

ALGORITMOS DE LAGRANGIANO AUMENTADO PARA PROBLEMAS DE FLUJO NO LINEAL

L. FERRAGUT,*

J. ELORZA*

y

G. WINTER**

** Departamento de Cálculo Numérico e Informática
de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas de Madrid
Rios Rosas, 21 - 28003 Madrid*

*** Departamento de Matemáticas de la Escuela Técnica Superior
de Ingenieros Industriales de Las Palmas.
Tarifa Alta - 35017 Las Palmas*

RESUMEN

Al abordar la resolución de problemas no lineales mediante técnicas de Lagrangiano aumentado es usual utilizar algoritmos del tipo "Uzawa" para el cálculo de la solución; uno de los inconvenientes de tales algoritmos es la adecuada elección de parámetros que aseguren una convergencia rápida. En este trabajo presentamos diversas variantes de los algoritmos antes citados que permiten un cálculo automático de los parámetros y los aplicamos al cálculo de flujo no lineal en medio poroso.

SUMMARY

While studying the resolution of nonlinear problems by Lagrangian augmented methods the Uzawa-Like algorithms are usual to find the solution; the key point in these algorithms is the selection of an optimal value of the parameters to assure a high-speed convergence. In this work we present an application of these algorithms to the nonlinear flow problem through porous media and we propose a way to select the values of the parameters mentioned above.

INTRODUCCION

Los métodos de Lagrangiano aumentado fueron introducidos por Hestenes¹ y Powell² en 1969, para resolver problemas de optimización. Más recientemente (1974), Glowinski y Marrocco³ utilizan tales métodos en la resolución numérica de problemas de contorno regidos por ecuaciones en derivadas parciales; finalmente Ferragut y Elorza⁴ estudian su aplicación a problemas de flujo no lineal en medio poroso.

Recibido: Septiembre 1986

Muchos problemas de la física se pueden formular de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} & F(Bv) + L(v) \\ & v \in V \end{aligned} \quad (1)$$

V, H espacios vectoriales normados

$B \in L(V, H)$, operador lineal continuo de V en H .

F, L , funciones convexas, propias, semicontinuas inferiormente sobre H y V respectivamente.

El principio de los métodos de Lagrangiano aumentado, véase Fortin, Glowinski⁵ consiste en desacoplar las dificultades inherentes al operador lineal B del carácter no lineal del problema introduciendo una nueva variable y una nueva ecuación.

Así reformulamos (1) de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} & \text{Min } \{ F(q) + L(v) \} \\ & (v, q) \in W \\ & W = \{ (v, q) \in V \times H ; Bv = q \} \end{aligned} \quad (2)$$

La restricción $Bv = q$ se elimina mediante un multiplicador de Lagrange $\mu \in H'$ (dual de H); el problema a resolver es entonces el cálculo de un punto silla de la funcional

$$\mathfrak{L}(v, q, \mu) = F(q) + L(v) + \langle \mu, Bv - q \rangle \quad (3)$$

o bien de la Lagrangiana aumentada

$$\mathfrak{L}_r(v, q, \mu) = \mathfrak{L}(v, q, \mu) + \frac{r}{2} \|Bv - q\|^2 \quad (4)$$

siendo $\langle \cdot, \cdot \rangle$ y $\|\cdot\|$ el producto de dualidad (o equivalente) entre H' y H y la norma en H respectivamente, o una norma equivalente.

ALGORITMOS GENERALES DE RESOLUCION NUMERICA

Un punto silla de la Lagrangiana \mathfrak{L}_r definida en (4) viene dado por el triplete $(u, p, \lambda) \in W \times H$ tal que verifique:

$$\mathfrak{L}_r(u, p, \mu) \leq \mathfrak{L}_r(u, p, \lambda) \leq \mathfrak{L}_r(v, q, \lambda) \quad (5)$$

cualquiera que sea $(v, q) \in V \times H$ y $\mu \in H$.

