

UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI, CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ

Gabriela Florentina NUȚ

**Metoda multigrid pentru ecuații
diferențiale**

REZUMATUL TEZEI DE DOCTORAT

Coordonator științific
Prof. Univ. Dr. Petru BLAGA

2014

Cuprins

Introducere	1
1 Metoda multigrid- preliminarii	5
1.1 Ecuații diferențiale cu derivate parțiale - clasificare și forma canonică	5
1.2 Metode de discretizare a unei ecuații diferențiale	5
1.3 Metode numerice iterative pentru rezolvarea sistemelor de ecuații . . .	5
1.4 Metoda multigrid	5
2 Studiul convergenței metodei multigrid	6
2.1 Transformata Fourier a unei funcții	6
2.2 Studiul convergenței metodelor iterative clasice folosind analiza Fourier	6
2.2.1 Factorul de amplificare și factorul de netezire al unei metode numerice	7
2.2.2 Spectrul frecvențelor	9
2.2.3 Rezultatele analizei Fourier pentru metodele numerice iterative studiate	9
2.3 Studiul convergenței metodei multigrid folosind analiza Fourier	10
2.3.1 Modelul matematic	10
2.3.2 Componentele metodei multigrid	11
2.3.3 Rezultatele obținute cu analiza Fourier locală pentru problema studiată	13
3 Metoda multigrid pentru probleme de convecție-difuzie nestaționare	15
3.1 Modelul matematic	15
3.2 Analiza Fourier locală a metodei multigrid pentru problema de convecție- difuzie nestaționară	17
3.2.1 Componentele metodei multigrid	17
3.2.2 Factorul de netezire al metodei multigrid pentru problema de convecție-difuzie	19
3.2.3 Factorul de convergență asimptotică și factorul de reducere a erorii pentru metoda multigrid pentru problema de convecție- difuzie bidimensională	20
3.3 Difuzia pe direcția fluxului	21

3.4	Metoda multigrad pentru problema de convecție-difuzie nestaționară în cazul tridimensional	22
3.4.1	Rezultate numerice obținute cu metoda multigrad pentru cazul tridimensional	23
3.5	Metoda multigrad pentru ecuația difuziei într-un mediu cu mai multe straturi	24
3.5.1	Modelul matematic	24
3.5.2	Rezultate numerice, interpretarea rezultatelor	24
4	Metoda prelungirilor în stea	26
4.1	Problema model	26
4.2	Determinarea valorilor la frontierele subdomeniilor	26
4.2.1	Prelungirea în stea	26
4.2.2	Discretizare prin metoda diferențelor finite	27
4.2.3	Discretizare cu metoda elementului finit	28
4.3	Metoda prelungirilor în stea pentru condiții de tip Robin la frontiere	30
4.4	Aplicarea metodei prelungirilor în stea	32
4.4.1	Compararea rezultatelor numerice obținute cu metoda multigrad cu cele obținute cu metoda prelungirilor în stea	32
4.5	Aplicații ale metodei prelungirilor în stea în probleme practice	33
4.5.1	Metoda prelungirilor în stea pentru o problemă staționară de convecție-difuzie	33
4.5.2	Modelul transportului unui fluid printr-un domeniu cu frontiere neregulate	34
	Bibliografie	36

Introducere

Evoluția metodei multigrid

Ecuațiile diferențiale cu derivate parțiale sunt adeseori folosite pentru a modela fenomene și procese reale din diferite domenii (mecanica fluidelor, termodinamică, economie, meteorologie, procesarea imaginilor,...). Rezolvarea unor astfel de ecuații este deci foarte importantă atât din punct de vedere teoretic, cât și practic. Deoarece soluția analitică nu este întotdeauna accesibilă, este importantă construirea unor metode numerice pentru a aproxima soluția unor astfel de ecuații.

Simulările recente ale acestor probleme se bazează pe modele fizice din ce în ce mai complicate. Discretizarea numerică a ecuațiilor diferențiale conduce la sisteme mari, care, pe măsură ce pasul grilei pe care se lucrează scade, devin rău condiționate (perturbații nesemnificative ale termenului liber determină variații mari ale soluției). Necesitatea unei metode numerice de rezolvare a acestora este deci evidentă. De asemenea au crescut nevoile legate de capacitatea de stocare și timpul de procesare a calculatoarelor, problemele fiind rezolvate pe grile din ce în ce mai fine. Așadar provocarea nu este doar matematică, ci și una de programare pe calculator.

Totodată se ajunge prin discretizare la sisteme de ecuații cu un număr foarte mare de necunoscute (de exemplu pentru o grilă de ordinul șapte sunt 2^8 ecuații pe fiecare dimensiune, deci 2^{16} în cazul bidimensional, respectiv 2^{24} în cel tridimensional) care trebuie rezolvate cât mai precis și într-un timp cât mai mic. Rezolvarea directă a acestor sisteme folosind de exemplu metoda eliminării a lui Gauss devine astfel nepractică necesitând un volum mare de calcule și ocupând în memoria calculatorului prea mult spațiu. De aceea pentru rezolvare se folosesc metode numerice iterative. Dar se știe că acestea au o convergență foarte slabă. Au proprietatea de a reduce foarte bine componentele oscilante ale erorii, dar cele netede rămân aproape neschimbate, fiind astfel reduse foarte încet. Metodele numerice iterative generează erori din ce în ce mai netede, dar care sunt reduse spre zero foarte încet, devenind astfel ineficiente.

Una din cele mai rapide metode de rezolvare a unui astfel de sistem este metoda multigrid. Aceasta s-a dovedit a fi o soluție foarte bună pentru a mări viteza de convergență prin introducerea unei noi componente: corecția pe grila rară. Aceasta reduce doar componentele netede ale erorii, devenind o completare a metodelor numerice iterative. Esența acestei metode este faptul că trecând la o grilă mai rară în primul rând doar componentele netede vor putea fi bine approximate pe aceasta, iar apoi, pe grila rară, componentele netede devin oscilante, deci vor putea fi reduse eficient de o metodă numerică iterativă. În plus numărul de necunoscute din sistemul care trebuie rezolvat devine mai mic, deci timpul de rezolvare scade, aceasta

fiind una dintre proprietățile de bază ale metodei multigrad: este rapid convergentă. Metoda multigrad poate fi aplicată pentru rezolvarea multor tipuri de ecuații diferențiale, cu un cost de forma $O(n)$ -operații aritmetice pentru n necunoscute, fiind astfel printre cele mai eficiente metode numerice de rezolvare a sistemelor de ecuații. În plus convergența metodei nu depinde de pasul grilei de discretizare.

Ideea metodei multigrad a fost introdusă de către R. P. Fedorenko, în anii 1960. Acesta a prezentat un algoritm multigrad pentru discretizarea standard cu 5 puncte a ecuației lui Poisson pe un domeniu de forma $[0,1] \times [0,1]$. De atunci un număr mare de autori (B.E. Bank, T.F. Dupont, A. Brandt [10], W. Hackush [34, 35], P. Wesseling [89], S.Mc. Cormick [46] ș.a.m.d.) au arătat că este într-adevăr o tehnică utilă, practic și teoretic.

