la función.

Observación 7 *La diferencia entre los códigos de OCTAVE y SCILAb al menos para estos ejemplos estriba en la forma de indicar los comentarios y la manera de llamar para generar la gráfica, además de que en SCILAB es necesario cargar el archivo que contiene la función.*

Ejemplo 22 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \le x \le 0.5, \qquad u(0) = 1, \qquad u'(0.5) = -\pi$$

entonces el programa queda implementado como:

```
function y=LadoDerecho(x)
 y=-%pi*%pi*cos(%pi*x);
endfunction
```

```
function y=SolucionAnalitica(x)
 y=cos(%pi*x);
endfunction

a=0; // Inicio dominio
c=0.5; // Fin dominio
M=40; // Partición
N=M-1; // Nodos interiores
h=(c-a)/(M-1); // Incremento en la malla
Y0=1; // Condicion Dirchlet inicial en el inicio del dominio
Y1=-%pi; // Condicion Neumann inicial en el fin del dominio
A=zeros(N,N); // Matriz A
b=zeros(N); // Vector b

R=1/(h^2);
P=-2/(h^2);
Q=1/(h^2);

// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,1)=P;
A(1,2)=Q;
b(1)=LadoDerecho(a)-Y0*R; // Frontera Dirichlet
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
 A(i,i-1)=R;
 A(i,i)=P;
A(i,i+1)=Q;
 b(i)=LadoDerecho(a+h*(i-1));
end
// Relglon final de la matriz A y vector b
A(N,N-1)=-1/(h^2);
A(N,N)=-1/(h^2);
b(N)=Y1/h; // Frontera Neumann

// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=inv(A)*b;

// Prepara la graficación
xx=zeros(M,1);
```

```
zz=zeros(M,1);
for i=1:M
 xx(i)=a+h*(i-1);
 zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(M,1);
yy(1)=Y0; // Condicion inicial
for i=1:N
 yy(i+1)=x(i);
end
// Grafica la solución de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz])
```

Ejemplo 23 *Sea*

$$-u''(x) + u(x) = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 0, \qquad u(1) = 1$$

entonces el programa queda implementado como:

```
a=0; // Inicio dominio
c=1; // Fin dominio
M=50; // Partición
N=M-2; // Nodos interiores
h=(c-a)/(M-1); // Incremento en la malla
Y0=0; // Condicion inicial en el inicio del dominio
Y1=1; // Condicion inicial en el fin del dominio
A=zeros(N,N); // Matriz A
b=zeros(N); // Vector b


P=2/(h^2);
Q=-1/(h^2)+1/(2*h);
R=-1/(h^2)-1/(2*h);


// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,1)=P;
A(1,2)=Q;
```

```
b(1)=-Y0*R;
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
 A(i,i-1)=R;
 A(i,i)=P;
 A(i,i+1)=Q;
end
// Relglon final de la matriz A y vector b
A(N,N-1)=R;
A(N,N)=P;
b(N)=-Y1*Q;

// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=inv(A)*b;

// Prepara la graficación
xx=zeros(M,1);
for i=1:M
 xx(i)=a+h*(i-1);
end
yy=zeros(M,1);
yy(1)=Y0; // Condicion inicial
for i=1:N
 yy(i+1)=x(i);
end
yy(M)=Y1; // Condicion inicial
// Grafica la solución de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,yy)
```

Ejemplo 24 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \le x \le 1, \qquad u(0) = -1, \qquad u(1) = 1$$

entonces el programa queda implementado como:

```
function y=LadoDerecho(x)
 y=-%pi*%pi*cos(%pi*x);
endfunction
```

```
function y=SolucionAnalitica(x)
 y=cos(%pi*x);
endfunction

a=-1; // Inicio dominio
c=2; // Fin dominio
M=100; // Partición
N=M-2; // Nodos interiores
h=(c-a)/(M-1); // Incremento en la malla
Y0=-1; // Condicion inicial en el inicio del dominio
Y1=1; // Condicion inicial en el fin del dominio

A=zeros(N,N); // Matriz A
b=zeros(N); // Vector b
R=1/(h^2);
P=-2/(h^2);
Q=1/(h^2);
// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,1)=P;
A(1,2)=Q;
b(1)=LadoDerecho(a)-Y0*R;
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
 A(i,i-1)=R;
 A(i,i)=P;
 A(i,i+1)=Q;
 b(i)=LadoDerecho(a+h*(i-1));
end
// Relglon final de la matriz A y vector b
A(N,N-1)=R;
A(N,N)=P;
b(N)=LadoDerecho(a+h*N)-Y1*Q;

// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=inv(A)*b;

// Prepara la graficación
xx=zeros(M,1);
```

```
zz=zeros(M,1);
for i=1:M
 xx(i)=a+h*(i-1);
 zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(M,1);
yy(1)=Y0; // Condicion inicial
for i=1:N
 yy(i+1)=x(i);
end
yy(M)=Y1; // Condicion inicial
// Grafica la solución de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz])
```

Ejemplo 25 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 0.5, \qquad u(0) = 1, \qquad u'(0.5) = -\pi$$

entonces el programa queda implementado como:

```
function y=LadoDerecho(x)
 y=-%pi*%pi*cos(%pi*x);
endfunction

function y=SolucionAnalitica(x)
 y=cos(%pi*x);
endfunction

a=0; // Inicio dominio
c=0.5; // Fin dominio
M=40; // Partición
N=M-1; // Nodos interiores
h=(c-a)/(M-1); // Incremento en la malla
Y0=1; // Condicion Dirchlet inicial en el inicio del dominio
Y1=-%pi; // Condicion Neumann inicial en el fin del dominio
A=zeros(N,N); // Matriz A
b=zeros(N); // Vector b

R=1/(h^2);
```

```
P=-2/(h^2);
Q=1/(h^2);

// Primer renglon de la matriz A y vector b
A(1,1)=P;
A(1,2)=Q;
b(1)=LadoDerecho(a)-Y0*R; // Frontera Dirichlet
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i=2:N-1
 A(i,i-1)=R;
 A(i,i)=P;
A(i,i+1)=Q;
 b(i)=LadoDerecho(a+h*(i-1));
end
// Relglon final de la matriz A y vector b
A(N,N-1)=-1/(h^2);
A(N,N)=-1/(h^2);
b(N)=Y1/h; // Frontera Neumann

// Resuleve el sistema lineal Ax=b
x=inv(A)*b;

// Prepara la graficación
xx=zeros(M,1);
zz=zeros(M,1);
for i=1:M
 xx(i)=a+h*(i-1);
 zz(i)=SolucionAnalitica(xx(i));
end
yy=zeros(M,1);
yy(1)=Y0; // Condicion inicial
for i=1:N
 yy(i+1)=x(i);
end
// Grafica la solución de la Ecuacion Diferencial Parcial en 1D
plot2d(xx,[yy,zz])
```

16.3 Implementación en C++

GMM++[73] es una librería para C++ que permite definir diversos tipos de matrices y vectores además operaciones básicas de algebra lineal. La facilidad de uso y la gran cantidad de opciones hacen que GMM++ sea una buena opción para trabajar con operaciones elementales de algebra lineal.

Se instala en Debian Linux y/o Ubuntu como:

```
# apt-get install libgmm++-dev
```

Para compilar el ejemplo usar:

```
$ g++ ejemplito.cpp
```

Para ejecutar usar:

```
$ ./a.out
```

Ejemplo 26 *Sea*

$$-u''(x) + u(x) = 0, \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 0, \qquad u(1) = 1$$

entonces el programa queda implementado como:

```
#include <gmm/gmm.h>
#include <math.h>
const double pi = 3.1415926535897793;
// Lado derecho
double LD(double x)
{
    return ( -pi * pi * cos(pi * x));
}
// Solucion analitica
double SA(double x)
{
    return (cos(pi * x));
}
int main(void)
{
    int M=11; // Particion
    int N=M-2; // Nodos interiores
    double a=0; // Inicio dominio
    double c=1; // Fin dominio
```

