

Título de la Tesis: "Tecnología de matrices ralas en Ingeniería Química"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Ugrin, Pedro Ernesto

Director: Dr. Guillermo Crapiste

Resumen

En Ingeniería Química muy frecuentemente nos enfrentamos a la necesidad de resolver sistemas lineales del tipo:

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

donde, en general, la matriz A es grande, rala, no singular y no simétrica.

Generalmente al modelar un dado problema no nos encontramos directamente con estos sistemas lineales, excepto en los casos más simplificados, sino que los que aparecen son: grandes sistemas de ecuaciones no lineales, tal es el caso de los problemas de flowsheeting; o ecuaciones diferenciales parciales

Título de la Tesis: "Tecnología de matrices ralas en Ingeniería Química"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Ugrin, Pedro Ernesto

Director: Dr. Guillermo Crapiste

elípticas, como en transferencia de calor y materia o en fluidomecánica; o sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, como, por ejemplo, en la simulación dinámica de columnas de destilación, en el modelamiento de reactores de polimerización de etileno por el proceso de alta presión, etc. La resolución de estos problemas mediante técnicas numéricas como: métodos tipo Newton o Cuasi-Newton para los sistemas no lineales, diferencias finitas para las ecuaciones diferenciales parciales y métodos de integración del tipo predictor-corrector para los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, nos pone ante la necesidad de resolver muchas veces grandes sistemas de ecuaciones lineales del tipo (1).

En este trabajo se consideran métodos iterativos para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales, grandes, ralas, no singulares y no simétricos. Se presentan aquí una serie de procedimientos iterativos para resolver tales sistemas y se estudia la factibilidad de utilizar dichos procedimientos en la resolución de los sistemas lineales que aparecen en los problemas de Ingeniería Química antes mencionados. También se presentan nuevos resultados teóricos acerca de la aptitud de tales procedimientos en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales elípticas no-autoadjuntas. Además se presenta un nuevo paquete integrador para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias que permite el uso de los métodos iterativos aquí tratados, con tecnología de matrices ralas, para la resolución de los sistemas de ecuaciones lineales que aparecen en la integración numérica de dichas ecuaciones diferenciales por métodos implícitos del tipo predictor-corrector. Se examina la performance de dichos métodos

Título de la Tesis: "Tecnología de matrices ralas en Ingeniería Química"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Ugrin, Pedro Ernesto

Director: Dr. Guillermo Crapiste

iterativos y del nuevo paquete integrador sobre un variado conjunto de experimentos numéricos, comparando los métodos iterativos entre sí y con métodos directos con tecnología de matrices ralas y sin ella (método de descomposición LU para matrices ralas y para matrices llenas).

La mayoría de las técnicas consideradas, exceptuando los métodos clásicos de Gauss-Seidel y Sobrerrelajación Simétrica Sucesiva (SSOR), son similares en su forma al método del Gradiente Conjugado para problemas simétricos y definidos positivos. Se han elegido estos métodos porque no requieren de la estimación de parámetros a priori.

Se hace una breve recopilación teórica de las técnicas consideradas fundamentalmente en cuanto a sus propiedades de convergencia.

Primero se presentan los métodos del Gradiente Conjugado y del Residuo Conjugado para problemas simétricos y definidos positivos, de una forma distinta a las conocidas, ya que partiendo de un algoritmo general único basado en el algoritmo original de Hestenes y Stiefel, usando una convención distinta para los productos escalares, se deducen ambos métodos. Dicha presentación permite apreciar más claramente las diferencias entre ambos métodos y sus propiedades más sobresalientes. Estos métodos no se han implementado ni usado en este trabajo, pero se tratan aquí porque a partir de ellos se derivan los métodos estudiados en esta tesis.

Los métodos iterativos tratados, implementados y usados aquí, además de los clásicos de Gauss-Seidel y Sobrerrelajación Simétrica Sucesiva(SSOR), son generalizaciones de los métodos

Título de la Tesis: "Tecnología de matrices ralas en Ingeniería Química"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Ugrin, Pedro Ernesto

Director: Dr. Guillermo Crapiste

del Gradiente Conjugado (métodos de Craig, Orthores y Orthores(k)) y del Residuo Conjugado (métodos Orthomin, Orthomin(k), Orthodir y Orthodir(k)). Estos métodos, tienen mejores propiedades de convergencia en los casos de problemas no singulares y no simétricos en general.

Estos métodos mejoran ampliamente su performance mediante el uso de técnicas de preconditionado de la matriz de coeficientes, cuyo objetivo es disminuir el esfuerzo computacional necesario para resolver (1). Para ello se busca una matriz auxiliar que sea una buena aproximación de A , de manera que la matriz de coeficientes del sistema preconditionado se aproxime, en algún sentido, más a la matriz identidad que A , y los métodos iterativos converjan entonces más rápidamente que cuando se aplican directamente a (1). Para hallar dicha matriz auxiliar se muestran aquí, dos técnicas basadas en la factorización incompleta de la matriz de coeficientes A . También se examina la performance de los distintos métodos preconditionados sobre el mismo conjunto de experimentos numéricos antes mencionado.

Se ha probado en esta tesis que los métodos iterativos tratados son mucho más eficientes en cuanto a costos de almacenamiento y de operación que los métodos directos cuando se trata de sistemas de ecuaciones lineales grandes y con porcentajes de no nulos relativamente altos ($\geq 10\%$). Esto significa que con los métodos iterativos aquí estudiados se pueden considerar ralas y se pueden tratar como tales, sistemas de ecuaciones con porcentajes de no nulos mucho más altos que lo que permiten los métodos directos con tecnología de matrices ralas, ya que estos últimos presentan ventajas significativas

Título de la Tesis: "Tecnología de matrices ralas en Ingeniería Química"

Doctorado en Ingeniería Química

Autor: Ugrin, Pedro Ernesto

Director: Dr. Guillermo Crapiste

respecto de las técnicas de matrices llenas para porcentajes de no nulos entre 2 y 3%.

Los resultados teóricos obtenidos y los códigos implementados en esta tesis constituyen una poderosa herramienta, fundamentalmente desde el punto de vista de las computadoras personales (PC), para la resolución de los modelos matemáticos que aparecen en los problemas de la Ingeniería Química actual.