Din anul 1977, odată cu lucrarea lui A. Brandt [10], care conține toate procesele de bază folosite în metodă, s-a început și implementarea pe calculator a metodei multigrad. Acesta a obținut primele rezultate practice și a pus în evidență eficiența metodei. A. Brandt și W. Hackbush au introdus metoda multigrad pentru probleme neliniare și au demonstrat convergența metodei pentru anumite probleme eliptice. Din anii 1980 interesul pentru metoda multigrad a devenit tot mai mare, deși inițial domina scepticismul față de metodă, teoria fiind încă slab dezvoltată. Un alt pas important a fost combinarea metodei multigrad cu tehnicile de iterații imbricate. Inițial a fost folosită doar pentru probleme eliptice, implementarea acesteia cerând un efort substanțial. Dezvoltările ulterioare au permis însă extinderea aplicabilității la o clasă mult mai largă de probleme. S-au dezvoltat numeroase variante a acesteia, de la forme geometrice ([86], [13]), care folosesc grile structurate, la cele pur algebrice ([81], [75]) în care accentul cade pe aspectele pur algebrice ale ecuației de rezolvat, fără a fi necesare informații despre grilele pe care problema este discretizată.

Interesul tot mai mare pentru această metodă a determinat și organizarea a cel puțin două conferințe de multigrad: "European Multigrad Conference", respectiv "Copper Mountain Conference on Multigrad Methods".

Motivația și scopul lucrării

În această lucrare s-a urmărit obținerea unor soluții eficiente pentru sistemele de ecuații generate de discretizarea unor ecuații cu derivate parțiale care modelează fenomene fizice precum cele enumerate mai sus. Accentul s-a pus pe construirea unor metode multigrad eficiente prin alegerea unor componente ale acestora potrivit concluziilor obținute folosind metoda Fourier locală. Un alt aspect urmărit a fost realizarea unei analize a metodelor construite din punct de vedere al erorii și convergenței. Problemele analizate au fost alese din diferite clase de ecuații diferențiale, atât staționare, cât și nestaționare.

Pentru rezolvarea ecuațiilor diferențiale cu derivate parțiale, metodele de discretizare folosite au fost cea a diferențelor finite cu ordinul de exactitate doi, respectiv patru și metoda elementului finit, pe un sistem de grile rectangulare. Pentru discretizarea proceselor nestaționare s-a folosit schema lui Euler de tip "backward" în raport cu timpul.

Orice metodă multigrad depinde puternic de problema efectivă care se rezolvă, neexistând un algoritm multigrad fixat. De aceea în lucrare este folosită anali-

za Fourier locală pentru adaptarea metodei la problema care trebuie rezolvată prin alegerea unor componente ale metodei multigrad care să o facă eficientă. Convergența metodei multigrad pentru probleme de convecție-difuzie a fost studiată în cazul staționar de foarte mulți cercetători (de exemplu [29, 53, 62, 72, 73, 86, 89, 90]). Noutatea în această lucrare este faptul că *analiza Fourier este extinsă pentru probleme de convecție-difuzie care depind de timp, atât pentru cazul unidimensional* (lucrarea [58]), *cât și pentru cel bidimensional* (lucrarea [59]). S-a studiat cu ajutorul acesteia influența diferitelor metode de discretizare, respectiv a diferitor metode numerice iterative asupra rezultatelor obținute cu metoda multigrad în ceea ce privește rata de convergență și reducerea erorii.

În etapele realizării analizei Fourier s-a ajuns la nevoia de a introduce o *nouă definiție a factorului de netezire a erorii* (lucrarea [61]), față de cea folosită de exemplu de către U. Trottenberg în [86], R. Wienands și W. Joppich în [90] sau P. Wesseling în [89], cu care să se facă împărțirea spectrului frecvențelor din componentele erorii.

În timp ce metoda converge rapid pentru problemele model, ca de exemplu problema lui Poisson pe un pătrat, rata de convergență poate fi sever modificată de prezența coeficienților cu variații mari sau de domeniile complicate pe care se lucrează. De asemenea ecuațiile de tipul convecție-difuzie au o convergență slabă. Iar în practică tocmai astfel de probleme intervin. Acesta a fost motivul pentru care pentru rezolvarea problemelor de convecție-difuzie s-a introdus o *nouă metodă care folosește un sistem de mai multe grile*, numită "*metoda prelungirilor în stea*" (lucrările [56], [57]). Rezultatele obținute cu aceasta sunt comparate cu cele obținute prin metoda multigrad pentru mai multe probleme. S-a pus accentul pe aplicarea metodei prelungirilor în stea în cazul unor probleme de convecție-difuzie în care convecția este dominantă, caz în care se știe (de exemplu [63], [86]) că metoda multigrad conduce la rezultate nesatisfăcătoare. Rezultatele practice au arătat că metoda poate fi aplicată cu succes pentru rezolvarea unor astfel de probleme.

Structura lucrării

În **Capitolul 1** se face mai întâi o prezentare generală a diferitelor clase de ecuații diferențiale cu derivate parțiale și a condițiilor la frontieră de care fiecare dintre acestea are nevoie pentru ca soluția să fie unică și stabilă. Motivația acestei prezentări este legată de faptul că pe parcursul lucrării metoda multigrad va fi aplicată și studiată pentru diferite probleme practice care se încadrează în toate aceste clase: eliptice, parabolice și hiperbolice. Pentru rezolvarea numerică a ecuațiilor diferențiale acestea sunt discretizate folosind metoda diferențelor finite de ordinul doi sau patru, respectiv metoda elementului finit. Sunt prezentate și metodele numerice iterative care vor fi folosite.

Tot în acest capitol sunt prezentate bazele metodei multigrad pornind de la analiza Fourier locală a metodelor numerice iterative. Informațiile obținute cu ajutorul analizei Fourier: rata de convergență, cea de netezire și cea de reducere a erorii, permit construirea eficientă a metodei multigrad.

Capitolul 2 este centrat pe analiza Fourier a metodei multigrad. Sunt prezentate la început câteva noțiuni teoretice despre transformata Fourier a unei funcții, apoi este descrisă metoda analizei Fourier pentru metodele numerice iterative clasice. Pentru analiza Fourier a convergenței și erorii metodei multigrad problema model

folosită este una de convecție-difuzie dependentă de timp (nestaționară), pentru care rezultatele teoretice obținute sunt apoi confirmate de cele obținute practic, concluziile analizei permițând implementarea eficientă a metodei multigrid.

În **Capitolul 3** este prezentată și studiată metoda multigrid pentru o problemă de convecție-difuzie în cazul nestaționar. Analiza Fourier locală a unor procese nestaționare din **Capitolul 2** este extinsă pentru cazul bidimensional. Este de asemenea prezentată metoda difuziei pe direcția fluxului, care este utilă pentru reducerea oscilațiilor soluției problemelor în care convecția este dominantă.

Tot în acest capitol ecuația de convecție-difuzie este studiată în cazul particular când convecția lipsește. Problema de difuzie obținută în acest caz este rezolvată cu metoda multigrid când procesul fizic este nestaționar și are loc într-un mediu format din mai multe straturi cu proprietăți fizice diferite, substanța activă fiind transportată de nanoparticule. Este de asemenea prezentat un exemplu de aplicare a metodei multigrid în cazul tridimensional.

În **Capitolul 4** este introdusă o nouă metodă de rezolvare a sistemelor generate prin procesul de discretizare, care folosește de asemenea mai multe grile, numită "prelungire în stea".

La final sunt prezentate ideile principale ale lucrării, ideile originale, respectiv ce aduce nou această lucrare, precum și câteva posibile direcții viitoare de cercetare.