[73] GMM++ [http://download.gna.org/getfem/html/homepage/gmm/]

```
double h=(c-a)/(M-1); // Incremento en la malla
double Y0=1.0; // Condicion inicial en el inicio del dominio
double Y1=-1.0; // Condicion inicial en el fin del dominio
// Matriz densa
gmm::dense_matrix<double> AA(N, N);
// Matriz dispersa
gmm::row_matrix< gmm::rsvector<double> > A(N, N);
// Vectores
std::vector<double> x(N), b(N);
int i;
double P = -2 / (h * h);
double Q = 1 / (h * h);
double R = 1 / (h * h);
A(0, 0) = P; // Primer renglon de la matriz A y vector b
A(0, 1) = Q;
b[0] = LD(a + h) - (Y0 / (h * h));
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for(i = 1; i < N - 1; i++)
{
    A(i, i - 1) = R;
    A(i, i) = P;
    A(i, i + 1) = Q;
    b[i] = LD(a + (i + 1) * h);
}
A(N - 1, N - 2) = R; // Relglon final de la matriz A y vector b
A(N - 1, N - 1) = P;
b[N - 1] = LD(a + (i + 1) * h) - (Y1 / (h * h));
// Copia la matriz dispersa a la densa para usarla en LU
gmm::copy(A,AA);
// Visualiza la matriz y el vector
std::cout << "Matriz A"<< AA << gmm::endl;
std::cout << "Vector b"<< b << gmm::endl;
// LU para matrices densa
gmm::lu_solve(AA, x, b);
std::cout << "LU"<< x << gmm::endl;
gmm::identity_matrix PS; // Optional scalar product for cg
gmm::identity_matrix PR; // Optional preconditioner
gmm::iteration iter(10E-6);// Iteration object with the max residu
```

```
        size_t restart = 50; // restart parameter for GMRES
        // Conjugate gradient
        gmm::cg(A, x, b, PS, PR, iter);
        std::cout << "CGM"<< x << std::endl;
        // BICGSTAB BiConjugate Gradient Stabilized
        gmm::bicgstab(A, x, b, PR, iter);
        std::cout << "BICGSTAB"<< x << std::endl;
        // GMRES generalized minimum residual
        gmm::gmres(A, x, b, PR, restart, iter);
        std::cout << "GMRES"<< x << std::endl;
        // Quasi-Minimal Residual method
        gmm::qmr(A, x, b, PR, iter);
        std::cout << "Quasi-Minimal"<< x << std::endl;
        // Visualiza la solucion numerica
        std::cout << "Solucion Numerica"<< std::endl;
        std::cout << a << " " << Y0 << gmm::endl;
        for(i = 0; i < N; i++)
             std::cout << (i + 1)*h << " " << x[i] << gmm::endl;
        std::cout << c << " " << Y1 << gmm::endl;
        // Visualiza la solucion analitica
        std::cout << "Solucion Analitica"<< std::endl;
        std::cout << a << " " << SA(a) << gmm::endl;
        for(i = 0; i < N; i++)
             std::cout << (i + 1)*h << " " << SA((a + (i + 1)*h)) <<
gmm::endl;
        std::cout << c << " " << SA(c) << gmm::endl;
        // Visualiza el error en valor absoluto en cada nodo
        std::cout << "Error en el calculo"<< std::endl;
        std::cout << a << "      " << abs(Y0 - SA(a)) << gmm::endl;
        for(i = 0; i < N; i++)
             std::cout << (i + 1)*h << "      " << abs(x[i] - SA((a + (i +
1)*h))) << gmm::endl;
        std::cout << c << "      " << abs(Y1 - SA(c)) << gmm::endl;
        return 0;
    }
```

16.4 Implementación en Python

Python[74] es un lenguaje de programación interpretado, usa tipado dinámico y es multiplataforma cuya filosofía hace hincapié en una sintaxis que favorezca el código legible y soporta programación multiparadigma —soporta orientación a objetos, programación imperativa y programación funcional—, además es desarrollado bajo licencia de código abierto.

Ejemplo 27 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz densa queda implementado como:

```
#!/usr/bin/python
# -*- coding: utf-8 -*-
""" Ejemplo del Metodo de Diferencias Finitas para resolver la ecuacion diferencial parcial:
"""
# 2.X compatible
from __future__ import print_function
import sys
if sys.version[0] == '2': input = raw_input
import math
def LadoDerecho(x):
    "Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial"
    return -math.pi * math.pi * math.cos(math.pi * x)
def Jacobi(A, b, N, iter):
    "Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi"
    sum = 0
    x = [0] * N
    xt = [0] * N
    for m in range(iter):
        for i in range(N):
            sum = 0.0
            for j in range(N):
                if i == j:
                    continue
```

[74] Python [http://www.python.org]

```
                    sum += A[i][j] * x[j]
                xt[i] = (1.0 / A[i][i]) * (b[i] - sum)
            for i in range(N):
                x[i] = xt[i];
        return x
    def GaussSeidel(A, b, N, iter):
        "Resuelve Ax=b usando el metodo GaussSeidel"
        sum = 0
        x = [0] * N
        for m in range(iter):
            for i in range(N):
                sum = 0.0
                for j in range(N):
                    if i == j:
                        continue
                sum += A[i][j] * x[j]
                x[i] = (1.0 / A[i][i]) * (b[i] - sum)
        return x
    # MDF1DD
    if __name__ == '__main__':
        xi = 0.0 # Inicio del diminio
        xf = 1.0 # Fin del dominio
        vi = 1.0 # Valor en la frontera xi
        vf = -1.0 # Valor en la frontera xf
        n = 11 # Particion
        N = n-2 # Incognitas
        h = (xf - xi) / (n - 1); # Incremento en la malla
        # Declaracion de la matriz A y los vectores b y x
        A = [] # Matriz A
        for i in range(N):
            A.append([0]*N)
        b = [0] * N # Vector b
        x = [0] * N # Vector x
        # Stencil
        R = 1 / (h * h)
        P = -2 / (h * h)
        Q = 1 / (h * h)
        # Primer renglon de la matriz A y vector b
```

```
A[0][0] = P
A[0][1] = Q
b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R
print(b)
# Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for i in range(1,N-1):
    A[i][i - 1] = R
    A[i][i] = P
    A[i][i + 1] = Q
    b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i + 1))
# Renglon final de la matriz A y vector b
A[N - 1][N - 2] = R
A[N - 1][N - 1] = P
b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q
# Resuelve por el metodo Jacobi
for i in range(N):
    for j in range(N):
        print(' ', A[i][j],end=")
    print("")
print(b)
x = Jacobi(A, b, N, N*14)
print(x)
# Solucion
print(xi, vi)
for i in range(N):
    print(xi + h * (i + 1), x[i])
    print(xf, vf)
# Resuelve por el metodo Gauss-Seidel
 for i in range(N):
    for j in range(N):
        print(' ', A[i][j],end=")
        print("")
print(b)
x = GaussSeidel(A, b, N, N*7)
print(x)
# Solucion
print(xi, vi)
for i in range(N):
```

```
            print(xi + h * (i + 1), x[i])
        print(xf, vf)
```

Ejemplo 28 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
    #!/usr/bin/python
    # -*- coding: utf-8 -*-
    """ Ejemplo del Metodo de Diferencias Finitas para resolver la ecuacion
diferencia parcial:"""
    # 2.X compatible
    from __future__ import print_function
    import sys
    if sys.version[0] == '2': input = raw_input
    import math
    def LadoDerecho(x):
        "Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial"
        return -math.pi * math.pi * math.cos(math.pi * x)
    def Jacobi(A, b, N, iter):
        "Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi"
        sum = 0
        x = [0] * N
        xt = [0] * N
        for m in range(iter):
            sum = A[0][2] * x[1]
            xt[0] = (1.0 / A[0][1]) * (b[0] - sum)
            for i in range(1,N-1):
                sum = A[i][0] * x[i-1] + A[i][2] * x[i+1]
                xt[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum)
            sum = A[N-1][0] * x[N-2]
            xt[N-1] = (1.0 / A[N-1][1]) * (b[N-1] - sum)
            for i in range(N):
                x[i] = xt[i];
        return x
    def GaussSeidel(A, b, N, iter):
```

```
        "Resuelve Ax=b usando el metodo GaussSeidel"
        sum = 0
        x = [0] * N
        for m in range(iter):
            sum = A[0][2] * x[1]
            x[0] = (1.0 / A[0][1]) * (b[0] - sum)
            for i in range(1,N-1):
                sum = A[i][0] * x[i-1] +A[i][2] * x[i+1]
                x[i] = (1.0 / A[i][1]) * (bi] - sum)
            sum = A[N-1][0] * x[N-2]
            x[N-1] = (1.0 / A[N-1][1]) * (b[N-1] - sum)
        return x
    # MDF1DDBAND
    if __name__ == '__main__':
        xi = 0.0 # Inicio del diminio
        xf = 1.0 # Fin del dominio
        vi = 1.0 # Valor en la frontera xi
        vf = -1.0 # Valor en la frontera xf
        n = 11 # Particion
        N = n-2 # Incognitas
        h = (xf - xi) / (n - 1); # Incremento en la malla
        # Declaracion de la matriz A y los vectores b y x
        A = [] # Matriz A
        for i in range(N):
            A.append([0]*3)
        b = [0] * N # Vector b
        x = [0] * N # Vector x
        # Stencil
        R = 1 / (h * h)
        P = -2 / (h * h)
        Q = 1 / (h * h)
        # Primer renglon de la matriz A y vector b
        A[0][1] = P
        A[0][2] = Q
        b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R
        print(b)
        # Renglones intermedios de la matriz A y vector b
        for i in range(1,N-1):
```

```
        A[i][0] = R
        A[i][1] = P
        A[i][2] = Q
        b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i + 1))
# Renglon final de la matriz A y vector b
A[N - 1][0] = R
A[N - 1][1] = P
b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q
# Resuelve por el metodo Jacobi
for i in range(N):
        for j in range(3):
                print(' ', A[i][j],end='')
        print("")
print(b)
x = Jacobi(A, b, N, N*14)
print(x)
# Solucion
print(xi, vi)
for i in range(N):
        print(xi + h * (i + 1), x[i])
print(xf, vf)
# Resuelve por el metodo Gauss-Seidel
for i in range(N):
        for j in range(3):
                print(' ', A[i][j],end='')
        print("")
print(b)
x = GaussSeidel(A, b, N, N*7)
print(x)
# Solucion
print(xi, vi)
for i in range(N):
        print(xi + h * (i + 1), x[i])
print(xf, vf)
```

Ejemplo 29 *Sea*

$u_t + a(x)u'(x) = 0$, *si* $u(x,0) = f(x)$, *la solución analítica es* $u(x,t) = f(x-at)$

entonces el programa queda implementado como:

```
from math import exp
from scipy import sparse
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
# Ecuación
# u_t + 2 u_x = 0
coef_a = 2
def condicion_inicial (x):
"""
Condición inicial de la ecuación
"""
y = exp (-(x - 0.2)*(x - 0.02))
return y
def sol_analitica (x, t):
"""
Solución analítica de la ecuación
"""
y = exp(-(x-2*t)*(x-2*t))
return y
##########
# Dominio
##########
a = -2.0
b = 8.0
# Partición del dominio
nNodos = 401
h = (b - a)/(nNodos - 1)
# Intervalo de tiempo
dt = 0.012
# creo el vector w donde se guradarÃ¡ la soluciÃ³n para cada tiempo
# B matriz del lado derecho
w = np.zeros((nNodos,1))
B = np.zeros((nNodos, nNodos))
```

```
B = np.matrix(B)
espacio = np.zeros((nNodos,1))
for i in xrange(nNodos):
xx_ = a + i*h
espacio[i] = xx_
w[i] = condicion_inicial(xx_)
print "Espacio"
print espacio
print "Condición Inicial"
print w
mu = coef_a * dt / h
if mu <= 1:
print "mu ", mu
print "Buena aproximaciÃ³n"
else:
print "mu ", mu
print "Mala aproximaciÃ³n"
if coef_a >= 0:
B[0,0] = 1 - mu
for i in xrange (1, nNodos):
B[i,i-1] = mu
B[i,i] = 1 - mu
else:
B[0,0] = 1 + mu;
B[0,1] = -mu;
# se completa las matrices desde el renglon 2 hasta el m-2
for i in xrange(1, nNodos-1):
B[i,i] = 1 + mu;
B[i, i+1] = -mu;
B[nNodos-1,nNodos-1] = 1 + mu
# para guardar la soulción analitica
xx = np.zeros((nNodos,1));
iteraciones = 201
# Matriz sparse csr
Bs = sparse.csr_matrix(B);
# Resolvemos el sistema iterativamente
for j in xrange (1, iteraciones):
t = j*dt;
```

```
w = Bs*w;
      # Imprimir cada 20 iteraciones
if j%20 == 0:
print "t", t
print "w", w
#for k_ in xrange (nNodos):
# xx[k_] = sol_analitica(espacio[k_], t)
# print xx
plt.plot(espacio, w)
#plt.plot(espacio, xx)
# print "XX"
# print xx
# print "W"
# print w
```

16.5 Implementación en Java

Java es un lenguaje de programación orientado a objetos de propósito general. concurrente y multiplataforma desarrollado bajo licencia de código abierto. El lenguaje no esta diseñado especificamente para cómputo científico, pero es facil implementar lo necesario para nuestros fines.

Ejemplo 30 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz densa queda implementado como:

```
public class mdf1DDD {
    private int Visualiza;
    // Constructor
    public mdf1DDD() {
        Visualiza = 1;
    }
    // Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
    public void Jacobi(double[][] A, double[] x, double[] b, int n, int iter)
{
        int i, j, m;
        double sum;
        double[] xt = new double [n];
        for (m = 0; m < iter; m ++) {
            for (i = 0; i < n; i++) {
                sum = 0.0;
                for (j = 0; j < n; j ++) {
                    if ( i == j) continue;
                    sum += A[i][j] * x[j];
                }
                xt[i] = (1.0 / A[i][i]) * (b[i] - sum);
            }
            for (i = 0; i < n; i++) x[i] = xt[i];
        }
        if (Visualiza != 0) {
            System.out.println(" ");
            System.out.println("Matriz");
            for (i = 0; i < n; i++) {
```

```
                    for (j = 0; j < n; j++) {
                        System.out.print(A[i][j] + " ");
                    }
                     System.out.println(" ");
                }
                System.out.println(" ");
                System.out.println("b");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.out.print(b[i] + " ");
                }
                System.out.println(" ");
                System.out.println("x");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.out.print(x[i] + " ");
                }
                System.out.println(" ");
            }
        }
         // Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
        public void Gauss_Seidel(double[][] A, double[] x, double[] b, int n,
int iter) {
             int i, j, m;
            double sum;
             for (m = 0; m < iter; m ++) {
                for (i = 0; i < n; i++) {
                     sum = 0.0;
                     for (j = 0; j < n; j ++) {
                         if ( i == j) continue;
                         sum += A[i][j] * x[j];
                     }
                    x[i] = (1.0 / A[i][i]) * (b[i] - sum);
                }
            }
            if (Visualiza != 0) {
                System.out.println(" ");
                 System.out.println("Matriz");
                 for (i = 0; i < n; i++) {
                     for (j = 0; j < n; j++) {
```

```
                    System.out.print(A[i][j] + " ");
                }
                System.out.println(" ");
            }
            System.out.println(" ");
            System.out.println("b");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.out.print(b[i] + " ");
            }
            System.out.println(" ");
            System.out.println("x");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.out.print(x[i] + " ");
            }
            System.out.println(" ");
        }
    }
     // Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial
    public static double LadoDerecho(double x) {
        double pi = 3.14159265358979323846264338327;
        return -pi * pi * java.lang.Math.cos(pi * x);
    }
     // Funcion Principal ....
     public static void main(String[] args) {
        double xi = 0.0; // Inicio del diminio
        double xf = 1.0; // Fin del dominio
         double vi = 1.0; // Valor en la frontera xi
         double vf = -1.0; // Valor en la frontera xf
         int n = 11; // Particion
         int N = n - 2; // Nodos interiores
         double h = (xf - xi) / (n - 1); // Incremento en la malla
         int i;
         double[][] A = new double[N][N]; // Matriz A
         double[] b = new double[N]; // Vector b
         double[] x = new double[N]; // Vector x
         // Stencil
         double R = 1 / (h * h);
         double P = -2 / (h * h);
```

```
                double Q = 1 / (h * h);
                // Primer renglon de la matriz A y vector b
                A[0][0] = P;
                A[0][1] = Q;
                b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R;
                // Renglones intermedios de la matriz A y vector b
                for (i = 1; i < N - 1; i++) {
                    A[i][i - 1] = R;
                    A[i][i] = P;
                    A[i][i + 1] = Q;
                    b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i+1));
                }
                // Renglon final de la matriz A y vector b
                A[N - 1][N - 2] = R;
                A[N - 1][N - 1] = P;
                b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q;
                // Resuleve el sistema lineal Ax=b
                mdf1DDD ejem = new mdf1DDD();
                // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Gauss-Seidel
                for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
                ejem.Gauss_Seidel(A, x, b, N, N*7);
                System.out.println(xi + " " + vi);
                for(i = 1; i < N+1; i++) System.out.println(xi + h*i + " " +
x[i-1]);
                System.out.println(xf + " " + vf);
                // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Jacobi
                for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
                ejem.Jacobi(A, x, b, N, N*14);
                System.out.println(xi + " " + vi);
                for(i = 1; i < N+1; i++) System.out.println(xi + h*i + " " +
x[i-1]);
                System.out.println(xf + " " + vf);
            }
        }
```

Ejemplo 31 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
public class mdf1DDDBand {
    private int Visualiza;
    // Constructor
    public mdf1DDDBand() {
        Visualiza = 1;
    }
    // Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
    public void Jacobi(double[][] A, double[] x, double[] b, int n, int iter)
{
        int i, j, m;
        double sum;
        double[] xt = new double [n];
        for (m = 0; m < iter; m ++) {
            sum = A[0][2] * x[1];
            xt[0] = (1.0 / A[0][1]) * (b[0] - sum);
            for (i = 1; i < n-1; i++) {
                sum = A[i][0] * x[i-1] + A[i][2] * x[i+1];
                xt[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
            }
            sum = A[i][0] * x[i-1];
            xt[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
            for (i = 0; i < n; i++) x[i] = xt[i];
        }
        if (Visualiza != 0) {
            System.out.println(" ");
            System.out.println("Matriz");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                for (j = 0; j < 3; j++) {
                    System.out.print(A[i][j] + " ");
                }
                System.out.println(" ");
            }
            System.out.println(" ");
            System.out.println("b");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.out.print(b[i] + " ");
            }
```

```
                System.out.println(" ");
                System.out.println("x");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.out.print(x[i] + " ");
                }
                System.out.println(" ");
            }
        }
        // Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
        public void Gauss_Seidel(double[][] A, double[] x, double[] b, int n,
int iter) {
            int i, j, m;
            double sum;
            for (m = 0; m < iter; m ++) {
                sum = A[0][2] * x[1];
                x[0] = (1.0 / A[0][1]) * (b[0] - sum);
                for (i = 1; i < n-1; i++) {
                    sum = A[i][0] * x[i-1] + A[i][2] * x[i+1];
                    x[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
                }
                sum = A[i][0] * x[i-1];
                x[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
            }
            if (Visualiza != 0) {
                System.out.println(" ");
                System.out.println("Matriz");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    for (j = 0; j < 3; j++) {
                        System.out.print(A[i][j] + " ");
                    }
                    System.out.println(" ");
                }
                System.out.println(" ");
                System.out.println("b");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.out.print(b[i] + " ");
                }
                System.out.println(" ");
```

```
            System.out.println("x");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.out.print(x[i] + " ");
            }
            System.out.println(" ");
        }
    }
     // Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial
    public static double LadoDerecho(double x) {
        double pi = 3.14159265358979323846264338 32;
        return -pi * pi * java.lang.Math.cos(pi * x);
    }
     // Funcion Principal ....
    public static void main(String[] args) {
        double xi = 0.0; // Inicio del diminio
        double xf = 1.0; // Fin del dominio
        double vi = 1.0; // Valor en la frontera xi
        double vf = -1.0; // Valor en la frontera xf
        int n = 11; // Particion
        int N = n - 2; // Nodos interiores
        double h = (xf - xi) / (n - 1); // Incremento en la malla
        int i;
        double[][] A = new double[N][3]; // Matriz A
        double[] b = new double[N]; // Vector b
        double[] x = new double[N]; // Vector x
        // Stencil
        double R = 1 / (h * h);
        double P = -2 / (h * h);
        double Q = 1 / (h * h);
        // Primer renglon de la matriz A y vector b
        A[0][1] = P;
        A[0][2] = Q;
        b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R;
        // Renglones intermedios de la matriz A y vector b
        for (i = 1; i < N - 1; i++) {
            A[i][0] = R;
            A[i][1] = P;
            A[i][2] = Q;
```

```
                b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i+1));
            }
            // Renglon final de la matriz A y vector b
            A[N - 1][0] = R;
            A[N - 1][1] = P;
            b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q;
            // Resuleve el sistema lineal Ax=b
            mdf1DDDBand ejem = new mdf1DDDBand();
            // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Gauss-Seidel
            for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
            ejem.Gauss_Seidel(A, x, b, N, N*7);
            System.out.println(xi + " " + vi);
            for(i = 1; i < N+1; i++) System.out.println(xi + h*i + " " +
x[i-1]);
            System.out.println(xf + " " + vf);
            // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Jacobi
            for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
            ejem.Jacobi(A, x, b, N, N*14);
           System.out.println(xi + " " + vi);
           for(i = 1; i < N+1; i++) System.out.println(xi + h*i + " " +
x[i-1]);
            System.out.println(xf + " " + vf);
        }
    }
```