El clásico algoritmo de Uzawa para la búsqueda del punto silla de \mathfrak{L}_r se expresa así:

Dado λ^0 arbitrario y una vez conocido el valor aproximado λ^i de λ

1.º) Calculamos (u^{i+1}, p^{i+1}) solución de

$$\mathfrak{L}_r(u^{i+1}, p^{i+1}, \lambda^i) \leq \mathfrak{L}_r(v, q, \lambda^i) \quad (6)$$

para todo $(v, q) \in V \times H$

2.º) Actualizamos el valor de λ

$$\lambda^{i+1} = \lambda^i + \rho_i (Bu^{i+1} - p^{i+1}) \quad (7)$$

siendo $\rho_i > 0$ convenientemente elegido.

3.º) Si $\|Bu^{i+1} - p^{i+1}\| < \epsilon$ paramos el proceso, en caso contrario tomamos $i + 1$ en lugar de i y volvemos al punto 1.º).

Bajo hipótesis bastante generales se puede demostrar (Fortin, Glowinski⁵) la convergencia del algoritmo anterior para $0 < \alpha_0 \leq \rho_i \leq \alpha_1 < 2r$ en el siguiente sentido:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} u^i = u \text{ en la topología fuerte de } V$$

$$\lim_{i \rightarrow \infty} p^i = p \text{ en la topología fuerte de } H$$

$$\lim_{i \rightarrow \infty} (\lambda^{i+1} - \lambda^i) = 0 \text{ en la topología fuerte de } H$$

La sucesión $\{\lambda^i\}_{i=1}^{\infty}$ está acotada en H .

En la práctica la parte 1ª) del algoritmo anterior se descompone en una relación por bloques de la siguiente forma:

1a) Conocido el valor de p_n^{i+1} calculamos u_{n+1}^{i+1} solución de

$$\mathfrak{f}_r(u_{n+1}^{i+1}, p_n^{i+1}, \lambda^i) \leq \mathfrak{f}_r(v, p_n^{i+1}, \lambda^i) \quad (8)$$

para todo $v \in V$

1b) Calculamos p_{n+1}^{i+1} solución de

$$\mathfrak{f}_r(u_{n+1}^{i+1}, p_{n+1}^{i+1}, \lambda^i) \leq \mathfrak{f}_r(u_{n+1}^{i+1}, q, \lambda^i) \quad (9)$$

para todo $q \in H$

1c) Si $\|p_{n+1}^{i+1} - p_n^i\| \leq \epsilon'$ pasar al punto 2.º con

$$u^{i+1} = u_{n+1}^{i+1} \quad \text{y} \quad p^{i+1} = p_{n+1}^{i+1}$$

En caso contrario tomar $n+1$ en lugar de n y volver a 1a).

Si nos limitamos a una sola iteración de relajación el algoritmo que obtenemos es el siguiente:

Dado p^0 y λ^0 arbitrarios y una vez conocido el valor aproximado de p^i y λ^i

1.º) Calculamos u^{i+1} solución de

$$\mathfrak{L}_r(u^{i+1}, p^i, \lambda^i) \leq \mathfrak{L}_r(v, p^i, \lambda^i) \quad (10)$$

para todo $v \in V$.

2.º) Calculamos p^{i+1} solución de

$$\mathfrak{L}_r(u^{i+1}, p^{i+1}, \lambda^i) \leq \mathfrak{L}_r(u^{i+1}, q, \lambda^i) \quad (11)$$

para todo $q \in H$

3.º) Actualizamos el valor de

$$\lambda^{i+1} = \lambda^i + \rho(Bu^{i+1} - p^{i+1}) \quad (12)$$

4.º) Si $\|Bu^{i+1} - p^{i+1}\| < \epsilon$ paramos el proceso, en caso contrario tomamos $i + 1$ en lugar de i y volvemos al punto 1.º).

Para este último algoritmo se tienen los mismos resultados de convergencia que el primer caso si ρ verifica $0 < \rho < \frac{1+\sqrt{5}}{2} r$ (Véase Fortin, Glowinski⁵).

En general y como se verá en la aplicación que se expone a continuación la resolución del paso 1a en el primer algoritmo o del 1er. paso en el 2.º algoritmo, se reducen a la resolución de un problema lineal y los otros cálculos en los dos algoritmos anteriores, o bien son cálculos explícitos, o la resolución de un problema no lineal donde las incógnitas están desacopladas y la resolución se reduce finalmente a cálculos explícitos.

