



HAL
open science

En la frontera de lo simulable

Francisco Chinesta

► **To cite this version:**

Francisco Chinesta. En la frontera de lo simulable. Enrique Alarcón Álvarez; Antonio Foces Mediavilla; Federico Paris Carballo. Avances en Mecánica de los Medios Continuos, Universidad de Valladolid, pp.211-226, 2007, 84-8448-406-8. hal-00289654

HAL Id: hal-00289654

<https://hal.science/hal-00289654>

Submitted on 5 Jun 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

EN LA FRONTERA DE LO SIMULABLE

Francisco Chinesta

*Laboratoire de Mécanique de Systèmes et de Procédés
UMR 8106 CNRS-ENSAM-Polytech'Orléans
151 Boulevard de l'Hôpital, F-75013 Paris (Francia)*

Dedico este trabajo a la memoria del profesor José Antonio Garrido, compañero y amigo, cuyo remarcable entusiasmo en lo profesional y en lo personal han sido y serán un ejemplo para todos los que hemos tenido la suerte de conocerlo y de merecer su aprecio y amistad.

Resumen

En la última década hemos asistido a un tremendo desarrollo de las técnicas de simulación numérica, que han dado lugar a la aparición de nuevas estrategias alternativas a aquellas más experimentadas, capaces de aliviar algunas de las principales limitaciones de aquellas.

La potencia de cálculo disponible ha permitido expandir las fronteras del modelado numérico mediante la introducción de una física más rica y la exploración de escalas hasta el presente inabordables.

En este trabajo trataremos de definir la frontera de la ciencia en lo que respecta al tamaño de los complejos modelos abordables con las técnicas numéricas actuales.

1. Reducción de modelos

1.1 Introducción

El tamaño de los modelos discretos resultantes de la discretización de los complejos modelos continuos de la física y la ingeniería ha ido creciendo al mismo ritmo que lo han hecho las capacidades informáticas. Así, los miles de grados de libertad característicos de las primeras simulaciones unas décadas

atrás, han dado paso a los miles de millones característicos de las simulaciones más recientes. En cualquier caso, pese a que la potencia de cálculo sigue creciendo, aun lo hacen con mayor intensidad las ambiciones que los científicos nos fijamos en términos de simulación. De este modo, tan pronto una meta es franqueada, otras, aun más ambiciosas si cabe, surgen de inmediato.

En este trabajo trataremos de analizar algunas técnicas capaces de aliviar el cálculo mediante la reducción de los discretos, y propondremos otra capaz de resolver algunos modelos nunca hasta ahora resueltos.

1.2 La descomposición de Karhunen-Loève

Asumamos conocida la evolución de un cierto campo tensorial (que consideraremos en lo que sigue escalar por simplicidad) $u(\mathbf{x}, t)$, que depende de las coordenadas espaciales \mathbf{x} y del tiempo t . Desde el punto de vista práctico dicho campo queda definido a partir de su valor en ciertos puntos (nodos) y para ciertos instantes de tiempo $u(\mathbf{x}_i, t^p) \equiv u_i^p$, $\forall i \in [1, \dots, N]$ y $\forall p \in [1, \dots, P]$. La idea principal de la descomposición Karhunen-Loève (KL) es la obtención de las funciones $\varphi(\mathbf{x})$ que mejor aproximan la evolución $u^p(\mathbf{x})$, $\forall p$. Dicho cálculo se realiza mediante la maximización del producto escalar entre dicha función y los vectores en \mathbb{R}^N definiendo la solución en los diferentes instantes de tiempo, esto es:

$$\max \alpha = \frac{\sum_{p=1}^P \left[\sum_{i=1}^N \varphi(\mathbf{x}_i) u_i^p \right]^2}{\sum_{i=1}^N (\varphi(\mathbf{x}_i))^2} \quad (1)$$

La maximización expresada en la ecuación (1) da lugar al problema de valores propios [1]:

$$\mathbf{k}\boldsymbol{\varphi} = \alpha\boldsymbol{\varphi} \quad (2)$$

donde la matriz \mathbf{k} resulta:

$$\mathbf{k} = \mathbf{Q} \mathbf{Q}^T \quad (3)$$

con

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} u_1^1 & u_1^2 & \cdots & u_1^P \\ u_2^1 & u_2^2 & \cdots & u_2^P \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_N^1 & u_N^2 & \cdots & u_N^P \end{pmatrix} \quad (4)$$

La solución del problema (2) consiste en N parejas autovalor-autovector. Sin embargo, cuando la física involucrada es suficientemente regular, y éste es el caso en numerosos modelos de la física, la magnitud de los autovalores decrece rápidamente, evidenciando que la solución puede ser representada como una combinación lineal de los autovectores asociados a los mayores autovalores.

Desde el punto de vista práctico, consideraremos los autovalores ordenados de forma creciente $\alpha_1 > \alpha_2 > \dots > \alpha_N$. Los n autovalores verificando $\alpha_1 > \dots > \alpha_n$ con $\alpha_n > \alpha_{n+1} 10^{-8}$ y $\alpha_{n+1} < \alpha_1 10^{-8}$ son seleccionados, y los autovectores asociados son susceptibles de poder representar con precisión la evolución de la solución.