16.6 Implementación en MONO (C#)

Mono (C#) es un lenguaje de programación orientado a bojetos creado para desarrollar un grupo de herramientas libres basadas en GNU/Linux y compatibles con .NET (C#), no esta especialmente desarrollado para cómputo científico, pero es facil implementar lo necesario para nuestros fines.

Ejemplo 32 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz densa queda implementado como:

```
using System;
using System.IO;
using System.Text;
namespace FDM1D
{
public class mdf1DDD {
      private int Visualiza;
      // Constructor
      public mdf1DDD() {
            Visualiza = 1;
       }
      // Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
       public void Jacobi(double[,] A, double[] x, double[] b, int n, int iter)
{
            int i, j, m;
             double sum;
            double[] xt = new double [n];
             for (m = 0; m < iter; m ++) {
                  for (i = 0; i < n; i++) {
                        sum = 0.0;
                        for (j = 0; j < n; j ++) {
                              if ( i == j) continue;
                              sum += A[i,j] * x[j];
                        }
                        xt[i] = (1.0 / A[i,i]) * (b[i] - sum);
                  }
                  for (i = 0; i < n; i++) x[i] = xt[i];
```

```
            }
            if (Visualiza != 0) {
                Console.WriteLine(" ");
                Console.WriteLine("Matriz");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    for (j = 0; j < n; j++) {
                        System.Console.Write(A[i,j] + " ");
                    }
                    System.Console.WriteLine(" ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
                System.Console.WriteLine("b");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.Console.Write(b[i] + " ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
                System.Console.WriteLine("x");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.Console.Write(x[i]+ " ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
            }
        }
        // Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
        public void Gauss_Seidel(double[,] A, double[] x, double[] b, int n,
int iter) {
            int i, j, m;
            double sum;
            for (m = 0; m < iter; m ++) {
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    sum = 0.0;
                    for (j = 0; j < n; j ++) {
                        if ( i == j) continue;
                        sum += A[i,j] * x[j];
                    }
                    x[i] = (1.0 / A[i,i]) * (b[i] - sum);
                }
            }
```

```
        if (Visualiza != 0) {
            Console.WriteLine(" ");
            Console.WriteLine("Matriz");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                for (j = 0; j < n; j++) {
                    System.Console.Write(A[i,j] + " ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
            }
            System.Console.WriteLine(" ");
            System.Console.WriteLine("b");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.Console.Write(b[i] + " ");
            }
            System.Console.WriteLine(" ");
            System.Console.WriteLine("x");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.Console.Write(x[i] + " ");
            }
            System.Console.WriteLine(" ");
        }
    }
    // Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial
    public static double LadoDerecho(double x) {
        double pi = 3.14159265358979323846264338327;
        return -pi * pi * Math.Cos(pi * x);
    }
    // Funcion Principal ....
    public static void Main(String[] args) {
        double xi = 0.0; // Inicio del diminio
        double xf = 1.0; // Fin del dominio
        double vi = 1.0; // Valor en la frontera xi
        double vf = -1.0; // Valor en la frontera xf
        int n = 11; // Particion
        int N = n - 2; // Nodos interiores
        double h = (xf - xi) / (n - 1); // Incremento en la malla
        int i;
        double[,] A = new double[N,N]; // Matriz A
```

```
            double[] b = new double[N]; // Vector b
            double[] x = new double[N]; // Vector x
            double R = 1 / (h * h);
            double P = -2 / (h * h);
            double Q = 1 / (h * h);
            // Primer renglon de la matriz A y vector b
            A[0,0] = P;
            A[0,1] = Q;
            b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R;
            // Renglones intermedios de la matriz A y vector b
            for (i = 1; i < N - 1; i++) {
                A[i,i - 1] = R;
                A[i,i] = P;
                A[i,i + 1] = Q;
                b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i+1));
            }
            // Renglon final de la matriz A y vector b
            A[N - 1,N - 2] = R;
            A[N - 1,N - 1] = P;
            b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q;
            // Resuleve el sistema lineal Ax=b
            mdf1DDD ejem = new mdf1DDD();
            ejem.Gauss_Seidel(A, x, b, N, 1000);
            System.Console.WriteLine(xi + " " + vi);
            for(i = 1; i < N+1; i++) System.Console.WriteLine(xi + h*i
+ " " + x[i-1]);
            System.Console.WriteLine(xf + " " + vf);
            ejem.Jacobi(A, x, b, N, 1000);
            System.Console.WriteLine(xi + " " + vi);
            for(i = 1; i < N+1; i++) System.Console.WriteLine(xi + h*i
+ " " + x[i-1]);
            System.Console.WriteLine(xf + " " + vf);
        }
    }
    }
```

Ejemplo 33 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
using System;
using System.IO;
using System.Text;
namespace FDM1D
{
public class mdf1DDDBand {
      private int Visualiza;
      // Constructor
      public mdf1DDDBand() {
            Visualiza = 1;
      }
      // Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
      public void Jacobi(double[,] A, double[] x, double[] b, int n, int iter)
{
            int i, j, m;
            double sum;
            double[] xt = new double [n];
            for (m = 0; m < iter; m ++) {
                  sum = A[0,2] * x[1];
                  xt[0] = (1.0 / A[0,1]) * (b[0] - sum);
                  for (i = 1; i < n-1; i++) {
                        sum = A[i,0] * x[i-1] + A[i,2] * x[i+1];
                        xt[i] = (1.0 / A[i,1]) * (b[i] - sum);
                  }
                  sum = A[i,0] * x[i-1];
                  xt[i] = (1.0 / A[i,1]) * (b[i] - sum);
                  for (i = 0; i < n; i++) x[i] = xt[i];
            }
            if (Visualiza != 0) {
                  Console.WriteLine(" ");
                  Console.WriteLine("Matriz");
                  for (i = 0; i < n; i++) {
                        for (j = 0; j < 3; j++) {
```

```
                        System.Console.Write(A[i,j] + " ");
                    }
                    System.Console.WriteLine(" ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
                System.Console.WriteLine("b");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.Console.Write(b[i] + " ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
                System.Console.WriteLine("x");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    System.Console.Write(x[i]+ " ");
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
            }
        }
        // Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
        public void Gauss_Seidel(double[,] A, double[] x, double[] b, int n,
int iter) {
            int i, j, m;
            double sum;
            for (m = 0; m < iter; m ++) {
                sum = A[0,2] * x[1];
                x[0] = (1.0 / A[0,1]) * (b[0] - sum);
                for (i = 1; i < n-1; i++) {
                    sum = A[i,0] * x[i-1] + A[i,2] * x[i+1];
                    x[i] = (1.0 / A[i,1]) * (b[i] - sum);
                }
                sum = A[i,0] * x[i-1];
                x[i] = (1.0 / A[i,1]) * (b[i] - sum);
            }
            if (Visualiza != 0) {
                Console.WriteLine(" ");
                Console.WriteLine("Matriz");
                for (i = 0; i < n; i++) {
                    for (j = 0; j < 3; j++) {
                        System.Console.Write(A[i,j] + " ");
```