FLUJO NO LINEAL EN MEDIO POROSO

Para velocidades relativamente altas del flujo a través de un medio poroso se producen desviaciones significativas de la ley de Darcy, por lo que resulta necesario utilizar otras expresiones matemáticas para representar la relación no lineal, existente en muchos casos, entre el gradiente hidráulico y la velocidad de flujo, véase por ejemplo Nazeer⁶. Las expresiones de uso más generalizado son las de tipo binómico y las de tipo exponencial; ésta última consiste en sustituir la ley de Darcy $\mathbf{v} = -k \nabla u$, donde \mathbf{v} es la velocidad del fluido, u la altura piezométrica y k la conductividad hidráulica por la siguiente:

$$\mathbf{v} = -k_n |\nabla u|^{n-1} \nabla u \quad (13)$$

donde $|\cdot|$ designa el módulo de un vector en R^d ($d=1, 2$ ó 3) y k_n es una constante que depende del exponente n que a su vez depende del valor de $|\nabla u|$. En régimen lineal

$n=1$ y en régimen turbulento puro $n=0.5$. Las ecuaciones que gobiernan el flujo estacionario en un medio isótropo, $\Omega \subset R^d$ serán:

$$\begin{aligned} -\nabla(k_n |\nabla u|^{n-1}) \nabla u &= f && \text{en } \Omega \\ u &= u_0 && \text{sobre } \Gamma_0 \\ -k_n |\nabla u|^{n-1} \frac{\partial u}{\partial n} &= g && \text{sobre } \Gamma_1 \end{aligned} \quad (14)$$

siendo $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$ el contorno de Ω y f , u_0 y g funciones conocidas que representan respectivamente el caudal volumétrico aportado en cada punto de Ω , la altura piezométrica conocida en Γ_0 y el flujo conocido en Γ_1 .

FORMULACION VARIACIONAL

Es bien conocido que la solución u de (14) es también solución del siguiente problema de optimización:

$$J(u) = \underset{v \in K}{\text{Min}} J(v) \quad (15)$$

donde $J(\cdot)$ viene dada por ($s=n+1$):

$$J(v) = \frac{1}{s} \int_{\Omega} k_n |\nabla v|^s dx - \int_{\Omega} f v dx - \int_{\Gamma_1} g v d\gamma \quad (16)$$

y siendo $K = \{v \in W^{1,s}(\Omega) ; v|_{\Gamma_0} = u_0\}$ y $W^{1,s}$ el espacio de Sobolev $\{v \in L^s(\Omega) ; \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^s(\Omega), 1 \leq i \leq d\}$

Aquí desacoplamos el operador gradiente $\nabla(\cdot)$ de la ley no lineal de flujo; así la lagrangiana (3) toma en este caso la forma:

$$\mathcal{L}(v, \mathbf{q}, \underline{\mu}) = \frac{1}{s} \int_{\Omega} k_n |\mathbf{q}|^s dx - \int_{\Omega} f v dx - \int_{\Gamma_1} g v d\gamma + \int_{\Omega} k_d \underline{\mu} (\nabla v - \mathbf{q}) dx \quad (17)$$

y elegimos como lagrangiana aumentada:

$$\mathcal{L}_r(v, \mathbf{q}, \underline{\mu}) = \mathcal{L}(v, \mathbf{q}, \underline{\mu}) + \frac{r}{2} \int_{\Omega} k_d (\nabla v - \mathbf{q})^2 dx \quad (18)$$

siendo k_d la conductividad de Darcy.

En la práctica hallamos el punto silla de la versión discretizada de (18) mediante el método de elementos finitos.