En numerosos modelos $n \ll N$ y además n depende únicamente de la regularidad de la solución, pero en absoluto de la dimensión del espacio físico (1D, 2D or 3D) ni del número de nodos considerado N .

La base de aproximación reducida está formada por los n autovectores $\varphi_1, \dots, \varphi_n$, asociados a aquellos autovalores, que permiten definir la matriz \mathbf{B} de transformación entre la aproximación nodal y la asociada a la base reducida:

$$\mathbf{B} = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n) \quad (5)$$

cuyo tamaño resulta $N \times n$. Así pues, el vector que contiene los valores nodales, \mathbf{u} , puede expresarse mediante:

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^n \xi_i \mathbf{B} \xi_i \quad (6)$$

Consideramos ahora el sistema lineal de ecuaciones, resultante de la discretización de un modelo genérico mediante la aplicación de una técnica de discretización adecuada:

$$\mathbf{A} \mathbf{u}^p = \mathbf{f}^{p-1} \quad (7)$$

donde \mathbf{f}^{p-1} hace intervenir la solución en el paso de tiempo precedente. Introduciendo la transformación (6) en el sistema discreto (7) se obtiene:

$$\mathbf{A} \mathbf{u}^p = \mathbf{f}^{p-1} \Rightarrow \mathbf{A} \mathbf{B} \boldsymbol{\xi}^p = \mathbf{f}^{p-1} \quad (8)$$

que premultiplicando por \mathbf{B}^T (equivalente a la utilización de (6) en una formulación Galerkin), resulta:

$$\mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{B} \boldsymbol{\xi}^p = \mathbf{B}^T \mathbf{f}^{p-1} \quad (9)$$

que prueba que el sistema lineal resultante tiene la dimensión $n \times n$, con $n \ll N$, siendo la dimensión del vector incógnita $\boldsymbol{\xi}$, $n \times 1$.

1.3 Enriquecimiento de la base de aproximación

La técnica que acabamos de introducir permite la resolución rápida de modelos que contienen un gran número de grados de libertad. Diferentes estrategias han sido para ello utilizadas.

Una primera posibilidad consiste en resolver el modelo dinámico de forma directa durante un cierto (relativamente corto) intervalo de tiempo $]0, t_1]$ utilizando una técnica de discretización adecuada (diferencias finitas, elementos finitos, volúmenes finitos, elementos de contorno, ...). Durante esta simulación se extraen las soluciones que componen la matriz \mathbf{Q} . Con esta matriz calculada, se resuelve el problema de valores propios (2) y se extraen todos aquellos vectores propios significativos (aquellos asociados a los mayores valores propios y que por ello representan la casi totalidad de la energía asociada al sistema). Dichos autovectores permiten, como refleja (5), la definición de la matriz de cambio de base (base nodal a base reducida) y por lo tanto la definición del modelo reducido (9). La reducida dimensión de (9) permite, aun en el caso de modelos no lineales y discretizaciones temporales implícitas, una rápida evaluación de la evolución temporal de la solución en el intervalo de tiempo $]t_1, t_{\max}]$, donde $t_{\max} \gg t_1$.

Otra posibilidad consiste en resolver un problema directo en todo el intervalo de tiempo $]0, t_{\max}]$ y extraer la base que será utilizada posteriormente para resolver problemas similares a aquel que sirvió para definir la base de aproximación reducida. Entendemos por problema similar aquel en el cual únicamente la magnitud de las condiciones de contorno varía. Esta estrategia ha sido ampliamente utilizada en el control de reactores químicos (veanse las referencias en [1]).

En ambos tipos de estrategia no se tiene finalmente un control preciso de la calidad de la solución obtenida. El cálculo es, que duda cabe, rápido, pero la cuestión de la calidad de la solución es su principal punto débil.

Una posibilidad sería evaluar la calidad de la solución en ciertos instantes de tiempo, mediante el cálculo del residuo \mathbf{R} que resulta a partir de (9):

$$\mathbf{R} = \mathbf{A} \mathfrak{B}^c \mathbf{B}^T \mathbf{f}^{c-1} \quad (10)$$

donde el superíndice c hace referencia al paso de tiempo en el que se controla la calidad de la solución. Si la norma del residuo es suficientemente pequeña, la evolución en tiempo puede proseguir. Si este no es el caso, debería procederse al enriquecimiento de la base de aproximación y a calcular de nuevo la solución entre el instante de control previo y el actual, $]t_{c-1}, t_c]$, utilizando la base de aproximación enriquecida. Este procedimiento se repite hasta que la norma del residuo es suficientemente pequeña.