```
                }
                System.Console.WriteLine(" ");
            }
            System.Console.WriteLine(" ");
            System.Console.WriteLine("b");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.Console.Write(b[i] + " ");
            }
            System.Console.WriteLine(" ");
            System.Console.WriteLine("x");
            for (i = 0; i < n; i++) {
                System.Console.Write(x[i] + " ");
            }
            System.Console.WriteLine(" ");
        }
    }
    // Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial
    public static double LadoDerecho(double x) {
        double pi = 3.14159265358979323846264338327;
        return -pi * pi * Math.Cos(pi * x);
    }
    // Funcion Principal ....
    public static void Main(String[] args) {
        double xi = 0.0; // Inicio del diminio
        double xf = 1.0; // Fin del dominio
        double vi = 1.0; // Valor en la frontera xi
        double vf = -1.0; // Valor en la frontera xf
        int n = 11; // Particion
        int N = n - 2; // Nodos interiores
        double h = (xf - xi) / (n - 1); // Incremento en la malla
        int i;
        double[,] A = new double[N,N]; // Matriz A
        double[] b = new double[N]; // Vector b
        double[] x = new double[N]; // Vector x
        // Stencil
        double R = 1 / (h * h);
        double P = -2 / (h * h);
        double Q = 1 / (h * h);
```

```
            // Primer renglon de la matriz A y vector b
            A[0,1] = P;
            A[0,2] = Q;
            b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R;
            // Renglones intermedios de la matriz A y vector b
            for (i = 1; i < N - 1; i++) {
                A[i,0] = R;
                A[i,1] = P;
                A[i,2] = Q;
                b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i+1));
            }
            // Renglon final de la matriz A y vector b
            A[N - 1,0] = R;
            A[N - 1,1] = P;
            b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q;
            // Resuleve el sistema lineal Ax=b
            mdf1DDDBand ejem = new mdf1DDDBand();
            ejem.Gauss_Seidel(A, x, b, N, 1000);
            System.Console.WriteLine(xi + " " + vi);
            for(i = 1; i < N+1; i++) System.Console.WriteLine(xi + h*i
+ " " + x[i-1]);
            System.Console.WriteLine(xf + " " + vf);
            ejem.Jacobi(A, x, b, N, 1000);
            System.Console.WriteLine(xi + " " + vi);
            for(i = 1; i < N+1; i++) System.Console.WriteLine(xi + h*i
+ " " + x[i-1]);
            System.Console.WriteLine(xf + " " + vf);
        }
    }
    }
```

16.7 Implementación en Fortran

Fortran es un lenguaje de programación procedimental e imperativo que esta adaptado al cálculo numérico y la computación científica, existen una gran variedad de subrutinas para manipulación de matrices, pero es facil implementar lo necesario para nuestros fines.

Ejemplo 34 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz densa queda implementado como:

```
program mdf1D
    implicit none
    integer i, N, nn
    real*16, allocatable :: A(:,:), b(:), x(:)
    real*16 xi, xf, vi, vf, h, R, P, Q, y
    xi = 0.0 ! Inicio del diminio
    xf = 1.0 ! Fin del dominio
    vi = 1.0 ! Valor en la frontera xi
    vf = -1.0 ! Valor en la frontera xf
    nn = 11 ! Particion
    N = nn - 2 ! Nodos interiores
    h = (xf - xi) / (nn-1) ! Incremento en la malla
    allocate (A(N,N), b(N), x(N))
    ! Stencil
    R = 1. / (h * h)
    P = -2. / (h * h)
    Q = 1. / (h * h)
    ! Primer renglon de la matriz A y vector b
    A(1,1)=P
    A(2,1)=Q
    call ladoDerecho(xi,y)
    b(1)=y-vi*R
    ! Renglones intermedios de la matriz A y vector b
    do i=2,N-1
        A(i-1,i)=R
        A(i,i)=P
        A(i+1,i)=Q
```

```
        call ladoDerecho(xi+h*(i),y)
        b(i)= y
    end do
    ! Renglon final de la matriz A y vector b
    A(N-1,N)=R
    A(N,N)=P
    call ladoDerecho(xi+h*N,y)
    b(N)= y -vf*Q
    call gaussSeidel(A, x, b, N, 1000)
     print*, "A: ", A
     print*, "b: ", b
    print*, "x: ", x
     call jacobi(A, x, b, N, 1000)
     print*, "A: ", A
     print*, "b: ", b
     print*, "x: ", x
end program
subroutine ladoDerecho(x,y)
    real*16, intent(in) :: x
    real*16, intent(inout) :: y
    real*16 pi
    pi = 3.14159265358979323846264338327;
    y = -pi * pi * cos(pi * x);
end subroutine
subroutine gaussSeidel(a, x, b, nx, iter)
    implicit none
    integer, intent(in) :: nx, iter
    real*16, intent(in) :: a(nx,nx), b(nx)
    real*16, intent(inout) :: x(nx)
    integer i, j, m
    real*16 sum

    do m = 1, iter
        do i = 1, nx
            sum = 0.0
            do j = 1, nx
                if (i .NE. j) then
                    sum = sum + a(i,j) * x(j)
```

```
                    end if
                end do
                x(i) = (1.0 / a(i,i)) * (b(i) - sum)
            end do
        end do
    end subroutine
     subroutine jacobi(a, x, b, nx, iter)
        implicit none
        integer, intent(in) :: nx, iter
        real*16, intent(in) :: a(nx,nx), b(nx)
        real*16, intent(inout) :: x(nx)
        real*16, allocatable :: xt(:)
        integer i, j, m
        real*16 sum
        allocate (xt(nx))
        do m = 1, iter
            do i = 1, nx
                sum = 0.0
                do j = 1, nx
                    if (i .NE. j) then
                        sum = sum + a(i,j)*x(j)
                    end if
                end do
                xt(i) = (1.0 / a(i,i)) * (b(i) - sum)
            end do
            do i = 1, nx
                x(i) = xt(i)
            end do
        end do
    end subroutine
```

Ejemplo 35 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \le x \le 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
    program mdf1DDDBand
        implicit none
```

```
integer i, N, nn
real*16, allocatable :: A(:,:), b(:), x(:)
real*16 xi, xf, vi, vf, h, R, P, Q, y
xi = 0.0 ! Inicio del diminio
xf = 1.0 ! Fin del dominio
vi = 1.0 ! Valor en la frontera xi
vf = -1.0 ! Valor en la frontera xf
nn = 11 ! Particion
N = nn - 2 ! Nodos interiores
h = (xf - xi) / (nn-1) ! Incremento en la malla
allocate (A(3,N), b(N), x(N))
! Stencil
R = 1. / (h * h)
P = -2. / (h * h)
Q = 1. / (h * h)
! Primer renglon de la matriz A y vector b
A(2,1)=P
A(3,1)=Q
call ladoDerecho(xi,y)
b(1)=y-vi*R
! Renglones intermedios de la matriz A y vector b
do i=2,N-1
    A(1,i)=R
    A(2,i)=P
    A(3,i)=Q
    call ladoDerecho(xi+h*(i),y)
    b(i)= y
end do
! Renglon final de la matriz A y vector b
A(1,N)=R
A(2,N)=P
call ladoDerecho(xi+h*N,y)
b(N)= y -vf*Q
call gaussSeidel(A, x, b, N, 1000)
print*, "A: ", A
print*, "b: ", b
print*, "x: ", x
call jacobi(A, x, b, N, 1000)
```

```
      print*, "A: ", A
      print*, "b: ", b
      print*, "x: ", x
end program
subroutine ladoDerecho(x,y)
      real*16, intent(in) :: x
      real*16, intent(inout) :: y
      real*16 pi
      pi = 3.14159265358979323846264338327;
      y = -pi * pi * cos(pi * x);
end subroutine
subroutine gaussSeidel(a, x, b, nx, iter)
      implicit none
      integer, intent(in) :: nx, iter
      real*16, intent(in) :: a(3,nx), b(nx)
      real*16, intent(inout) :: x(nx)
      integer i, j, m
      real*16 sum
      do m = 1, iter
            sum = a(3,1) * x(2)
            x(1) = (1.0 / a(2,1)) * (b(1) - sum)
            do i = 2, nx-1
                  sum = a(1,i) * x(i-1) + a(3,i) * x(i+1)
                x(i) = (1.0 / a(2,i)) * (b(i) - sum)
           end do
            sum = a(1,i) * x(i-1)
            x(i) = (1.0 / a(2,i)) * (b(i) - sum)
      end do
end subroutine
subroutine jacobi(a, x, b, nx, iter)
      implicit none
      integer, intent(in) :: nx, iter
      real*16, intent(in) :: a(3,nx), b(nx)
      real*16, intent(inout) :: x(nx)
      real*16, allocatable :: xt(:)
      integer i, j, m
      real*16 sum
      allocate (xt(nx))
```

```
    do m = 1, iter
        sum = a(3,1) * x(2)
        xt(1) = (1.0 / a(2,1)) * (b(1) - sum)
         do i = 2, nx-1
             sum = a(1,i) * x(i-1) + a(3,i) * x(i+1)
              xt(i) = (1.0 / a(2,i)) * (b(i) - sum)
         end do
         sum = a(1,i) * x(i-1)
         xt(i) = (1.0 / a(2,i)) * (b(i) - sum)
         do i = 1, nx
              x(i) = xt(i)
         end do
     end do
end subroutine
```

16.8 Implementación en C

C es un lenguaje de programación de tipos de datos estaticos, débilmente tipificado, de medio nivel, existen una gran variedad de subrutinas para manipulación de matrices, pero es facil implementar lo necesario para nuestros fines.