ALGORITMOS DE RESOLUCION

Algoritmo de Uzawa

El algoritmo utilizado en Ferragut y Elorza⁴ para la búsqueda de un punto silla de (18) es el algoritmo descrito por las expresiones (10), (11) y (12) para el caso general, es decir, el de Uzawa combinado con una relajación por bloques en cada iteración:

Se eligen \mathbf{p}^0 y $\tilde{\lambda}^0$ arbitrarios

1.º) Conocido \mathbf{p}^i y $\tilde{\lambda}^i$ calculamos u^{i+1} resolviendo:

$$r \int_{\Omega} k_d \nabla u^{i+1} \nabla v \, dx = \int_{\Omega} k_d (r\mathbf{p}^i - \tilde{\lambda}^i) \nabla v \, dx + \int_{\Omega} f v \, dx + \int_{\Gamma_1} g v \, d\gamma \quad (19)$$

$\forall v \in V_h$ (Subespacio de dimensión finita).

2.º) Calculamos \mathbf{p}^{i+1} resolviendo el problema no lineal local en cada punto de integración:

$$k_n |\mathbf{p}^{i+1}|^{s-2} \mathbf{p}^{i+1} + r k_d \mathbf{p}^{i+1} = (r \nabla u^{i+1} + \tilde{\lambda}^i) k_d \quad (20)$$

3.º) Calculamos λ^{i+1} mediante el cálculo explícito en cada punto de integración ($\rho > 0$):

$$\tilde{\lambda}^{i+1} = \tilde{\lambda}^i + \rho (\nabla u^{i+1} - \mathbf{p}^{i+1}) \quad (21)$$

Si $\|\nabla u^{i+1} - \mathbf{p}^{i+1}\| > \epsilon \|\nabla u^{i+1}\|$ hacemos i igual a $i+1$ y volvemos al paso 1.º.

Estimación de parámetros

Los valores óptimos de r y ρ en el algoritmo anterior dependen de cada tipo de problema y de los datos del mismo. Experimentalmente se observa que el tomar $\rho=r$ conduce a resultados satisfactorios, por otra parte si utilizamos el algoritmo anterior para la resolución del caso lineal obtenemos la convergencia de la variable u en una sola iteración si elegimos $\rho=r=1$; en efecto, supongamos $s=2$, $\tilde{p}^0 = \tilde{\lambda}^0 = 0$, la resolución de (20) y (21) en la primera iteración proporciona los valores

$$\mathbf{p}^1 = \frac{\nabla u^1}{2} \quad \text{y} \quad \tilde{\lambda}^1 = \frac{\nabla u^1}{2}$$

en consecuencia, al calcular u^2 mediante (19) obtenemos $u^2 = u^1$ solución de:

$$\int_{\Omega} k_d \nabla u^1 \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx + \int_{\Gamma_1} g v \, d\gamma \quad (22)$$

que es el problema lineal en su forma variacional clásica. Observemos sin embargo que la convergencia de $\mathbf{p}^i \rightarrow \nabla u$ no se obtiene en una iteración sino que de (20) y (21) deducimos $\mathbf{p}^i = \tilde{\lambda}^i$ y así:

$$\mathbf{p}^{i+1} = \frac{\nabla u^{i+1} + \tilde{\lambda}^i}{2} = \frac{\nabla u^{i+1} + \mathbf{p}^i}{2} \quad (23)$$

de donde teniendo en cuenta que $\nabla u^i = \nabla u^0 = \nabla u$ para todo i resulta:

$$\mathbf{p}^i = \frac{(2^i - 1) \nabla u}{2^i} \quad (24)$$

existe pues un desacoplamiento entre la convergencia en u y la de \mathbf{p} . Para trasladar estos resultados al caso no lineal habrá que tomar $r = \rho$ de forma que $r k_d = k_n |\nabla u|^{n-1}$ que es la conductividad en el caso de la ley exponencial, estimaremos el valor de r con la solución obtenida en la aproximación anterior y la expresión (19) del algoritmo de Uzawa se sustituye por:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} k_n |\nabla u^i|^{n-1} \nabla u^{i+1} \nabla v \, dx &= \int_{\Omega} (k_n |\nabla u^i|^{n-1} \mathbf{p}^i - k_d \tilde{\lambda}^i) \, dx + \\ &+ \int_{\Omega} f v \, dx + \int_{\Gamma_1} g v \, d\gamma \end{aligned} \quad (25)$$

Obtenemos así un algoritmo que recuerda al clásico de Newton con la ventaja que éste conserva la simetría inicial del problema, con lo cual para la resolución de (25) podemos utilizar un método iterativo tipo SOR o gradiente conjugado preconditionado (GCP) con el fin de evitar la factorización de la matriz del sistema en cada paso.