El candidato más natural para ser integrado en la base de aproximación reducida es el propio residuo, y junto a él, eventualmente, alguno de los subespacios de Krylov por él generados: $\mathbf{B} \leftarrow (\mathbf{B}, \mathbf{R}, \mathbf{AR}, \mathbf{A}^2\mathbf{R})$

Obviamente la etapa de enriquecimiento tiene la tendencia a ir aumentando progresivamente el tamaño de la base de aproximación reducida. Para conseguir estabilizar el tamaño de dicha base, una vez alcanzada una norma del residuo suficientemente pequeña en el instante de control, y antes de proseguir el cálculo en el nuevo intervalo de tiempo $]t_c, t_{c+1}]$, se procede a una descomposición de Karhunen-Loève de toda la solución previamente calculada, esto es, a partir de la matriz \mathbf{Q} asociada al intervalo $]0, t_c]$. El problema de valores propios se formula en la base reducida [1] con la finalidad de efectuar esta descomposición con un mínimo esfuerzo.

1.4 Conclusión

El procedimiento que hemos descrito en esta sección es rápido, preciso y robusto. En efecto, en todos los problemas que hemos considerado, el proceso de enriquecimiento converge en unas cuantas iteraciones (aun en el caso no lineal y con fuertes evoluciones espacio-temporales). El número de funciones características no ha mostrado, como cabía esperar, ninguna dependencia respecto a la dimensión del espacio físico (1D, 2D o 3D). En ciertos problemas físicamente complejos [2] ha permitido una reducción del orden de $10^6 \rightarrow 10$ en el número de grados de libertad (valores nodales frente a coeficientes asociados a las funciones de la base de aproximación reducida) con el consecuente impacto en los tiempos de cálculo que en ocasiones se han visto reducidos en decenas de miles. Sin embargo, como veremos en la sección siguiente, esta técnica ha resultado inviable para el tratamiento de modelos multidimensionales.

2. Modelos multidimensionales

En numerosos campos de la física y de la ingeniería los modelos están definidos en un espacio multidimensional en el que pueden distinguirse las coordenadas llamadas físicas (el espacio 3D), el tiempo y las llamadas coordenadas conformacionales que ilustraremos más adelante. Pese a que este tipo de modelos son necesarios para un modelado fino y rico de ciertos sistemas, hasta la actualidad han sido escasos los trabajos que han abordado la cuestión de su resolución numérica, quizás porque han sido prejuizados (por desgracia erróneamente) imposibles de resolver. Por ello, los científicos han preferido tratar de proponer modelos simplificados definidos en espacios de dimensión razonable, que se han resuelto con algunas técnicas adaptadas a sus múltiples dimensiones, como son las basadas en el método de Monte-Carlo o en

el “*sparse grid*” [3]. Estas técnicas han sido concebidas para que la complejidad del modelo discreto aumente linealmente con la dimensión del espacio y no exponencialmente como lo hacen las técnicas basadas en la construcción de un mallado del dominio de definición del sistema estudiado o de su contorno (MEF, MDF, MEC, MVF ...).

El principal inconveniente de las técnicas de Monte-Carlo es el ruido estadístico que éstas introducen. Además, si se quiere trabajar con un número razonable de trayectorias del sistema estocástico asociado al modelo determinista del sistema, sólo ciertos momentos de la solución pueden ser calculados con relativa precisión (consecuencia del teorema central del límite).

La segunda técnica anunciada, el “*sparse grid*”, no resulta, al menos en su estado actual, adecuada para tratar modelos altamente multidimensionales.

Antes de pasar a describir el interés de efectuar una modelización multidimensional de diferentes sistemas, a través de algunos ejemplos que he considerado en el marco de mis actividades de investigación, y que justifica por tanto que esta descripción no sea exhaustiva, ilustraré la necesidad de proceder a nuevos enfoques, puesto que no se trata únicamente de una limitación de tiempo de cálculo, y por lo tanto de una limitación que debería desaparecer con el progreso de las computadoras.

Supongamos un modelo definido en un espacio de dimensión D que se pretende resolver en un dominio de geometría simple (hipercubo) mediante una técnica basada en la construcción de una malla (o rejilla) del mismo. Si en cada una de las direcciones consideramos $N-1$ intervalos, la malla final del hiper-cubo contendrá N^D nodos. Si $D=80$ y $N=10$ (situación que como se verá está bien por debajo de las expectativas reales) el número de grados de libertad (valores nodales) alcanza la cifra de 10^{80} , cifra que coincide con el supuesto número de partículas elementales en el universo. De este modo queda justificado que si existe un interés en resolver este tipo de modelos, no se puede esperar a la llegada de computadoras capaces de hacerlo, ciertamente no las habrá, o al menos eso cree el autor de estas líneas.

En esta segunda parte del presente artículo, propondremos una técnica precisa, robusta y rápida que ha sido capaz de sobrepasar la frontera de lo que hasta ahora se presumía como dominio de lo simulable. Pero antes de abordar la descripción somera de esta nueva técnica, pasaré revista, como he indicado previamente, a un cierto número de sistemas cuya modelización fina requiere tomar en consideración un gran número de dimensiones.