Ejemplo 36 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \leq x \leq 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz densa queda implementado como:

```
#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#define PARTICION 11 // Tamano de la particion
#define VISUALIZA 1 // (0) No visualiza la salida, otro valor la visualiza
// Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial
double LadoDerecho(double x)
{
        double pi = 3.14159265358979323846264338327;
        return -pi * pi * cos(pi * x);
}
// Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
void Jacobi(double **A, double *x, double *b, int n, int iter)
{
        int i, j, m;
        double sum;
        double *xt;
        xt = (double*)malloc(n*sizeof(double));
        for (m = 0; m < iter; m ++)
        {
             for (i = 0; i < n; i++)
             {
                    sum = 0.0;
                    for (j = 0; j < n; j ++)
                    {
                          if ( i == j) continue;
```

```
                sum += A[i][j] * x[j];
            }
            xt[i] = (1.0 / A[i][i]) * (b[i] - sum);
        }
        for (i = 0; i < n; i++) x[i] = xt[i];
    }
    if (VISUALIZA)
    {
        printf("\nMatriz\n");
        for (i = 0; i < n; i++)
        {
            for (j = 0; j < n; j++)
            {
                printf("%f ", A[i][j]);
            }
            printf("\n");
        }
        printf("\nb\n");
        for (i = 0; i < n; i++)
        {
            printf("%f ", b[i]);
        }
        printf("\nx\n");
        for (i = 0; i < n; i++)
        {
            printf("%f ", x[i]);
        }
        printf("\n");
    }
    free(xt);
}
// Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
void Gauss_Seidel(double **A, double *x, double *b, int n, int iter)
{
    int i, j, m;
    double sum;
    for (m = 0; m < iter; m ++)
    {
```

```
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                sum = 0.0;
                for (j = 0; j < n; j ++)
                {
                    if ( i == j) continue;
                    sum += A[i][j] * x[j];
                }
                x[i] = (1.0 / A[i][i]) * (b[i] - sum);
            }
        }
        if (VISUALIZA)
        {
            printf("\nMatriz\n");
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                for (j = 0; j < n; j++)
                {
                    printf("%f ", A[i][j]);
                }
                printf("\n");
            }
            printf("\nb\n");
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                printf("%f ", b[i]);
            }
            printf("\nx\n");
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                printf("%f ", x[i]);
            }
            printf("\n");
        }
    }
    int main(int argc, const char* argv[])
    {
        double xi = 0.0; // Inicio del diminio
```

```
double xf = 1.0; // Fin del dominio
double vi = 1.0; // Valor en la frontera xi
double vf = -1.0; // Valor en la frontera xf
int n = PARTICION; // Particion
int N = n-2; // Incognitas
double h = (xf - xi) / (n - 1); // Incremento en la malla
int i;
// Declaracion de la matriz A y los vectores b y x
double **A; // Matriz A
double *b; // Vector b
double *x; // Vector x
// Solicitud de la memoria dinamica
b = (double*)malloc(N*sizeof(double));
x = (double*)malloc(N*sizeof(double));
A = (double**)malloc(N*sizeof(double*));
for (i= 0; i < N; i++) A[i] = (double*)malloc(N*sizeof(double));
// Stencil
double R = 1 / (h * h);
double P = -2 / (h * h);
double Q = 1 / (h * h);
// Primer renglon de la matriz A y vector b
A[0][0] = P;
A[0][1] = Q;
b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R;
// Renglones intermedios de la matriz A y vector b
for (i = 1; i < N - 1; i++)
{
    A[i][i - 1] = R;
    A[i][i] = P;
    A[i][i + 1] = Q;
    b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i + 1));
}
// Renglon final de la matriz A y vector b
A[N - 1][N - 2] = R;
A[N - 1][N - 1] = P;
b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q;
// Resuleve el sistema lineal Ax=b por Gauss-Seidel
for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
```

```
        Gauss_Seidel(A, x, b, N, N*7);
        printf("%f %f\n", xi, vi);
        for(i = 1; i < N+1; i++) printf("%f %f\n", xi + h*i, x[i-1]);
        printf("%f %f\n\n\n\n", xf, vf);
        // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Jacobi
        for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
        Jacobi(A, x, b, N, N*14);
        printf("%f %f\n", xi, vi);
        for(i = 1; i < N+1; i++) printf("%f %f\n", xi + h*i, x[i-1]);
        printf("%f %f\n", xf, vf);
        // Liberacion de la memoria dinamica
        free(b);
        free(x);
        for (i= 0; i < N; i++) free(A[i]);
        free(A);
        return 0;
    }
```

Ejemplo 37 *Sea*

$$u''(x) = -\pi^2 \cos(\pi x), \qquad 0 \le x \le 1, \qquad u(0) = 1, \qquad u(1) = -1$$

entonces el programa usando matriz bandada queda implementado como:

```
    #include <math.h>
    #include <stdio.h>
    #include <stdlib.h>
    #define PARTICION 11 // Tamano de la particion
    #define VISUALIZA 1 // (0) No visualiza la salida, otro valor la visualiza
    // Lado derecho de la ecuacion diferencial parcial
    double LadoDerecho(double x)
    {
        double pi = 3.14159265358979323846264338327;
        return -pi * pi * cos(pi * x);
    }
    // Resuelve Ax=b usando el metodo Jacobi
    void Jacobi(double **A, double *x, double *b, int n, int iter)
    {
```

```
int i, j, m;
double sum;
double *xt;
xt = (double*)malloc(n*sizeof(double));
for (i = 0; i < n; i++) xt[i] = 0.0;
for (m = 0; m < iter; m ++)
{
      sum = A[0][2] * x[1];
      xt[0] = (1.0 / A[0][1]) * (b[0] - sum);
      for (i = 1; i < n-1; i++) {
            sum = A[i][0] * x[i-1] + A[i][2] * x[i+1];
            xt[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
      }
      sum = A[i][0] * x[i-1];
      xt[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
      for (i = 0; i < n; i++) x[i] = xt[i];
}
if (VISUALIZA)
{
      printf("\nMatriz\n");
      for (i = 0; i < n; i++)
      {
            for (j = 0; j < 3; j++)
            {
                  printf("%f ", A[i][j]);
            }
            printf("\n");
      }
      printf("\nb\n");
      for (i = 0; i < n; i++)
      {
            printf("%f ", b[i]);
      }
      printf("\nx\n");
      for (i = 0; i < n; i++)
      {
            printf("%f ", x[i]);
      }
```

```
            printf("\n");
        }
        free(xt);
    }
    // Resuelve Ax=b usando el metodo Gauss-Seidel
    void Gauss_Seidel(double **A, double *x, double *b, int n, int iter)
    {
        int i, j, m;
        double sum;
        for (m = 0; m < iter; m ++)
        {
            sum = A[0][2] * x[1];
            x[0] = (1.0 / A[0][1]) * (b[0] - sum);
            for (i = 1; i < n-1; i++)
            {
                sum = A[i][0] * x[i-1] + A[i][2] * x[i+1];
                x[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
            }
            sum = A[i][0] * x[i-1];
            x[i] = (1.0 / A[i][1]) * (b[i] - sum);
        }
        if (VISUALIZA)
        {
            printf("\nMatriz\n");
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                for (j = 0; j < 3; j++)
                {
                    printf("%f ", A[i][j]);
                }
                printf("\n");
            }
            printf("\nb\n");
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                printf("%f ", b[i]);
            }
            printf("\nx\n");
```

```
            for (i = 0; i < n; i++)
            {
                printf("%f ", x[i]);
            }
            printf("\n");
        }
    }
    int main(int argc, const char* argv[])
    {
        double xi = 0.0; // Inicio del diminio
        double xf = 1.0; // Fin del dominio
        double vi = 1.0; // Valor en la frontera xi
        double vf = -1.0; // Valor en la frontera xf
        int n = PARTICION; // Particion
        int N = n-2; // Numero de incognitas
        double h = (xf - xi) / (n - 1); // Incremento en la malla
        int i;
        // Declaracion de la matriz A y los vectores b y x
        double **A; // Matriz A
        double *b; // Vector b
        double *x; // Vector x
        // Solicitud de la memoria dinamica
        b = (double*)malloc(N*sizeof(double));
        x = (double*)malloc(N*sizeof(double));
        A = (double**)malloc(N*sizeof(double*));
        for (i= 0; i < N; i++) A[i] = (double*)malloc(3*sizeof(double));
        // Stencil
        double R = 1 / (h * h);
        double P = -2 / (h * h);
        double Q = 1 / (h * h);
        // Primer renglon de la matriz A y vector b
        A[0][1] = P;
        A[0][2] = Q;
        b[0] = LadoDerecho(xi) - vi * R;
        // Renglones intermedios de la matriz A y vector b
        for (i = 1; i < N - 1; i++)
        {
            A[i][0] = R;
```

```
            A[i][1] = P;
            A[i][2] = Q;
            b[i] = LadoDerecho(xi + h * (i + 1));
        }
        // Renglon final de la matriz A y vector b
        A[N - 1][0] = R;
        A[N - 1][1] = P;
        b[N - 1] = LadoDerecho(xi + h * N - 2) - vf * Q;
        // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Gauss-Seidel
        for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
        Gauss_Seidel(A, x, b, N, N*7);
        printf("%f %f\n", xi, vi);
        for(i = 1; i < N+1; i++) printf("%f %f\n", xi + h*i, x[i-1]);
        printf("%f %f\n\n\n", xf, vf);
        // Resuleve el sistema lineal Ax=b por Jacobi
        for(i = 0; i < N; i++) x[i] = 0.0;
        Jacobi(A, x, b, N, N*14);
        printf("%f %f\n", xi, vi);
        for(i = 1; i < N+1; i++) printf("%f %f\n", xi + h*i, x[i-1]);
        printf("%f %f\n", xf, vf);
        // Liberacion de la memoria dinamica
        free(b);
        free(x);
        for (i= 0; i < N; i++) free(A[i]);
        free(A);
        return 0;
}
```