APLICACIONES

Acuífero confinado

Se ha aplicado el nuevo algoritmo a la resolución del ejemplo ya expuesto en Ferragut y Elorza⁴, de un acuífero que ocupa una región rectangular, con dos pozos y una corriente de aporte de agua que la divide. La convergencia medida con $\|\mathbf{p} - \nabla u\| < \epsilon$ $\|\nabla u\|$ se obtenía para un valor de $\epsilon = 10^{-3}$ en 11 iteraciones utilizando el algoritmo de Uzawa con $\rho=r=1$ que se demostró que eran los valores óptimos en este ejemplo.

Con la modificación introducida (expresión (25)) la convergencia se obtiene en 8 iteraciones; además si se utiliza un método iterativo en la resolución del sistema lineal un error del 10% es permisible con lo cual el número de iteraciones internas (SOR ó GCP) disminuye considerablemente sin afectar por ello al número de iteraciones externas (Uzawa modificado). Los datos del problema, mallado y la solución correspondiente han sido expuestas en Ferragut y Elorza⁴ y por ello no los reproducimos aquí.

Explotación minera a cielo abierto

En este ejemplo (Elorza y Ferragut⁷) presentamos un cálculo realizado sobre una mina a cielo abierto con un sistema de pozos paralelos al eje mayor de la corta destinados a impedir la inundación de la mina. En la Figura 1 se muestra la sección media con

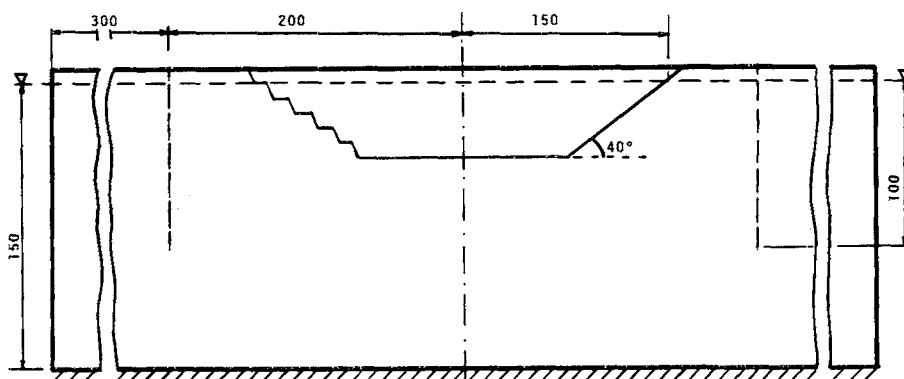


Figura 1. Sección de la mina

las condiciones de contorno; hemos dibujado con línea punteada la futura posición de los pozos. Las condiciones de contorno impuestas se indican en la Figura 2. El cálculo de las reacciones nodales en el pozo permite conocer el caudal de extracción necesario para mantener la superficie freática por debajo de la superficie de la mina. El valor de la permeabilidad de Darcy, k_d , tomado, es de 2000m/día y la relación k_m/k_d figura en la tabla 1. El modelo realizado evita parte de la zona seca estimada mediante un modelo más grosero que el aquí utilizado (Figura 3) correspondiente a una interpolación lineal en cada triángulo, con 1022 nodos y 1886 elementos.