2.1 Un paseo por el espacio multidimensional

2.1.1 LA ESCALA CUANTICA

Resulta difícil, cuando se habla de una vasta teoría, como lo es la mecánica cuántica, fijar un punto de partida. El mío se situará en 1897 en Cambridge (Reino Unido). Allí J.J. Thompson descubrió la existencia del electrón, y con ello se fijó el punto de partida para una larga aventura científica encaminada a la comprensión de la arquitectura atómica, y con ella las bases de la materia y de los materiales.

Podría parecernos que esta discusión está lejos (nos encontramos ahora en la escala sub-nanométrica) de las cuestiones clave con las que se confrontan diariamente los científicos y más en particular los ingenieros, pero veremos que este análisis es imprescindible para una determinación precisa de los potenciales interatómicos necesarios para las simulaciones de dinámica molecular, que se anuncian como una verdadera revolución en el marco de las aproximaciones micro-macro, capaces estas últimas de ahorrar una buena dosis de fenomenología y empirismo en la construcción de los modelos macroscópicos de uso diario.

Volviendo a la aventura de la estructura atómica, ésta fue evolucionando de la mano de grandes científicos del siglo pasado, desde el llamado modelo “*plum cake*” –el típico pastel inglés- que se reducía a una amalgama de partículas, hasta los más recientes, y que podríamos considerar como definitivos, en el que la entidad de la partícula ya no puede ser disociada de su naturaleza ondulatoria. La dualidad onda-partícula se estableció, y numerosas paradojas animaron (y al parecer lo siguen haciendo) las discusiones científicas. En todo caso, las partículas elementales deben ser concebidas como una función de distribución de probabilidad que cuantifica la probabilidad, en un cierto punto del espacio físico e instante de tiempo, de detectar¹ la partícula al efectuar una medida.

La ecuación básica que rige la evolución de la función de probabilidad es la ecuación de Schrödinger, que para un sistema compuesto por N_e electrones y N_n núcleos atómicos², se escribe [4]:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{e=1}^{e=N_e} \nabla_e^2 \Psi + (V_{ee} + V_{en}) \Psi \quad (11)$$

¹ Detectar debe concebirse en un sentido amplio, pues la reducción de la onda que da lugar a la hipotética partícula sigue siendo objeto de controversia.

² Para simplificar el modelo consideraremos los núcleos atómicos fijos en el espacio, pues siendo su masa mucho mayor que la de los electrones su función de onda está mucho más localizada espacialmente que aquella asociada a los electrones.

donde $\Psi = \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N_e}, t; \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_{N_n})$ es la función de distribución conjunta, definida en el plano complejo, de los N_e electrones, cada uno de ellos “distribuido” en $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^3$, y donde los vectores \mathbf{X}_j representan la posición de los N_n núcleos. $i = \sqrt{-1}$ y \hbar representa la constante de Planck dividida por 2π . Los operadores diferenciales ∇_i^2 están definidos en el espacio de configuración de cada electrón, esto es $\nabla_i^2 = \partial^2/\partial x_i^2 + \partial^2/\partial y_i^2 + \partial^2/\partial z_i^2$. Los potenciales electrón-electrón V_{ee} y electrón-núcleo V_{en} presentes en la ecuación (11) resultan:

$$V_{ee} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=i+1}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \quad (12)$$

$$V_{en} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_n} \frac{e \times q}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_j|} \quad (13)$$

donde e es la carga del electrón y q la del núcleo.

Como se puede comprobar, la ecuación de Schrödinger está definida en un espacio de dimensión $3N_e$ al que hay que añadir la dimensión temporal. Este carácter multidimensional justifica que hasta la fecha no existan soluciones numéricas de dicha ecuación para poblaciones electrón-núcleo suficientemente representativas. Sin embargo, si aceptamos por un instante que dicha resolución puede ser llevada a cabo, ello significaría que la función de distribución conjunta $\Psi = \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N_e}, t; \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_{N_n})$ sería conocida con una precisión suficiente en ciertos puntos, para a partir de ellos ser interpolada a cualquier otro punto del espacio (o más bien hiper-espacio).

Ahora, supuesta conocida dicha distribución, resulta inmediato acceder a la densidad de un cierto electrón en un cierto punto del espacio, definida como la probabilidad³ de encontrar dicho electrón en dicho punto para cualquier configuración de los electrones restantes:

$$\rho_e(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^{3(N_e-1)}} \Psi \Psi^* d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_{e-1} d\mathbf{x}_{e+1} \cdots d\mathbf{x}_{N_e} \quad (14)$$

donde Ψ^* representa la distribución compleja conjugada. La densidad electrónica se obtiene sumando la contribución de todos los electrones:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{e=1}^{N_e} \rho_e(\mathbf{x}) \quad (15)$$

³ La probabilidad se determina a partir del cuadrado del módulo de la distribución compleja.