Contribuțiile originale sunt cuprinse în *Teoremele* 2.2.1, 2.2.2, 2.2.3, 2.2.4, 2.3.1, 2.3.2, 3.2.1, 3.2.2, *Proprietățile* 2.3.1, 2.3.2, 2.3.3, 2.3.4, 2.3.5, 2.3.6, 2.3.7, 2.3.8, 3.1.1, 3.1.2, 3.2.1, 3.2.2, 3.2.4, 3.5.1, 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3, 4.2.4, 4.3.1, 4.3.2, 4.3.3, *Corolarul* 2.2.1, *Observațiile* 2.2.1, 2.2.2, 2.2.3, 2.2.4, 2.3.2, 2.3.3, 3.1.1, 3.2.1, 3.2.2, 3.3.1, 3.5.1, *Exemplele și problemele* 3.4.1, 3.4.2, 4.4.1-4.4.5.

Cuvintele cheie:

Metoda multigrid, metoda diferențelor finite, metoda elementului finit, ecuații diferențiale cu derivate parțiale, ecuația de convecție-difuzie, factor de reducere a erorii, factor de netezire, factor de amplificare, factor de convergență asimptotică, prelungire în stea

Doresc să le mulțumesc din suflet tuturor celor care au fost alături de mine în acest demers științific și m-au susținut în realizarea lui. Fără ajutorul lor nu aș fi putut merge mai departe.

În primul rând îi mulțumesc respectuos domnului Prof. Univ. Dr. Petru Blaga, căruia doresc să îi exprim profunda mea recunoștință pentru încrederea pe care mi-a acordat-o acceptând să lucrez cu sprijinul său și pentru coordonarea științifică acordată în toată această perioadă. A fost o deosebită onoare să îl am ca îndrumător științific în elaborarea lucrării.

De asemenea îi mulțumesc din tot sufletul doamnei Conf. Univ. Dr. Ioana Chiorean pentru dăruirea cu care a fost alături de mine în fiecare moment și etapă pe care am parcurs-o de-a lungul timpului. Nu voi uita niciodată răbdarea și sprijinul pe care le-am primit ori de câte ori am avut nevoie.

Mulțumesc și familiei mele care a avut răbdare cu mine mereu și necondiționat.

Metoda multigrid- preliminarii

Scopul acestei lucrări fiind rezolvarea numerică a ecuațiilor diferențiale folosind metoda multigrid, în Secțiunea 1.1 este inclusă o prezentare generală a ecuațiilor diferențiale ([84]) și o clasificare a acestora. Secțiunea 1.3 descrie câteva metode clasice de rezolvare a sistemelor de ecuații ([22]) care rezultă în urma proceselor de discretizare ([22], [85]) prezentate în Secțiunea 1.2.

1.1 Ecuații diferențiale cu derivate parțiale - clasificare și forma canonică

În această secțiune sunt prezentate cele trei clase de ecuații diferențiale cu derivate parțiale care intervin în lucrare și condițiile la frontiere necesare pentru ca o ecuație să aibă soluția unică și stabilă.

1.2 Metode de discretizare a unei ecuații diferențiale

Sunt prezentate cele două metode de discretizare care vor fi folosite în această lucrare, metoda diferențelor finite de ordinul doi, respectiv patru și metoda elementului finit, precum și sistemele de ecuații obținute cu acestea pentru o problemă de convecție-difuzie în cazul bidimensional.

1.3 Metode numerice iterative pentru rezolvarea sistemelor de ecuații

Pentru rezolvarea numerică a unui sistem de ecuații se pot folosi metode numerice iterative. Cel mai des folosite sunt metoda lui Jacobi și metoda eliminării a lui Gauss- Seidel.

1.4 Metoda multigrid

În această secțiune este introdusă metoda multigrid pentru rezolvarea sistemelor de ecuații generate prin metodele de discretizare prezentate anterior, urmând ideile principale din [34].

Studiul convergenței metodei multigrid

În acest capitol este prezentat un studiu al proprietăților de netezire, convergență și reducere a erorii ale metodei multigrid pentru o ecuație de convecție-difuzie care depinde de timp (lucrarea [58]). Această ecuație reprezintă modelul matematic pentru multe fenomene fizice, așadar o soluție numerică eficientă este foarte importantă.

Noutatea în acest capitol este faptul că se studiază aceste proprietăți de netezire, convergență și reducere a erorii pentru o problemă de convecție-difuzie care depinde și de timp, pe un domeniu format din trei straturi care au proprietăți fizice diferite (lucrarea [58]), respectiv restrângerea spectrului frecvențelor și în consecință rescrierea definiției factorului de netezire al metodei multigrid, rezultate în urma scrierii dezvoltării în serie Fourier a erorii în forma cu toți termenii în mulțimea \mathbb{R} (lucrarea [61]). Analiza este făcută folosind metoda Fourier locală, care este un mijloc bun pentru a construi metode multigrid eficiente pentru o problemă practică dată. Pentru început sunt prezentate în Secțiunea 2.1 câteva aspecte teoretice legate de transformata Fourier ([49]), iar în Secțiunea 2.2 este aplicată metoda analizei Fourier locale ([86, 90]) pentru metodele numerice iterative clasice.

2.1 Transformata Fourier a unei funcții

Pentru a aplica metoda Fourier locală, sunt prezentate pe scurt în această secțiune bazele analizei Fourier, respectiv transformata Fourier și transformata Fourier discretă și câteva dintre proprietățile acestora.

2.2 Studiul convergenței metodelor iterative clasice folosind analiza Fourier

Pentru studiul convergenței metodelor iterative clasice una dintre cele mai eficiente și mai des folosite metode este analiza Fourier locală (LFA). Cu ajutorul acestei metode se pot determina factorul de amplificare, factorul de netezire, cel

de reducere a erorii și cel de convergență pentru o metodă numerică. Importanța determinării factorului de netezire provine din faptul că analiza acestuia permite alcătuirea unor componente ale metodei multigrad care să o facă eficientă, știut fiind faptul că aceasta trebuie adaptată la fiecare tip de problemă care trebuie rezolvată. Analiza Fourier locală fost introdusă de A. Brandt în [8], [9], [10] ulterior devenind o metodă foarte des folosită [29], [86], [89] pentru o mare varietate de probleme.

În această secțiune se face o revizuire a definiției factorului de netezire necesar atât pentru alcătuirea cât și pentru analiza metodei multigrad (lucrarea [61]). Această schimbare a definiției conduce la o nouă împărțire a spectrului frecvențelor joase și înalte pentru cazul 1-dimensional (lucrarea [61]).

Problema model folosită aici este reprezentarea matematică a procesului de convecție-difuzie staționară a unei substanțe într-un fluid

$$\begin{cases} -\varepsilon u''(x) + au'(x) = f(x), & x \in \Omega = (0, 1), \\ u(x) = 0, & x \in \{0, 1\}, \end{cases} \quad (2.1)$$

unde u este concentrația substanței, f este un termen provenit din perturbări posibile ale concentrației, datorate de exemplu unor reacții chimice, ε este coeficientul de difuzie și a coeficientul de convecție.

2.2.1 Factorul de amplificare și factorul de netezire al unei metode numerice

Definiția 2.2.1. [89] **Factorul de amplificare** al unei metode numerice iterative, $g(t_k)$, este raportul dintre coeficientul $c_k^{(m)}$ după m iterații și cel de la pasul anterior, $c_k^{(m-1)}$ și măsoară creșterea sau scăderea unui termen din seria Fourier într-o iterație.

Proprietatea 2.2.1. [89] Viteza de convergență a unei metode numerice iterative este cu atât mai mare cu cât modulul factorului de amplificare este mai mic decât 1.