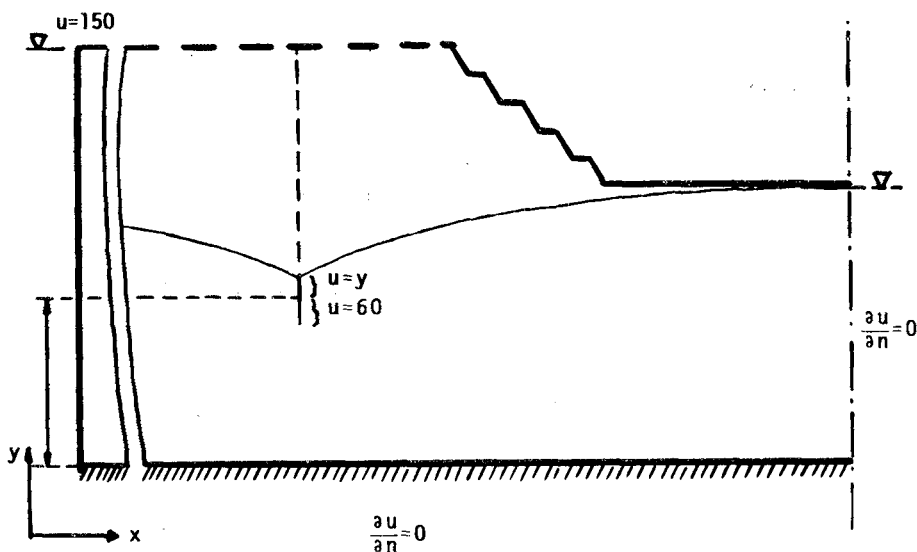


Figura 2. Modelo y condiciones de contorno

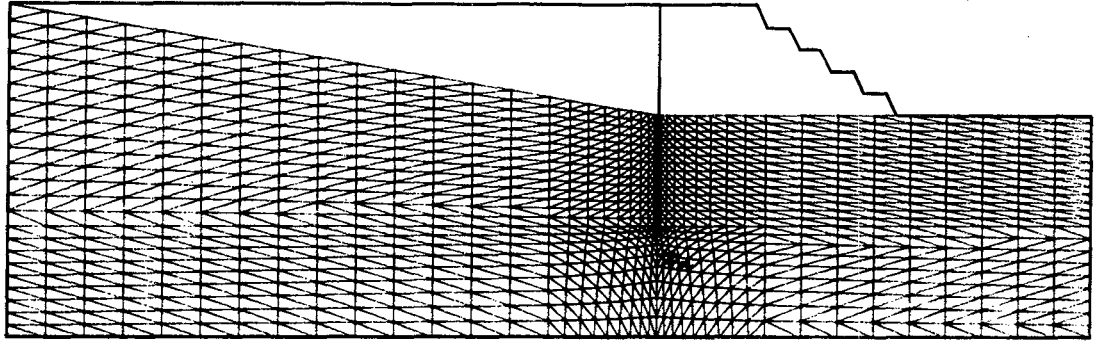


Figura 3. Mallado

k_n	k_n/k_d	n	$ \nabla u $
2000	1	1	$0. - 10^{-2}$
1200	0.6	0.89	$10^{-2} - 10^{-1}$
580	0.29	0.69	$10^{-1} - 10^0$
520	0.26	0.56	$10^0 - 10^1$
580	0.29	0.52	$10^1 - 10^2$

Tabla 1. Descripción de la ley no lineal de flujo

El tratamiento de la superficie libre se describe en Ferragut y Elorza⁴ y en Elorza y Ferragut⁷ y el cálculo de la solución realizado mediante el algoritmo de Uzawa implica un número de iteraciones igual a 50 para una tolerancia de error de 10^{-3} ; con el algoritmo modificado aquí propuesto el número de iteraciones necesario es de 10. La importante reducción en el número de iteraciones necesarias para alcanzar la convergencia hace que el ahorro en tiempo de cálculo sea significativo, aproximadamente a la mitad en este ejemplo, a pesar de que el costo por iteración sea mayor con el nuevo método.