La aplicación del teorema de Hellmann-Feynman permite interpretar y calcular la fuerza que ejercen estas cargas electrónicas distribuidas sobre los núcleos atómicos en términos de la electrostática clásica. De este modo la fuerza ejercida sobre un núcleo n resulta:

$$\mathbf{f}_n = -\nabla_n V \quad (16)$$

donde el potencial de interacción está compuesto de una contribución electrostática núcleo-núcleo V_m y otra originada por la carga electrónica distribuida V_{ed} , que de acuerdo con el teorema de Hellmann-Feynman también tiene una expresión puramente electrostática, resultando de este modo $V = V_m + V_{ed}$, siendo la expresión de ambas contribuciones:

$$V_m = \sum_{i=1}^{N_n} \sum_{j=i+1}^{N_n} \frac{q^2}{|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j|} \quad (17)$$

$$-\nabla_n V_{ed} = e \times q \times \nabla_l \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_n|} d\mathbf{x} \right) \quad (18)$$

En efecto, dada la imposibilidad de calcular, incluso de forma numérica y por tanto aproximada, la distribución electrónica (mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger) para a partir de dicha solución calcular la densidad electrónica mediante la aplicación de la ecuación (15) y así llegar finalmente a determinar las fuerzas interatómicas a partir de (16), diferentes potenciales interatómicos empíricos han sido propuestos y ampliamente utilizados en las simulaciones de dinámica molecular.

Las simulaciones de dinámica molecular suponen un gran número de núcleos atómicos, cuya posición y velocidad inicial son supuestos conocidos. A partir de dichas posiciones relativas, y habida cuenta del potencial empírico, las fuerzas actuantes sobre cada núcleo pueden ser calculadas, para a partir de la ley de Newton obtener las aceleraciones que permiten finalmente actualizar las velocidades y posiciones atómicas.

Pese a la simplicidad de tal algoritmo de simulación, el paso de tiempo extremadamente reducido a considerar en el esquema evolutivo para garantizar la estabilidad del esquema numérico de evolución, generalmente explícito, así como el extremadamente elevado número de átomos a considerar a fin de definir un dominio representativo en el cual poder obtener con suficiente precisión valores promedios, convierten en tediosas dichas simulaciones. Además, inexorablemente, la validez de los resultados son subsidiarios de la adecuación del potencial empírico considerado al sistema físico analizado.

2.1.2 FLUIDOS NANO-ESTRUCTURADOS

Numerosos materiales están compuestos de largas cadenas macromoleculares. La definición del comportamiento de tales materiales se llevó a cabo históricamente en el marco de la viscoelasticidad en una escala puramente macroscópica. La búsqueda de modelos más y más precisos ha requerido la consideración de la estructura microscópica de dichos materiales. La escala atómica, como hemos visto en la sección anterior, constituye todavía un reto, y a pesar de que existen ciertas tentativas de aplicación de la dinámica molecular, el tamaño de los sistemas así analizados aun no permite una descripción de la reología en las escalas superiores.

Una solución de compromiso consiste en una descripción más grosera de la estructura molecular (“*coarse grained*”) en la que las macromoléculas pueden ser modeladas mediante una serie de resortes (representando la flexibilidad de la molécula) ensamblados entre sí mediante rótulas donde se asumen concentrados los esfuerzos de arrastre que el medio circundante (solvente) puede ejercer sobre la molécula. Un esquema de dicho modelo se ilustra en la figura 1. Además, debido a las interacciones intermoleculares, y en ocasiones también a aquellas puramente Brownianas, unas acciones aleatorias, cuya distribución depende de la física considerada, deben ser además introducidas a nivel de cada rótula.

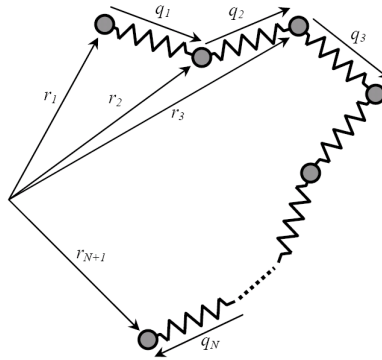


Figura 1: Modelo molecular de un polímero en solución.

Si denotamos por $\dot{\mathbf{r}}_j$ la velocidad de la rótula j y por $\dot{\mathbf{q}}_j$ aquella del correspondiente conector (resorte):

$$\dot{\mathbf{q}}_j = \dot{\mathbf{r}}_{j+1} - \dot{\mathbf{r}}_j, \quad \forall j = 1, \dots, N \quad (19)$$

el equilibrio de cada rótula j se escribe:

$$-\zeta(\dot{\mathbf{r}}_j - \mathbf{v}_0 - (\text{grad } \mathbf{v})\mathbf{r}_j) - \mathbf{F}_j^B + \mathbf{F}_j^c - \mathbf{F}_{j-1}^c = 0 \quad (20)$$

donde ζ es el coeficiente de arrastre, \mathbf{v}_0 la velocidad media, \mathbf{v} el campo de velocidades y \mathbf{F}_i^c la fuerza elástica que el resorte i ejerce sobre la rótula j . El término Browniano \mathbf{F}^B se puede modelizar a partir de un generador de números aleatorios, en general, siguiendo una distribución de media nula y varianza conocida. Este tipo de modelización es el origen de las estrategias de tipo dinámica Browniana. Otra posibilidad es interpretar este término como un término difusivo, esta vez en el marco de una descripción determinista, lo que conduce a la definición de una fuerza dirigida en la dirección del gradiente de la función de distribución asociada a la conformación molecular y con sentido opuesto para garantizar la verificación del segundo principio de la termodinámica:

$$\mathbf{F}_j^B = -k_b T \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_j} \ln(\Psi) = -k_b T \nabla_j (\ln \Psi) \quad (21)$$

descripción esta última que conducirá, como seguidamente veremos, a la ecuación de Fokker-Planck, pilar de la teoría cinética. Antes de adentrarnos en dicho formalismo, conviene definir con precisión el significado de la función de distribución Ψ . Esta función depende de las coordenadas del espacio físico \mathbf{x} , del tiempo t , y de las coordenadas asociadas a la configuración molecular $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N+1}$. Así $\Psi(\mathbf{x}, t, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N+1})$ representa la probabilidad de encontrar en el punto \mathbf{x} del espacio físico y en el instante de tiempo t una molécula cuya conformación queda definida por los vectores $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N+1}$. En la ecuación (21) k_b es la constante de Boltzman y T la temperatura.

Si ahora procedemos a restar las ecuaciones de equilibrio de cada dos rótulas consecutivas, obtendremos:

$$\dot{\mathbf{q}}_j = (\text{grad } \mathbf{v}) \mathbf{q}_j - \frac{1}{\zeta} \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_{jk} \left(k_b T \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_k} \ln(\Psi) + \mathbf{F}_k^c \right) \quad (22)$$

donde la matriz de Rouse \mathbf{A} resulta

$$A_{jk} = \begin{cases} 2 & \text{si } j = k \\ -1 & \text{si } j = k \pm 1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (23)$$

La función de distribución se escribirá en este caso $\Psi(\mathbf{x}, t, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ y la ecuación de conservación asociada resulta

$$\frac{d\Psi(\mathbf{x}, t, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)}{dt} = - \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_j} (\dot{\mathbf{q}}_j \Psi(\mathbf{x}, t, \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)) \right) \quad (24)$$

donde d/dt representa la derivada material en el espacio físico. Introduciendo ahora la expresión (22) en la ecuación de conservación (24) se obtiene la ecuación de convección-difusión conocida como ecuación de Fokker-Planck

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi}{dt} = & - \sum_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_j} \left(\left((\text{grad } \mathbf{v}) \cdot \mathbf{q}_j - \frac{1}{\zeta} \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_{jk} \mathbf{F}_k^c \right) \Psi \right) \right) + \\ & + \frac{k_b T}{\zeta} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_{jk} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{q}_j \partial \mathbf{q}_k} \end{aligned} \quad (25)$$

Como puede observarse la ecuación (25) está definida en un espacio de dimensión $3 + 1 + 3 \times N$, de modo que aun asumiendo un flujo homogéneo y el estado estacionario, esto es $\Psi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$, la consideración de un modelo molecular compuesto de una treintena de resortes, muy por debajo de lo que sería físicamente deseable, conduciría a un espacio de configuraciones cuya dimensión alcanzaría la centena, en cuyo caso, y aun asumiendo una malla muy grosera, el número de nodos de la rejilla resultante contendría del orden de 10^{100} grados de libertad.

Si se renuncia a la resolución determinista de la ecuación (25) queda la posibilidad de utilizar una técnica estocástica en la que el esfuerzo computacional aumenta linealmente con la dimensión del espacio. Así, en 1992, H.C. Ottinger y M. Laso propusieron una nueva técnica estocástica, conocida como CONNFESSIT [5], para resolver las ecuaciones de Fokker-Planck (de las que el modelo (25) es un caso particular), haciendo uso de la equivalencia que estas ecuaciones tienen con las ecuaciones estocásticas de Ito. Así, si expresamos la ecuación de Fokker-Planck genérica como

$$\frac{d\Psi}{dt} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} (\mathbf{A} \Psi) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}} \left(\mathbf{D} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{Q}} \right) \quad (26)$$

donde en nuestro caso $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)^T$, la resolución de dicha ecuación es equivalente a la resolución de la ecuación estocástica de Ito:

$$d\mathbf{Q} = \mathbf{A} dt + \mathbf{B} d\mathbf{W} \quad (27)$$

donde \mathbf{A} representa la contribución convectiva, $\mathbf{D} = \mathbf{B}\mathbf{B}^T$ y $d\mathbf{W}$ es un proceso de Wiener. En el caso isótropo el tensor de difusividad \mathbf{D} se reduce a

un escalar D y en ese caso las componentes de $d\mathbf{W}$ son números aleatorios cuya distribución tiene media nula y varianza $2D dt$. La anterior ecuación debe resolverse para un gran número de trayectorias del proceso estocástico, permitiendo una adecuada (suficientemente precisa) operación de promediación.