17 Bibliografía

Este texto es una recopilación de múltiples fuentes, nuestra aportación —si es que podemos llamarla así— es plasmarlo en este documento, en el que tratamos de dar coherencia a nuestra visión de los temas desarrollados.

En la realización de este texto se han revisado —en la mayoría de los casos indicamos la referencia, pero pudimos omitir varias de ellas, por lo cual pedimos una disculpa— múltiples páginas Web, artículos técnicos, libros, entre otros materiales bibliográficos, los más representativos y de libre acceso los ponemos a su disposición en la siguiente liga:

http://mmc.geofisica.unam.mx/acl/Herramientas/

Referencias

[1] K. Hutter and K Jöhnk, *Continuum Methods of Physical Modeling*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2004. 7, 10, 83

[2] J. L. Lions and E. Magenes, *Non-Homogeneous Bounduary Value Problems and Applicarions* Vol. I, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1972. 87, 240

[3] A. Toselli, O. Widlund, *Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory*. Springer, 2005. 90, 223

[4] A. Quarteroni and A. Valli, *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. Clarendon Press Oxford, 1999. 8, 9, 81, 82, 86, 91, 243

[5] A. Quarteroni and A. Valli, *Numerical Approximation of Partial Diferential Equations*. Springer, 1994. 91, 145

[6] B. Dietrich, *Finite Elements: Theory, Fast Solvers*, and Applications in Solid Mechanics, Cambridge University, 2001. 145

[7] B. F. Smith, P. E. BjØrstad, W. D. Gropp, *Domain Decomposition, Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996. 8, 9, 81, 82, 90, 145, 240

[8] Fuzhen Zhang, *The Schur Complement and its Aplications*, Springer, Numerical Methods and Algorithms, Vol. 4, 2005.

[9] B. I. Wohlmuth, *Discretization Methods and Iterative Solvers Based on Domain Decomposition*. Springer, 2003. 8, 81, 82, 90, 91, 213

[10] L. F. Pavarino and A. Toselli, *Recent Developments in Domain Decomposition Methods*. Springer, 2003. 10, 83, 145, 213

[11] M.B. Allen III, I. Herrera & G. F. Pinder, *Numerical Modeling in Science And Engineering.* John Wiley & Sons, Inc . 1988. 7, 21, 29, 91, 207, 209, 212, 213

[12] R. L. Burden and J. D. Faires, *Análisis Numérico*. Math Learning, 7 ed. 2004. 207

[13] S. Friedberg, A. Insel, and L. Spence, *Linear Algebra*, 4th Edition, Prentice Hall, Inc. 2003. 207

[14] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, 2 ed. 2000. 209, 212, 214, 231, 234, 235

[15] Y. Skiba, *Métodos y Esquemas Numéricos, un Análisis Computacional*. UNAM, 2005. 207, 213, 216

[16] M. Diaz, I. Herrera, *Desarrollo de Precondicionadores para los Procedimientos de Descomposición de Dominio*. Unidad Teórica C, Posgrado de Ciencias de la Tierra, 22 pags, 1997. 223

[17] I. Herrera, *Un Análisis del Método de Gradiente Conjugado*. Comunicaciones Técnicas del Instituto de Geofísica, UNAM, Serie Investigación, No. 7, 1988. 220

[18] G. Herrera, Análisis de Alternativas al Método de Gradiente Conjugado para Matrices no Simétricas. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, 1989. 220

[19] W. Gropp, E. Lusk and A. Skjellem, *Using MPI, Portable Parallel Programming Whit the Message Passing Interface*. Scientific and Engineering Computation Series, 2ed, 1999. 85, 146, 151, 326, 327, 333

[20] I. Foster, *Designing and Building Parallel Programs*. Addison-Wesley Inc., Argonne National Laboratory, and the NSF, 2004. 146, 151, 326, 327, 333

[21] Jorge L. Ortega-Arjona, *Patterns for Parallel Software Design*, Wiley series in Software Design Patterns, 2010. 10, 83, 146, 151, 326

[22] DDM Organization, *Proceedings of International Conferences on Domain Decomposition Methods*, 1988-2012. 10, 11, 83, 84, 239, 244

http://www.ddm.org and http://www.domain-decomposition.com

[23] Toselli, A., and Widlund O. *Domain decomposition methods- Algorithms and theory*, Springer Series in Computational Mathematics, Springer-Verlag, Berlin, 2005, 450p. 9, 10, 11, 82, 83, 84, 169

[24] Farhat, C. and Roux, F. X. *A Method of Finite Element Tearing and Interconnecting and its Parallel Solution Algorithm*. Int. J. Numer. Meth. Engng., 32:1205-1227, 1991.

[25] Mandel J. and Tezaur R. *Convergence of a Substructuring Method with Lagrange Multipliers*, Numer. Math. 73 (1996) 473-487.

[26] Farhat C., Lesoinne M. Le Tallec P., Pierson K. & Rixen D. *FETI-DP a Dual-Primal Unified FETI method, Part 1: A Faster Alternative to the two-level FETI Method*, Int. J. Numer. Methods Engrg. 50 (2001) 1523-1544.

[27] Farhat C., Lesoinne M. and Pierson K. *A Scalable Dual-Primal Domain Decomposition Method*, Numer. Linear Algebra Appl. 7 (2000) 687-714.

[28] Mandel J. and Tezaur R. *On the Convergence of a Dual-Primal Substructu-ring Method*, Numer. Math. 88(2001), pp. 5443-558.

[29] Mandel, J. *Balancing Domain Decomposition*. Comm. Numer. Meth. Engrg., 9:233-241, 1993.

[30] Mandel J. and Brezina M., *Balancing Domain Decomposition for Problems with Large Jumps in Coefficients,* Math. Comput. 65 (1996) 1387-1401.

[31] Dohrmann C., *A Preconditioner for Substructuring Based on Constrained Energy Minimization*. SIAM J. Sci. Comput. 25 (2003) 246-258.

[32] Mandel J. and Dohrmann C., *Convergence of a Balancing Domain Decomposition by Constraints and Energy Minimization*. Numer. Linear Algebra Appl. 10 (2003) 639-659.

[33] Da Conceição, D. T. Jr., *Balancing Domain Decomposition Preconditioners for Non-symetric Problems*, Instituto Nacional de Matemática pura e Aplicada, Agencia Nacional do Petróleo PRH-32, Rio de Janeiro, May. 9, 2006. 172, 178, 257

[34] J. Li and O. Widlund, *FETI-DP, BDDC and block Cholesky Methods*, Int. J. Numer. Methods Engrg. 66, 250-271, 2005.

[35] Farhat Ch., Lesoinne M., Le Tallec P., Pierson K. and Rixen D. *FETI-DP: A Dual-Primal Unified FETI Method-Part I: A Faster Alternative to the Two Level FETI Method*. Internal. J. Numer. Methods Engrg., 50:1523-1544, 2001. 244

[36] Rixen, D. and Farhat Ch. *A Simple and Efficient Extension of a Class of Substructure Based Preconditioners to Heterogeneous Structural Mechanics Problems*. Internal. J. Numer. Methods Engrg., 44:489-516, 1999. 244

[37] J. Mandel, C. R. Dohrmann, and R. Tezaur, *An Algebraic Theory for Primal and Dual Substructuring Methods by Constraints*, Appl. Numer. Math., 54 (2005), pp. 167-193. 239, 244

[38] A. Klawonn, O. B. Widlund, and M. Dryja, *Dual-primal FETI Methods for Three-Dimensional Elliptic Problems with Heterogeneous Coefficients*, SIAM J. Numer. Anal., 40 (2002), pp. 159-179. 239, 244

[39] Agustín Alberto Rosas Medina, *El Número de Péclet y su Significación en la Modelación de Transporte Difusivo de Contaminantes,* Tesis para obtener el titulo de Matemático, UNAM, 2005. 47, 172, 174, 176, 177

[40] Omar Jonathan Mendoza Bernal, Resolución de Ecuaciones Diferenciales Parciales Mediante el Método de Diferencias Finitas y su Paralelización, Tesis para obtener el titulo de Matemático, UNAM, 2016.