Teorema 2.2.1. [61] Factorul de amplificare al metodei Gauss-Seidel pentru problema (2.1) este

$$g(t_k) = \frac{(2\varepsilon - ah_l)e^{it_k}}{4\varepsilon - (2\varepsilon + ah_l)e^{-it_k}}, k = 0, \dots, n_l, \quad (2.2)$$

și are modulul

$$|g(t_k)| = \frac{|2\varepsilon - ah_l|}{\sqrt{(2\varepsilon + ah_l)^2 + (4\varepsilon)^2 - 8\varepsilon(2\varepsilon + ah_l)\cos(t_k)}}, k = 0, \dots, n_l. \quad (2.3)$$

Teorema 2.2.2. [61] Factorul de amplificare al metodei Jacobi ponderate pentru problema (2.1) este

$$g(t_k) = \frac{4\varepsilon(1 - \omega) + \omega(2\varepsilon + ah_l)e^{-it_k} + \omega(2\varepsilon - ah_l)e^{it_k}}{4\varepsilon}, k = 0, \dots, n_l \quad (2.4)$$

cu modulul

$$|g(t_k)| = \sqrt{(1 - \omega + \omega \cos t_k)^2 + \left(\frac{ah\omega}{2\varepsilon} \sin t_k\right)^2}. \quad (2.5)$$

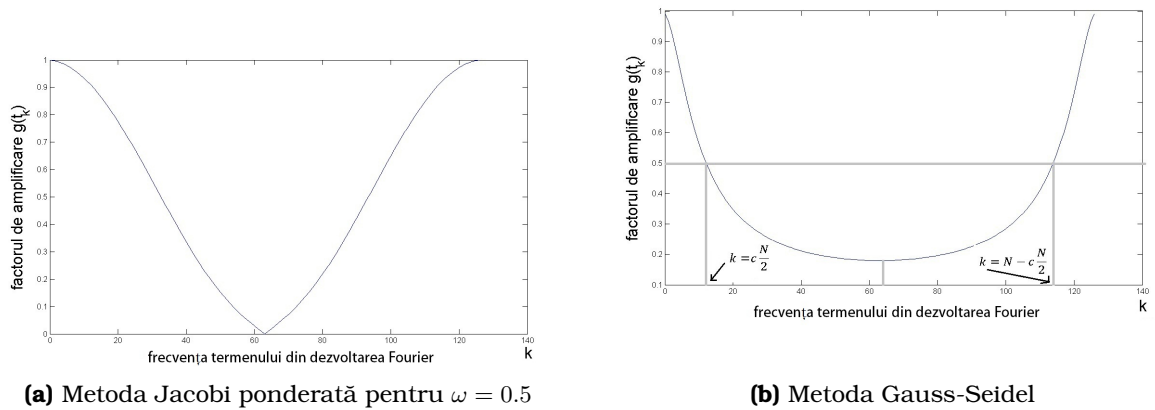


Figura 2.1: Modulul factorului de amplificare pentru $l = 6, \varepsilon = 0.1$ și $a = 10$ în cazul unidimensional

Observația 2.2.1. Se observă din Figura 2.1a și Figura 2.1b că pentru frecvențele cu $k \in \left[c\frac{N}{2}, N - c\frac{N}{2} \right], c \in (0, 1)$ factorul de amplificare are modulul $|g(t_k)| \leq \frac{1}{2}$. Acest lucru înseamnă că pentru componentele erorii care au aceste frecvențe, metoda numerică iterativă este eficientă, în cel mai rău caz aceste frecvențe sunt reduse cu un factor de $\frac{1}{2}$ pe iterație. În același timp, pentru componentele care au frecvența cuprinsă în $\left(0, c\frac{N}{2} \right) \cup \left(N - c\frac{N}{2}, N \right)$, factorul de amplificare fiind aproape 1, metoda numerică este ineficientă, aceste componente rămânând aproape neschimbate pe iterație.

Definiția 2.2.2. [86], [89] Pentru o metodă numerică iterativă având matricea iterației M , cel mai rău factor de amplificare luat pentru toate frecvențele înalte, $k \in T_h$, se numește **factor de netezire** și se notează cu $\rho(M) = \max\{|g(t_k)|, k \in T_h\}$, T_h fiind spectrul frecvențelor înalte.

nivelul	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$	$l = 6$
$\rho(M_J)$	1	1	1	1	1	1
$\rho(M_{\omega J})$	0	0.5	0.8536	0.9619	0.9904	0.9976
$\rho(M_{GS})$	0.3333	0.4472	0.6786	0.8756	0.9637	0.9905

Tabelul 2.1: Factorul de netezire al metodei Jacobi (J), Jacobi ponderată (ωJ) și Gauss-Seidel (GS) pentru problema (2.1), $a = 0, \varepsilon = 1$

Datele din Tabelul 2.1 arată că viteza de convergență a metodei numerice iterative scade pe măsură ce pasul grilei scade spre zero, datorită reducerii ineficiente a componentelor cu frecvențe joase. Astfel, metoda numerică iterativă este încet convergentă.

2.2.2 Spectrul frecvențelor

Una dintre cele mai eficiente metode pentru a depăși aceste dezavantaje ale unei metode numerice clasice este metoda multigrad. Această metodă combină proprietățile metodelor numerice clasice de a reduce frecvențele înalte cu metoda corecției pe grila rară care are proprietăți complementare, aceasta reducând frecvențele joase.

Teorema 2.2.3. [61] *Factorul de netezire al unei metode numerice iterative cu matricea iterației M este*

$$\rho(M) = \max_k \left\{ |g(t_k)|, k \in T_h \right\}, \quad (2.6)$$

unde

$$T_h = \left\{ k \mid k = c \frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1 \right\} \quad (2.7)$$

reprezintă spectrul frecvențelor înalte din dezvoltarea în serie Fourier a erorii într-un punct, iar

$$g(t_k) = \frac{c_k^{(m)}}{c_k^{(m-1)}}, k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$$

este raportul coeficienților componente de ordinul k din această dezvoltare, $c \in (0, 1)$ fiind o constantă fixată.

Corolarul 2.2.1. [61] *Dezvoltarea în serie Fourier într-un punct $x_s, s = 0, \dots, N-1$ a unei funcții cu N valori reale e_0, e_1, \dots, e_{N-1} , este de forma*

$$E_s = B_0 + \sum_{k=1}^{N/2-1} B_k \sin \left(\frac{2\pi ks}{N} - \varphi \right), \quad B_0, B_k \in \mathbb{R}, k = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (2.8)$$

Teorema 2.2.4. [61] *Factorul de netezire al metodei **Gauss-Seidel** pentru problema (2.1), este*

$$\rho(M_{GS}) = \frac{|2\varepsilon - ah_l|}{\sqrt{(2\varepsilon + ah_l)^2 + (4\varepsilon)^2 - 8\varepsilon(2\varepsilon + ah_l) \cos \pi c}},$$

iar pentru metoda **Jacobi ponderată**, dacă $\frac{ah_l}{2\varepsilon} < 1$

$$\rho(M_{\omega J}) = \max_{k \in T_h} |g(t_k)| = \sqrt{(1 - \omega + \omega \cos \pi c)^2 + \left(\frac{ah\omega}{2\varepsilon} \sin \pi c \right)^2}.$$

Aici c este o constantă reală din intervalul $(0, 1)$.