Esta técnica ha permitido resolver el modelo (25) con un moderado número de resortes, sin embargo sólo los momentos de dicha distribución pueden calcularse con suficiente precisión a partir de un número razonablemente reducido de trayectorias del proceso estocástico. Desde el punto de vista práctico, ello puede ser suficiente, puesto que la tensión macroscópica resulta

$$\tau_p(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{Q}} \mathbf{g}(\mathbf{Q}) \Psi(\mathbf{x}, t, \mathbf{Q}) d\mathbf{Q} \quad (28)$$

donde la expresión de $\mathbf{g}(\mathbf{Q})$ depende del modelo molecular considerado. Pese a que la determinación de la función de distribución Ψ requeriría un número excesivo (desde el punto de vista del tiempo de cálculo) de trayectorias del proceso estocástico, el cálculo del promedio (28) puede calcularse con suficiente precisión con un número razonablemente reducido de trayectorias.

Otra limitación es que los resultados así obtenidos contienen lo que se conoce como ruido estadístico, que si bien en general no compromete su aplicación en la simulación directa, torna delicado su uso en la identificación de parámetros a partir de una técnica inversa.

Una resolución determinista de la ecuación (25), precisa, rápida y robusta, ha sido durante muchos años el sueño inalcanzado de científicos e ingenieros. Aun así, y antes de abordar los primeros pasos en la consecución de este sueño, diremos algunas palabras más a propósito del dominio de aplicación de este tipo de modelos.

El formalismo de Fokker-Planck describe numerosos sistemas que podríamos considerar micro o nanoestructurados. En esta sección lo hemos ilustrado en el caso de los modelos moleculares de los polímeros en solución, pero este puede ser y ha sido aplicado en otros muchos campos: (i) polímeros fundidos basados en la teoría de la reptación molecular⁴ [6] o también alternativamente en la teoría estructural (en [7] se puede encontrar un ejemplo reciente de este último enfoque); (ii) cristales líquidos poliméricos [8]; (iii) suspensiones de partículas, fibras cortas, microfibras y nanotubos de carbono [8]; (iv) dinámica del ADN [9]; (iv) teoría microestructural de mezclas [10] ...

⁴ La noción de reptación fue introducida por el premio Nobel de física P.G. de Gennes

2.2 Estrategias basadas en la separación de variables

Hemos visto en las páginas que preceden que la resolución mediante el empleo de las técnicas de discretización convencionales de los modelos definidos en dominios multidimensionales resulta inviable, puesto que el número de grados de libertad en tales técnicas crece exponencialmente con la dimensión del espacio. Hemos igualmente puesto de manifiesto que el empleo de métodos estocásticos puede aliviar en parte esta dificultad, si bien su utilización no está exenta de otras dificultades: imposibilidad práctica de calcular la función incógnita, siendo sólo posible calcular sus momentos, que además no están exentos de ruido estadístico. Además, la resolución estocástica requiere que el problema de partida definido por una ecuación en derivadas parciales tenga una formulación estocástica equivalente, situación que sólo se da para ciertos modelos definidos mediante el formalismo de Fokker-Planck. Por otra parte, la resolución del estado estacionario requiere reconstruir toda la evolución temporal, puesto que mediante este tipo de técnicas no se puede acceder directamente al estado estacionario.

Por todo ello, la búsqueda de estrategias alternativas, capaces de operar directamente sobre la formulación continua y determinista del sistema, ha motivado en los últimos años el desarrollo de las técnicas “*sparse grid*” (vease [3] para una excelente descripción) que conjugan la construcción de la habitual rejilla con el uso de aproximaciones establecidas a partir del producto tensorial de aproximaciones unidimensionales definiendo un análisis multiresolución (bases ondícula). Si bien el uso de este tipo de técnicas ha permitido la expansión del dominio de lo simulable, su uso está todavía hoy limitado a sistemas moderadamente multidimensionales $D \sim 20$.

Una alternativa que hemos propuesto recientemente para lograr la resolución de EDP altamente multidimensionales consiste en retomar la metodología habitualmente utilizada para resolver analíticamente este tipo de ecuaciones [11]. Se trata de la separación de variables. Para ilustrar la metodología, y sin ninguna pérdida de generalidad, consideraremos el problema elíptico estacionario:

$$\nabla^2 T = f \quad (29)$$

donde $f = f(x_1, x_2, \dots, x_D)$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_D) \in \Omega =]0, L[^D$ y asumiremos que la solución del problema se anula en el contorno del dominio: $T(\mathbf{x} \in \partial\Omega) = 0$.

Todos los modelos considerados en la sección precedente pueden definirse en un dominio hipercúbico con condiciones de contorno homogéneas. Por

definición o por construcción⁵ se puede proceder a la separación de la función $f(\mathbf{x})$:

$$f(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{i=m} a_i F_1^i(x_1) \times \cdots \times F_D^i(x_D) = \sum_{i=1}^{i=m} a_i \prod_{k=1}^{k=D} F_k^i(x_k) \quad (30)$$

Independientemente del tipo de ecuación (elíptica, parabólica o hiperbólica) es razonable expresar la solución mediante una separación de variables, esto es

$$T(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{i=\infty} \alpha_i T_1^i(x_1) \times \cdots \times T_D^i(x_D) = \sum_{i=1}^{i=\infty} \alpha_i \prod_{k=1}^{k=D} T_k^i(x_k) \quad (31)$$

Es inmediato comprobar que las aproximaciones polinomiales pueden expresarse mediante la ecuación (31). Puesto que sabemos que la serie infinita en (31) suele converger rápidamente, vemos que el tamaño del problema discreto aumenta linealmente con la dimensión del espacio. Cada una de las funciones unidimensionales es interpolada mediante elementos finitos 1D, a partir de N nodos. Otras aproximaciones alternativas están siendo analizadas (polinomios ortogonales, bases ondícula ...)