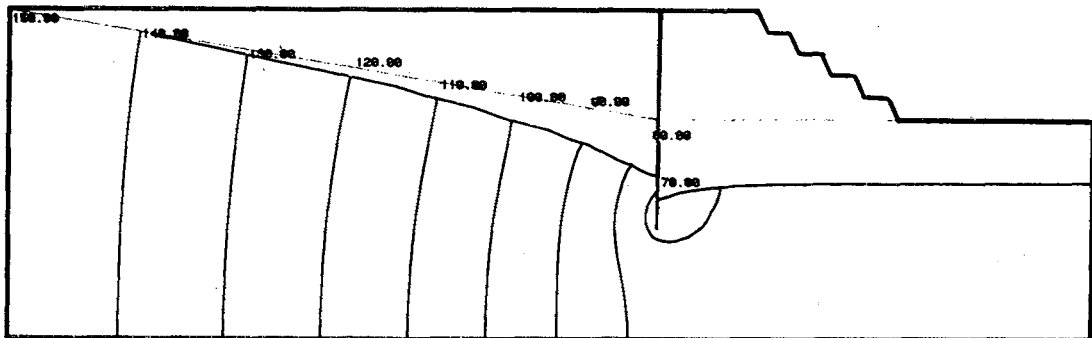


Figura 4. Superficie libre y líneas de igual altura piezométrica

En la Figura 4 se representa la posición de la superficie libre una vez alcanzado el equilibrio y también se han representado las líneas de igual altura piezométrica.

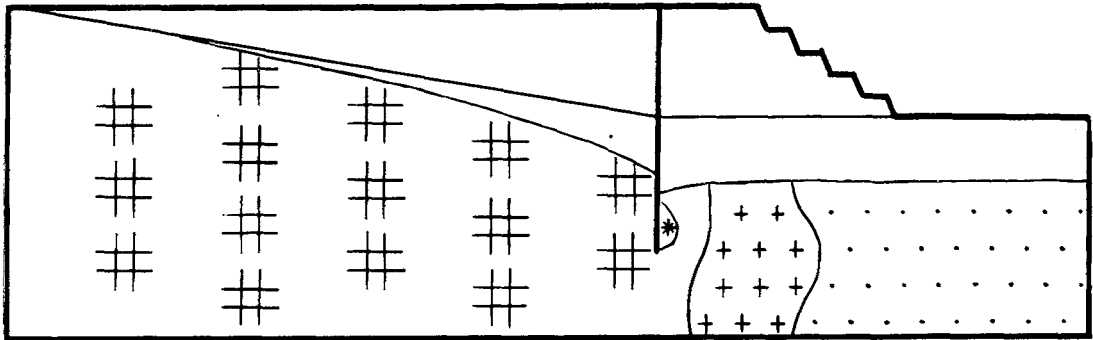


Figura 5. Distribución de zonas no lineales

Finalmente, en la Figura 5 se señalan las zonas con diferente carácter no lineal en función del valor del gradiente, así tenemos:

Intervalo de $ \nabla u $	Tipo de marca
$0 - 10^{-2}$.
$10^{-2} - 10^{-1}$	+
$10^{-1} - 10^0$	#
$10^0 - 10^1$	*
$10^1 - 10^2$	\$

Tabla 2. Indicativo de las zonas de no linealidad

REFERENCIAS

1. M. Hestenes. "Multiplier and gradient methods". *J. Optimization theory and Applications* 4, 303-329 (1969).
2. M. J. D. Powell. "A method for nonlinear constraints in minimization problems". En: *Optimization*, ed. R. Fletcher, Editorial Academic Press, London, U. K. (1969).
3. R. Glowinski y A. Marrocco. "Sur l'approximation par éléments finis d'ordre un, et la résolution par pénalisation-dualité d'une classe de problèmes de Dirichlet non linéaires" *Rapport de Recherche*, 115, I.R.I.A. (1975).

4. L. Ferragut y J. Elorza. "Un método de Lagrangiano aumentado para la resolución de problemas de flujo no lineal en medio poroso" *Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería*, **1, 3**, 27-35 (1985).
5. M. Fortin y R. Glowinski. "*Méthodes de Lagrangien augmenté*". Editorial Dunod, París, Francia (1982).
6. A. Nazeer y D. K. Sunada. "Nonlinear flow in porous media". *Journal of the Hydraulics División HY6*, 1847-1857 (1969).
7. J. Elorza y L. Ferragut. "A finite element approximation of nonlinear flow in porous media". *II Congreso Internacional del agua en la minería*. Ed. R. Fernández Rubio, Granada, España (1985).