2.2.3 Rezultatele analizei Fourier pentru metodele numerice iterative studiate

Analiza datelor din aceste tabele, permite formularea următoarelor concluzii:

$a = 0, e = 1$		$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$	$l = 6$
$c=0.5$	GS	0.4472	0.4472	0.4472	0.4472
		0.8756	0.9637	0.9905	0.9976
	J	0.9239	0.9808	0.9952	0.9988
		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
	ωJ ($\omega = 0.5$)	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
		0.9619	0.9904	0.9976	0.9994

Tabelul 2.2: Factorul de netezire al metodei Gauss-Seidel (GS), respectiv Jacobi ponderată (ωJ) pentru problema (2.1) și $a = 0, \varepsilon = 1$ -**difuzie pură**

$a = 10, e = 0.1$		$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$	$l = 6$
$c=0.5$	GS	0.4635	0.1730	0.0817	0.2502
		0.8845	0.7851	0.7632	0.9911
	J	3.1250	1.5625	0.9981	0.9990
		3.1250	1.5625	1.0000	1.0000
	ωJ ($\omega = 0.5$)	1.6406	0.9276	0.6345	0.5368
		1.6406	1.0167	0.9983	0.9994

Tabelul 2.3: Factorul de netezire al metodei Gauss-Seidel (GS), respectiv Jacobi ponderată (ωJ) pentru problema (2.1) și $a = 10, \varepsilon = 0.1$ -**convecție dominantă**

Observația 2.2.2. Metoda Jacobi nu este eficientă în etapa de netezire a metodei multigrad datorită faptului că nu are proprietățile obișnuite ale unei metode numerice iterative de a reduce eficient frecvențele înalte din spectrul frecvențelor ($k \in (0, N/2 - 1)$), ci reduce partea de mijloc a acestuia.

Observația 2.2.3. Pentru metoda Gauss-Seidel sau Jacobi ponderată, proprietățile de reducere a frecvențelor înalte determinate cu Teorema 2.2.3 sunt chiar mai bune decât se calculase până acum folosind Definiția 2.2.2 pentru o iterată, iar aplicarea metodelor de mai multe ori le face încă și mai eficiente.

Observația 2.2.4. De asemenea pentru cazul convecției dominante (Tabelul 2.3) se observă că pe măsură ce numărul maxim de nivele folosite crește, factorul de amplificare devine mai mic, deci este necesară aplicarea metodei numerice iterative pe o grilă mai deasă (cu cel puțin 6 nivele pentru problema studiată aici) pentru a avea o reducere a componentelor erorii și pentru frecvențele joase, dar și această reducere este mică.

2.3 Studiul convergenței metodei multigrad folosind analiza Fourier

2.3.1 Modelul matematic

Pentru aplicarea analizei Fourier locale, ecuația folosită ca model este cea de convecție-difuzie nestaționară

$$\begin{cases} c \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = \mathbf{d} \Delta u(\mathbf{x}, t) + \alpha u(\mathbf{x}, t) + f(\mathbf{x}), & t \geq 0, \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}_0, t) = u_0, & t \geq 0. \end{cases} \quad (2.9)$$

Concentrația substanței aplicate la suprafață este cunoscută, și este suficient de mare pentru a fi constantă la orice moment de timp $u(0, t) = f_0, t \geq 0$, aceasta fiind condiția inițială a problemei. Pe frontierele dintre straturile de piele, legea conservării fluxului este

$$\left[-d \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right] = 0, x = x_{0i}, i = 1, 2, \dots, n_d, t \geq 0, \quad (2.10)$$

n_d este numărul de straturi unde difuzia are loc și $[[a(x, t)]] = a(x^+, t) - a(x^-, t)$.

Proprietatea 2.3.1. [58] Coeficienții din sistemul de ecuații care se obține cu metoda elementului finit de discretizare a ecuației (2.9) pe un domeniu $\Omega = [0, b]$ sunt

$$q_0 = -\frac{2\alpha h}{3} + \frac{2ch}{3h_t} + \frac{2d}{h}, q_1 = -\frac{\alpha h}{6} + \frac{ch}{6h_t} - \frac{v}{2} - \frac{d}{h}, q_2 = -\frac{\alpha h}{6} + \frac{ch}{6h_t} + \frac{v}{2} - \frac{d}{h},$$

$$f_i = f(x_i) + \frac{ch}{6h_t} (u_{i-1}^{ant} + 4u_i^{ant} + u_{i+1}^{ant}), i = 1, 2, \dots, N.$$

Proprietatea 2.3.2. [58] Pentru metoda diferențelor finite, folosind schema lui Euler explicită de tip "backward" pentru direcția timp, coeficienții din sistemul care discretizează ecuația (2.9) vor fi

$$q_0 = -\alpha + \frac{c}{ht} + \frac{2d}{h^2}, q_1 = -\frac{v}{2h} - \frac{d}{h^2}, q_2 = \frac{v}{2h} - \frac{d}{h^2}, f_i = f(x_i) + c \frac{u_i^{ant}}{h_t}.$$

2.3.2 Componentele metodei multigrad

În continuare sunt determinate matricele asociate operatorilor componentelor metodei multigrad, necesare pentru analiza Fourier locală a convergenței.

Proprietatea 2.3.3. [58] Matricea asociată operatorului L_h al sistemului de ecuații obținut printr-o metodă de discretizare este

$$\widehat{L}_h = \begin{pmatrix} \widetilde{L}_h(\theta) & 0 \\ 0 & \widetilde{L}_h(\bar{\theta}) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

unde $\widetilde{L}(\theta) = q_0 + q_1 e^{-i\theta} + q_2 e^{i\theta}$.

Proprietatea 2.3.4. [58] Matricea operatorului de netezire corespunzătoare metodei Gauss-Seidel este

$$\widehat{S}_h = \widehat{S}_h^n \widehat{S}_h^r = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (a+1)^2 - (a-1)(b-1) & (b-1)(a-b) \\ -(a-1)(a-b) & (b+1)^2 - (a-1)(b-1) \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

unde $a = 1 - \frac{\omega}{q_0} \widetilde{L}(\theta), b = 1 - \frac{\omega}{q_0} \widetilde{L}(\bar{\theta})$.

Proprietatea 2.3.5. [58] Operatorul de restricție are matricea

$$\widehat{I}_h^{2h} = \frac{1}{2} (1 + \cos\theta \quad 1 + \cos\bar{\theta}). \quad (2.13)$$

Proprietatea 2.3.6. [58] Matricea operatorului pe grila rară este

$$\widehat{L}_{2h}^{-1}(2\theta) = \frac{1}{\widetilde{L}_{2h}(2\theta)}. \quad (2.14)$$

Proprietatea 2.3.7. [58] Matricea operatorului de prelungire este

$$\widehat{I}_{2h}^h = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos\theta \\ 1 + \cos\theta \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Operatorul 2-grid

$$\widehat{M}_h^{2h} = \widehat{S}_h^{\nu_2} \widehat{K}_h^{2h} \widehat{S}_h^{\nu_1}, \quad (2.16)$$

unde

$$\widehat{K}_h^{2h} = \widehat{I}_h - \widehat{I}_{2h}^h (\widehat{L}_{2h})^{-1} \widehat{I}_h^{2h} \widehat{L}_h. \quad (2.17)$$

Definiția 2.3.1. [86] **Factorul de convergență asimptotică al metodei 2-grid este**

$$\rho_{loc}(M_h^{2h}) = \sup \left\{ \rho_{loc}(\widehat{M}_h^{2h}(\theta)), \theta \in T^l = \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], \theta \notin \Lambda \right\}. \quad (2.18)$$