[41] Klawonn A. and Widlund O.B., *FETI and Neumann-Neumann Iterative Substructuring Methods: Connections and New Results*. Comm. Pure and Appl. Math. 54(1): 57-90, 2001.

[42] Tezaur R., *Analysis of Lagrange Multipliers Based Domain Decomposition*. P.H. D. Thesis, University of Colorado, Denver, 1998.

[43] Herrera I. and Rubio E., *Unified Theory of Differential Operators Acting on Discontinuos Functions and of Matrices Acting on Discontinuous Vectors*, 19th International Conference on Domain Decomposition Methods, Zhangjiajie, China 2009. (Oral presentation). Internal report #5, GMMC-UNAM, 2011. 264, 276

[44] Valeri I. Agoshkov, *Poincaré-Steklov Operators and Domain Decomposition Methods in Finite Dimensional Spaces*. First International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, pages 73-112, Philadelphia, PA, 1988. SIAM. Paris, France, Junuary 7-9, 1987. 243, 276

[45] Toselli, A., *FETI Domain Decomposition Methods for Escalar Advection-Diffusion Problems*. Compututational Methods Appl. Mech. Engrg. 190. (2001), 5759-5776. 174, 176, 178

[46] C.T. Keller, *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*, Societe for Industrial and Applied Mathematics, 1995. 214, 216

[47] Manoj Bhardwaj, David Day, Charbel Farhat, Michel Lesoinne, Kendall Pierson, and Daniel Rixen. *Application of the PETI Method to ASCI Problems: Scalability Results on One Thousand Processors and Discussion of Highly Heterogeneous Problems*. Intemat. J. Numer. Methods Engrg., 47:513-535, 2000. 10, 83

[48] Zdengk Dostdl and David Hordk. *Scalability and FETI Based Algorithm for Large Discretized Variational Inequalities*. Math. Comput. Simulation, 61(3-6): 347-357, 2003. MODELLING 2001 (Pilsen). 10, 83, 239, 244

[49] Charbel Farhat, Michel Lesoinne, and Kendall Pierson. *A Scalable Dual-Primal Domain Decomposition Method*. Numer. Linear Algebra Appl., 7(7-8):687-714, 2000. 10, 83, 239, 244

[50] Yannis Fragakis and Manolis Papadrakakis, *The Mosaic of High Performance Domain Decomposition Methods for Structural Mechanics: Formulation, Interrelation and Numerical Efficiency of Primal and Dual Methods*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 192(35-36):3799-3830, 2003. 10, 83, 244

[51] Kendall H. Pierson, *A family of Domain Decomposition Methods for the Massively Parallel Solution of Computational Mechanics Problems*. PhD thesis, University of Colorado at Boulder, Aerospace Engineering, 2000. 10, 83

[52] Manoj Bhardwaj, Kendall H. Pierson, Garth Reese, Tim Walsh, David Day, Ken Alvin, James Peery, Charbel Farhat, and Michel Lesoinne. Salinas, *A Scalable Software for High Performance Structural and Solid Mechanics Simulation*. In ACM/IEEE Proceedings of SC02: High Performance Networking and Computing. Gordon Bell Award, pages 1-19, 2002. 10, 83, 244

[53] Klawonn, A., Rheinbach, O., *Highly Scalable Parallel Domain Decomposition Methods with an Application to Biomechanics*, Journal of Applied Mathematics and Mechanics 90 (1): 5-32, doi:10.1002/zamm.200900329. 10, 83, 239, 244

[54] Petter E. BjØrstad and Morten Skogen. *Domain Decomposition Algorithms of Schwarz Type, Designed for Massively Parallel Computers*. In David E. Keyes, Tony F. Chan, Gerard A. Meurant, Jeffrey S. Scroggs, and Robert G. Voigt, editors. Fifth International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, pages 362-375, Philadelphia, PA, 1992. SIAM. Norfolk, Virgina, May 6-8, 1991. 10, 83

[55] Yau Shu Wong and Guangrui Li. *Exact Finite Difference Schemes for Sol-ving Helmholtz Equation at any Wavenumber*. International Journal of Numerical Analysis and Modeling, Series B, Volume 2, Number 1, Pages 91-108, 2011. 171

[56] Zhangxin Chen, Guanren Huan and Yuanle Ma. *Computational Methods for Multiphase Flow in Porous Media*, SIAM, 2006. 48

[57] Jos Stam. SIGGRAPH 99, Proceedings of the 26th annual conference on Computer Graphics and Interactive Techniques, Pages 121-128, ACM, 1999. 78

[58] Herrera, I., *Theory of Differential Equations in Discontinuous Piecewise-Defined-Functions*, NUMER METH PART D.E., 23(3): 597-639, 2007 OI 10.1002/num.20182. 240

[59] Herrera, I. *New Formulation of Iterative Substructuring Methods Without Lagrange Multipliers: Neumann-Neumann and FETI*, NUMER METH PART D.E. 24(3) pp 845-878, May 2008 DOI 10.1002/num.20293.

[60] Herrera I. and R. Yates, *Unified Multipliers-Free Theory of Dual Primal Domain Decomposition Methods*. NUMER. METH. PART D. E. 25(3): 552-581, May 2009, (Published on line May 13, 2008) DOI 10.1002/num.20359.

[61] Herrera, I. & Yates R. A., *The Multipliers-Free Domain Decomposition Methods*, NUMER. METH. PART D. E., 26(4): pp 874-905, July 2010. (Published on line: 23 April 2009, DOI 10.1002/num.20462) 168, 169, 253, 255, 259, 265, 266, 280

[62] Herrera, I., Yates R. A., *The multipliers-Free Dual Primal Domain Decomposition Methods for Nonsymmetric Matrices*. NUMER. METH. PART D. E. DOI 10.1002/num.20581 (Published on line April 28, 2010). 255, 259, 265, 266

[63] K. Hutter and K. Jöhnk, *Continuum Methods of Physical Modeling.* Springer-Verlag Berlin Heidelber New York 2004. 29

[64] Herrera, I., Carrillo-Ledesma A. and Alberto Rosas-Medina, *A Brief Overview of Non-Overlapping Domain Decomposition Methods*, Geofisica Internacional, Vol, 50, 4, October-December, 2011. 113, 165, 239, 251, 257, 262, 265, 269

[65] X. O. Olivella, C. A. de Sacribar, *Mecánica de Medios Continuos para Ingenieros.* Ediciones UPC, 2000. 29

[66] Herrera, I. and Pinder, G. F., *Mathematical Modelling in Science and Engineering: An Axiomatic Approach*, Wiley, 243p., 2012. 7, 25, 29

[67] Ismael Herrera and Alberto A. Rosas-Medina, *The Derived-Vector Space Framerwork and Four General purposes massively parallel DDM Algorithms*, Engineering Analysis with Boundary Elements, 20013, in press. 102, 113, 145, 165, 239, 251

[68] Antonio Carrillo-Ledesma, Herrera, I, Luis M. de la Cruz, *Parallel Algorithms for Computational Models of Geophysical Systems*, Geofísica Internacional, en prensa, 2013. 102, 113, 145, 155, 165, 269

[69] Iván Germán Contreras Trejo, *Métodos de Precondicionamiento para Sistemas de Ecuaciones Diferenciales Parciales*, Trabajo de Tesis Doctoral en Proceso, Postgrado en Ciencias e Ingeniería de la Computación, UNAM, 2012. 192(35-36):3799-3830, 2003. 178, 288

[70] Holger Brunst, Bernd Mohr. *Performance Analysis of Large-Scale OpenMP and Hybrid MPI/OpenMP Applications with Vampir NG.* IWOMP 2005: 5-14. 162, 335

[71] S.J. Pennycook, S.D. Hammond, S.A. Jarvis and G.R. Mudalige, *Performance Analysis of a Hybrid MPI/CUDA Implementation of the NAS-LU Benchmark.* ACM SIGMETRICS Perform. Eval. Rev. 38 (4). ISSN 0163-5999, (2011). 162, 335

[72] Doxygen, *Gererate Documentation from Source Code.* 147
http://www.stack.nl/∼dimitri/doxygen/

[73] XMPI, *A Run/Debug GUI for MPI.* 155, 326
http://www.lam-mpi.org/software/xmpi/

[74] VAMPIR, *Performance Optimization*. 155
http://www.vampir.eu/

Declaramos terminado este trabajo sufrido, ideado y llevado a cabo entre los años 2007 al 2021, aún y a pesar de impedimentos tales como: la mala suerte, la desventura, el infortunio, la incomprensión, la gripe, el COVID-19, la migraña, las horas de frío y calor, la tristeza, la desesperanza, el cansancio, el presente, el pasado y nuestro futuro, el que dirán, la vergüenza, nuestras propias incapacidades y limitaciones, nuestras aversiones, nuestros temores, nuestras dudas y en fin, todo aquello que pudiera ser tomado por nosotros, o por cualquiera, como obstáculo en este tiempo de mentiras, verdades, de incredulidad e ignorancia o negación de la existencia real y física de la mala fe.

Atentamente

Antonio Carrillo Ledesma
Karla Ivonne González Rosas
Omar Mendoza Bernal