La construcción de la expresión (31) se lleva a cabo iterativamente. Cada iteración conlleva dos etapas (vease [11] para mayores detalles):

1. **Proyección.** Calculadas las n primeras funciones

$$T(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{i=n} \alpha_i T_1^i(x_1) \times \cdots \times T_D^i(x_D) = \sum_{i=1}^{i=n} \alpha_i \prod_{k=1}^{k=D} T_k^i(x_k) \quad (32)$$

los coeficientes α_i , $\forall i \in [1, \dots, n]$ se calculan introduciendo la aproximación (32) en la formulación variacional Galerkin asociada a (29). El problema discreto resultante es de dimensión $n \times n$, con $n \sim 10$.

2. **Enriquecimiento.** Calculados los n coeficientes alfa, procedemos a calcular las funciones $T_k^{n+1}(x_k)$, $\forall k \in [1, \dots, D]$. Para ello introducimos

$$T(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{i=n} \alpha_i \prod_{k=1}^{k=D} T_k^i(x_k) + \prod_{k=1}^{k=D} R_k(x_k) \quad (33)$$

⁵ Por ejemplo mediante la aplicación de una técnica de mínimos cuadrados de direcciones alternadas.

en la formulación variacional asociada a (29). Tras resolver el problema no lineal resultante de tamaño $D \times N$ obtendremos las funciones $R_k(x_k)$ y a partir de ellas $T_k^{n+1}(x_k) = R_k(x_k) / \|R_k(x_k)\|$, $\forall k \in [1, \dots, D]$.

Esta técnica permite, aun en el caso $D = 100$ y procediendo con un elevado número de nodos por dirección, $N \sim 1000$, calcular la solución en un par de minutos. Notese, que de haber procedido a la construcción de una rejilla se hubieran precisado del orden de 10^{300} nodos. En [12] se aborda la resolución del problema transitorio y en [13] se abordan los modelos no lineales. El esquema es de cuarto orden en espacio y segundo orden en tiempo (utilizando la norma de Lebesgue), ambos valores superiores a los ordenes esperados.

3. Bibliografía

- [1] Ryckelynck, D.; Chinesta, F.; Cueto, E.; Ammar, A. (2006): "On the a priori model reduction: overview and recent developments. Archives of Computational Methods in Engineering, State of the Art Reviews, 13/1, 91-128.
- [2] Ammar, A.; Ryckelynck, D.; Chinesta, F.; Keunings, R. (2006): "On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 134, 136-147.
- [3] Bungartz, H.J.; Griebel, M. (2004): "Sparse grids". Acta Numerica, 13, 1-123.
- [4] Weiner, J.H. (2002): "Statistical mechanics of elasticity". Ed. Dover.
- [5] Ottinger, H.C.; Laso, M. (1992): "Smart polymers in finite element calculations". International Congress on Rheology, Brussels.
- [6] Fang, J.; Kroger, M.; Ottinger, H.C. (2000): "A thermodynamically admissible reptation model for fast flows of entangled polymers. II. Model predictions for shear and extensional flows". J. Rheol., 40, 1293-1318.
- [7] Rincon, E.; Chavez, A.E.; Herrera, R.; Manero, O. (2005): "Rheological modeling of complex fluids: a transient network model with microstates". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 131, 64-77.
- [8] Kroger, M. (2005): "Models of polymeric and anisotropic liquids". Ed. Springer.
- [9] Shaqfeh, E.S.G. (2005): "The dynamics of single-molecule DNA in flow". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 130, 1-28.
- [10] Doi, M.; Ohta, T. (1991): "Dynamics and rheology of complex interfaces". Journal of Chemical Physics, 95/2, 1242-1248.
- [11] Ammar, A.; Mokdad, B.; Chinesta, F.; Keunings, R. (2006): "A New Family of Solvers for Some Classes of Multidimensional Partial Differential Equations Encountered in Kinetic Theory Modeling of Complex Fluids". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 139, 153-176.
- [12] Ammar, A.; Mokdad, B.; Chinesta, F.; Keunings, R. (2007): "A New Family of Solvers for Some Classes of Multidimensional Partial Differential Equations Encountered in Kinetic Theory Modeling of Complex Fluids. Part II: Transient Simulation Using Space-Time Separated Representation". Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, En prensa.
- [13] Mokdad, B.; Pruliere, E., Ammar, A.; Chinesta, F. (2007): "On the Simulation of Kinetic Theory Models of Complex Fluids Using the Fokker-Planck Approach". Applied Rheology, En prensa.