Definiția 2.3.2. [86] **Factorul de reducere a erorii pentru metoda 2-grid este**

$$\sigma_{loc}(M_h^{2h}) = \sup \left\{ \|\widehat{M}_h^{2h}(\theta)\|, \theta \in T^l = \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], \theta \notin \Lambda \right\}. \quad (2.19)$$

Aici $\|\cdot\|$ reprezintă norma Euclidiană în \mathbb{C}^2 și

$$\Lambda = \left\{ \theta \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], \widetilde{L}_h(\theta) = 0 \text{ sau } \widetilde{L}_{2h}(\theta) = 0 \right\}. \quad (2.20)$$

Definiția 2.3.3. [86] **Factorul de netezire al metodei 2-grid este**

$$\mu_{loc}(S_h, \nu) = \sup \left\{ \sqrt[\nu]{\rho_{loc}(\widehat{S}_h^{\nu_2}(\theta) \widehat{Q}_h^{2h} \widehat{S}_h^{\nu_1}(\theta))}, \theta \in T^l = \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \right\}. \quad (2.21)$$

unde $\rho_{loc}(\widehat{S}(\theta))$ este raza spectrală a matricei $\widehat{S}(\theta)$, $\nu = \nu_1 + \nu_2$.

$$Q_h^{2h} \varphi(\theta, \cdot) = \begin{cases} 0, & \theta \in T^l = \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \\ \varphi(\theta, \cdot), & \theta = \bar{\theta} \in T^h, \end{cases}$$

$$\widehat{Q}_h^{2h}(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \theta \in T^l.$$

Observația 2.3.1. Deoarece $\rho_{loc}(\widehat{S}_h^{\nu_2}(\theta) \widehat{Q}_h^{2h} \widehat{S}_h^{\nu_1}(\theta)) = \rho_{loc}(\widehat{Q}_h^{2h} \widehat{S}_h^\nu(\theta))$, factorul de netezire va fi de forma

$$\mu_{loc}(S_h, \nu) = \sup \left\{ \sqrt[\nu]{\rho_{loc}(\widehat{Q}_h^{2h} \widehat{S}_h^\nu(\theta))}, \theta \in T^l \right\}. \quad (2.22)$$

2.3.3 Rezultatele obținute cu analiza Fourier locală pentru problema studiată

Teorema 2.3.1. [58] Dacă $\omega=1$ atunci matricea (2.12) a operatorului de netezire corespunzător metodei Gauss-Seidel după $\nu = \nu_1 + \nu_2$ pași este

$$\widehat{S}_h^\nu(\theta) = \frac{1}{4^{\nu-1}}(a-b)^{2(\nu-1)}\widehat{S}_h(\theta)$$

și are valorile proprii $\lambda_1 = 0$ și $\lambda_2 = \frac{(a-b)^{2(\nu-1)}}{4^\nu}[(b+1)^2 - (a-1)(b-1)]$, valorile a și b fiind date în Proprietatea 2.3.2.

Teorema 2.3.2. [58] Factorul de netezire al metodei Gauss-Seidel pentru problema (2.9) este

$$\mu_{loc}(S_h, \nu) = \left(\frac{q_1 + q_2}{q_0}\right)^2 \sqrt[\nu]{\frac{q_0 + q_1 + q_2}{2(q_1 + q_2)}}. \quad (2.23)$$

Pentru metoda diferențelor finite, q_0, q_1, q_2 sunt

$$q_0 = -\alpha + \frac{c}{dt} + \frac{2d}{h^2}, q_1 = -\frac{v}{2h} - \frac{d}{h^2}, q_2 = \frac{v}{2h} - \frac{d}{h^2}, f_i = f(x_i) + c\frac{u_i^{ant}h}{h_t},$$

pentru metoda elementului finit

$$q_0 = -\frac{2\alpha h}{3} + \frac{2ch}{3h_t} + \frac{2d}{h}, q_1 = -\frac{\alpha h}{6} + \frac{ch}{6h_t} - \frac{v}{2} - \frac{d}{h}, q_2 = -\frac{\alpha h}{6} + \frac{ch}{6h_t} + \frac{v}{2} - \frac{d}{h},$$

$$f_i = f(x_i) + \frac{ch}{6h_t}(u_{i-1}^{ant} + 4u_i^{ant} + u_{i+1}^{ant}),$$

iar pe frontierele dintre straturi

$$q_0 = \frac{1}{h}(d(x_i^-) + d(x_i^+)), q_1 = -\frac{1}{h}d(x_i^-), q_2 = -\frac{1}{h}d(x_i^+), f_i = 0.$$

Pentru $a = 10^{-4}, ct = 1, d_1 = 1 \cdot 10^{-12}, d_2 = 1 \cdot 10^{-10}, d_3 = 3 \cdot 10^{-10}, v_1 = 1 \cdot 10^{-9}, v_2 = 1 \cdot 10^{-6}, v_3 = 1 \cdot 10^{-6}$ factorii de netezire ai metodei de relaxare Gauss-Seidel sunt prezentați în Tabelul 2.4.

Metoda diferențelor finite					
	$\nu=1$	$\nu=2$	$\nu=3$	$\nu=4$	$\nu=5$
$l = 3$	0.0058	$8.8272 \cdot 10^{-4}$	$4.7260 \cdot 10^{-4}$	$3.4581 \cdot 10^{-3}$	$2.8670 \cdot 10^{-3}$
$l = 4$	0.0215	0.0066	0.0044	0.0037	0.0032
$l = 5$	0.0667	0.0409	0.0348	0.0321	0.0306
Metoda elementului finit					
	$\nu=1$	$\nu=2$	$\nu=3$	$\nu=4$	$\nu=5$
$l = 3$	0.3493	0.2801	0.2603	0.2509	0.2454
$l = 4$	0.2809	0.2125	0.1937	0.1849	0.1798
$l = 5$	0.0991	0.0533	0.0434	0.0391	0.0368

Tabelul 2.4: Factorul de netezire ca funcție de $\nu = \nu_1 + \nu_2$ și l

Observația 2.3.2. Datele din acest tabel arată că metoda de relaxare Gauss-Seidel roșu-negru este o metodă foarte bună de netezire pentru această problemă deoarece toți factorii de netezire pentru cazurile prezentate aici sunt mai mici decât 0.5. Ambele metode de discretizare au factori de netezire convenabili. Numărul de pași de

relaxare înainte și după corecția pe grila rară nu trebuie să fie prea mare pentru că factorul de netezire crește cu ν , mai utilă fiind aplicarea de mai multe ori a metodei multigrad.

Factorul de convergență asimptotică și factorul de reducere a erorii

Proprietatea 2.3.8. [58] Matricea operatorului 2-grid pentru problema (2.9) este

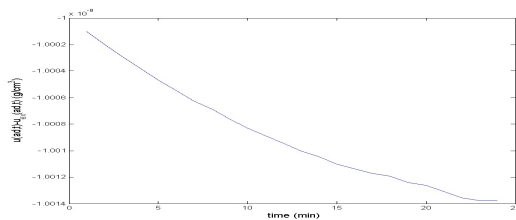
$$\widehat{M}_h^{2h} = \widehat{S}_h^{\nu_2}(\theta) \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{4\widetilde{L}_{2h}(2\theta)} \begin{pmatrix} (1 + \cos\theta)^2 \widetilde{L}_h(\theta) & (1 - \cos^2\theta) \widetilde{L}_h(\bar{\theta}) \\ (1 - \cos^2\theta) \widetilde{L}_h(\theta) & (1 + \cos\theta)^2 \widetilde{L}_h(\bar{\theta}) \end{pmatrix} \right] \widehat{S}_h^{\nu_1}(\theta). \quad (2.24)$$

Numărul de pași de netezire	Metoda diferențelor finite		Metoda elementului finit	
	$\rho_{loc}(M_h^{2h})$	$\sigma_{loc}(M_h^{2h})$	$\rho_{loc}(M_h^{2h})$	$\sigma_{loc}(M_h^{2h})$
$\nu_1 = 0, \nu_2 = 1$	0.1224	0.1731	0.0153	0.1989
$\nu_1 = 1, \nu_2 = 0$	0.1224	0.3297	0.0153	0.2420
$\nu_1 = 2, \nu_2 = 2$	$7.5569 \cdot 10^{-4}$	0.0019	$5.6099 \cdot 10^{-6}$	$2.0141 \cdot 10^{-5}$
$\nu_1 = 3, \nu_2 = 2$	$1.3862 \cdot 10^{-4}$	$3.5209 \cdot 10^{-4}$	$4.8333 \cdot 10^{-7}$	$1.7152 \cdot 10^{-6}$

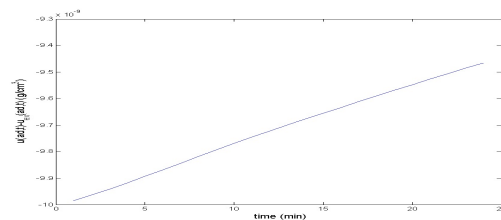
Tabelul 2.5: Factorul de convergență asimptotică și factorul de reducere a erorii pentru $l=6$

Observația 2.3.3. Datele din Tabelul 2.5 arată faptul că metoda multigrad este rapid convergentă. Dacă se face măcar un pas de netezire înainte și după corecția pe grila rară, atunci eroarea este redusă cu un factor de cel puțin 10^{-2} pe ciclu multigrad.

Rezultate numerice



(a) Metoda diferențelor finite



(b) Metoda elementului finit

Figura 2.2: Eroarea metodei multigrad la $ad=100\text{nm}$ pentru

$$v_1 = 1.0 \cdot 10^{-10}; v_2 = 1.0 \cdot 10^{-7}; v_3 = 1.0 \cdot 10^{-7}; d_1 = 1 \cdot 10^{-12}; d_2 = 1 \cdot 10^{-10}; d_3 = 3 \cdot 10^{-10}; c = 10^4; a = 0.$$

	FD		FEM	
	$\max_i u(x_i) - u_{ex}(x_i) $	$\ u - u_{ex}\ $	$\max_i u(x_i) - u_{ex}(x_i) $	$\ u - u_{ex}\ $
$l=3$	$1.0000 \cdot 10^{-8}$	$4.8970 \cdot 10^{-8}$	$9.9847 \cdot 10^{-9}$	$4.7554 \cdot 10^{-8}$
$l=4$	$1.0057 \cdot 10^{-8}$	$3.1812 \cdot 10^{-8}$	$1.6648 \cdot 10^{-8}$	$5.9871 \cdot 10^{-8}$
$l=5$	$1.0617 \cdot 10^{-7}$	$1.6775 \cdot 10^{-7}$	0.1079	0.2457
$l=6$	$8.3356 \cdot 10^{-7}$	$1.9383 \cdot 10^{-6}$	13.3535	30.8845

Tabelul 2.6: Eroarea metodei multigrad folosind diferențe finite și elemente finite

Metoda multigrid pentru probleme de convecție-difuzie nestaționare

Metodologia generală și analiza Fourier locală descrise în capitolele anterioare permit alcătuirea unor algoritmi multigrid în mai multe moduri în funcție de componentele alese și de modul de folosire a acestora. Toate trebuie adaptate la tipul de problemă care se rezolvă, neexistând un algoritm multigrid unic pentru toate tipurile de ecuații diferențiale.

În Secțiunea 3.2, pornind de la analiza Fourier a metodei multigrid, am studiat (lucrarea [59]) aplicarea eficientă a acesteia, respectiv convergența și proprietățile de reducere a erorii pentru o ecuație de convecție-difuzie nestaționară în spațiul bidimensional, ca o extensie a rezultatelor din Secțiunea 2.3.

Este de asemenea aplicată, în Secțiunea 3.3, metoda difuziei pe direcția curentului care este utilă pentru reducerea oscilațiilor care apar în cazul când în procesul fizic este dominantă convecția.

La final sunt prezentate în Secțiunea 3.4 rezultatele obținute prin aplicarea metodei multigrid în cazul tridimensional, iar în Secțiunea 3.5 cele obținute într-un mediu format din mai multe straturi cu proprietăți de difuzie diferite (lucrarea [60]).

3.1 Modelul matematic

Ecuatia fenomenului de convecție-difuzie nestaționar este

$$\begin{cases} c_t \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + V \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) = D \Delta u(\mathbf{x}, t) + \alpha u(\mathbf{x}, t) + f(\mathbf{x}, t), & t \geq 0, \mathbf{x} \in \Omega, \\ u(\mathbf{x}_0, t) = u_0, & t \geq 0, \mathbf{x}_0 \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.1)$$

Aici $u(\mathbf{x}, t)$ reprezintă concentrația substanței transportate printr-un fluid, $V = (V_1, V_2)$ este vectorul coeficienților pentru curentul de convecție și D este coeficientul de difuzie sau vâscozitate, $\Omega = [a, b] \times [c, d]$ este domeniul unde procesul fizic are loc.

Concentrația substanței aplicate pe suprafața pielii este constantă la orice moment de timp

$$u((x, c), t) = u_0, \quad t \geq 0, a \leq x \leq b. \quad (3.2)$$

Pe frontierele dintre straturi legea conservării fluxului este

$$\left[-D \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{n}} \right]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{0i}} = -D^+ \frac{\partial u(\mathbf{x}^+, t)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{0i}} + D^- \frac{\partial u(\mathbf{x}^-, t)}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{0i}} = 0, \quad (3.3)$$

$$i = 1, 2, \dots, n_d, t \geq 0,$$

n_d fiind numărul de straturi unde procesul de convecție-difuzie are loc.

Sistemul obținut din ecuația (3.1) folosind una dintre metodele de discretizare va fi de forma

$$\begin{cases} q_1 u_{i-1,j+1} + q_2 u_{i,j+1} + q_3 u_{i+1,j+1} + q_4 u_{i-1,j} + q_5 u_{i,j} + q_6 u_{i+1,j} + \\ \quad + q_7 u_{i-1,j-1} + q_8 u_{i,j-1} + q_9 u_{i+1,j-1} = f_{i,j}, \quad i = 1, 2, \dots, n_x, j = 1, 2, \dots, n_y, \\ u|_{\partial\Omega} = u_0, \end{cases} \quad (3.4)$$

unde

$$u_{i,j} = u(x_i, y_j, t), (x_i, y_j) \in G_h = \left\{ (mh_x, nh_y) \mid m, n \in \mathbb{Z}, h_x = \frac{b-a}{n_x+1}, h_y = \frac{d-c}{n_y+1} \right\}.$$

Proprietatea 3.1.1. [59] Pornind de la ecuația diferențială (3.1), folosind discretizarea cu diferențe finite cu schema explicită a lui Euler de tip "backward" pentru direcția timp și notând pasul pentru discretizarea în raport cu timpul cu h_t , coeficienții nenuli din sistemul (3.4) vor fi

$$q_5 = -\alpha + \frac{c_t}{h_t} + 2D \left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} \right) - V \left(\frac{1}{h_x} + \frac{1}{h_y} \right), q_4 = -\frac{d}{h_x^2}, q_6 = \frac{V}{h_x} - \frac{D}{h_x^2},$$

$$q_8 = -\frac{d}{h_y^2}, q_2 = \frac{V}{h_y} - \frac{D}{h_y^2}, f_{i,j} = f(x_i, y_j) + \frac{c_t}{h_t} u_{i,j}^{ant}, \quad i = 1, \dots, n_x, j = 1, \dots, n_y.$$

Observația 3.1.1. Legea conservării fluxului (3.3) pentru nodurile care sunt pe frontierele dintre diferite straturi din piele ($x_{0i}, i = 1, 2, \dots, n_d$) duce la ecuațiile

$$D^+ \frac{u_{i(n_l+1)+1,j+1} - u_{i(n_l+1)+1,j}}{h_y} = D^- \frac{u_{i(n_l+1)+1,j} - u_{i(n_l+1)+1,j-1}}{h_y},$$

$i = 1, 2, \dots, n_d, j = 1, \dots, n_y, n_l$ fiind numărul de puncte intermediare din fiecare strat.

Proprietatea 3.1.2. [59] Discretizarea ecuației diferențiale (3.1) cu metoda elementului finit duce la următorul sistem de ecuații liniare

$$\left[\begin{array}{ccc} K_{34}^{\Omega_1} + K_{24}^{\Omega_4} & K_{23}^{\Omega_4} + K_{14}^{\Omega_3} - k_{i,i+n_x} & K_{13}^{\Omega_3} \\ K_{34}^{\Omega_1} + K_{21}^{\Omega_4} - k_{i,i-1} & K_{33}^{\Omega_1} + K_{44}^{\Omega_2} + K_{11}^{\Omega_3} + K_{22}^{\Omega_4} - k_{i,i} & K_{43}^{\Omega_2} + K_{12}^{\Omega_3} - k_{i,i+1} \\ K_{31}^{\Omega_1} & K_{32}^{\Omega_1} + K_{41}^{\Omega_2} - k_{i,i-n_x} & K_{42}^{\Omega_2} \end{array} \right] u_i =$$

$$= f_3^{\Omega_1} + f_4^{\Omega_2} + f_1^{\Omega_3} + f_2^{\Omega_4} + \sum_{j=1}^N c_{ij} c_t \frac{u_j^{ant}}{h_t}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.5)$$

unde

$$\begin{aligned}
 \left(K_{ij}^{\Omega_e} \right)_{i,j=\overline{1:4}} &= \frac{D}{6} \begin{bmatrix} 2r_0 + \frac{2}{r_0} & -2r_0 + \frac{1}{r_0} & -r_0 - \frac{1}{r_0} & r_0 - \frac{2}{r_0} \\ -2r_0 + \frac{1}{r_0} & 2x + \frac{r_0}{2} & r_0 - \frac{r_0}{2} & -r_0 - \frac{1}{r_0} \\ -r_0 - \frac{1}{r_0} & r_0 - \frac{r_0}{2} & 2r_0 + \frac{r_0}{2} & -2r_0 + \frac{1}{r_0} \\ r_0 - \frac{2}{r_0} & -r_0 - \frac{1}{r_0} & -2r_0 + \frac{1}{r_0} & 2r_0 + \frac{2}{r_0} \end{bmatrix} + \\
 &+ \frac{V(b_1 - a_1)}{12} \begin{bmatrix} -2 & -1 & 1 & 2 \\ -1 & -2 & 2 & 1 \\ -1 & -2 & 2 & 1 \\ -2 & -1 & 1 & 2 \end{bmatrix} + \frac{V(d_1 - c_1)}{12} \begin{bmatrix} -2 & 2 & 1 & -1 \\ -2 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & -2 \end{bmatrix} + \\
 &+ \left(\frac{ct}{h_t} - \alpha \right) \frac{(b_1 - a_1)(d_1 - c_1)}{36} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}, \quad r_0 = \frac{d_1 - c_1}{b_1 - a_1}, \\
 k_{i,i-1} &= -\frac{D^+ - D^-}{2}, k_{i,i} = 0, k_{i,i+1} = \frac{D^+ - D^-}{2}, k_{i,i-n_x} = 0, k_{i,i+n_x} = 0.
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

3.2 Analiza Fourier locală a metodei multigrad pentru problema de convecție-difuzie nestaționară

Pentru a realiza analiza Fourier locală a metodei multigrad în cazul bidimensional, pentru o problema de convecție-difuzie care depinde și de timp, sunt determinate în această secțiune matricele operatorilor de netezire, restricție, corecție pe grila rară și de prelungire care compun matricea operatorului multigrad. Sunt determinați apoi factorii de netezire, de reducere a erorii și de convergență asimptotică, rezultatele obținute fiind comparate cu cele determinate numeric.

3.2.1 Componentele metodei multigrad

În continuare sunt calculați operatorii pentru fiecare componentă a metodei multigrad și matricele corespunzătoare. Notând setul de frecvențe joase cu

$$T^l = \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right) \times \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right), \tag{3.7}$$

și cu $T^h = [-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi] \setminus T^l$ spectrul frecvențelor înalte, pentru $\theta = (\theta_1, \theta_2) \in T^l$, se consideră următoarele frecvențe [86]:

$$\theta^{(1)} = (\theta_1, \theta_2) \in T^l, \theta^{(2)} = (\bar{\theta}_1, \theta_2) \in T^h, \theta^{(3)} = (\theta_1, \bar{\theta}_2) \in T^h, \theta^{(4)} = (\bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2) \in T^h,$$

$$\bar{\theta}_i = \begin{cases} \theta_i + \pi, & \text{dacă } \theta_i < 0 \\ \theta_i - \pi, & \text{dacă } \theta_i > 0 \end{cases}, \quad i \in \{1, 2\}.$$

Proprietatea 3.2.1. [59] Matricea corespunzătoare operatorului L_h al sistemului este de forma

$$\widehat{L}_h = \begin{pmatrix} \widetilde{L}_h(\theta^{(1)}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \widetilde{L}_h(\theta^{(2)}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \widetilde{L}_h(\theta^{(3)}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \widetilde{L}_h(\theta^{(4)}) \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$\widetilde{L}_h(\theta_1, \theta_2) = q_1 e^{-i\theta_1} e^{i\theta_2} + q_2 e^{i\theta_2} + q_3 e^{i\theta_1} e^{i\theta_2} + q_4 e^{-i\theta_1} + q_5 + q_6 e^{i\theta_1} + q_7 e^{-i\theta_1} e^{-i\theta_2} + q_8 e^{-i\theta_2} + q_9 e^{i\theta_1} e^{-i\theta_2}$
fiind o valoare proprie a operatorului L_h .

Proprietatea 3.2.2. [59] Matricea operatorul de netezire obținut cu metoda Gauss-Seidel este $\widehat{S}_h = \widetilde{S}_h^r \widehat{S}_h^n$, unde

$$\widehat{S}_h^r = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \widetilde{S}(\theta^{(1)}) + 1 & 0 & 0 & \widetilde{S}(\theta^{(4)}) - 1 \\ 0 & \widetilde{S}(\theta^{(2)}) + 1 & \widetilde{S}(\theta^{(3)}) - 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{S}(\theta^{(2)}) - 1 & \widetilde{S}(\theta^{(3)}) + 1 & 0 \\ \widetilde{S}(\theta^{(1)}) - 1 & 0 & 0 & \widetilde{S}(\theta^{(4)}) + 1 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

$$\widehat{S}_h^n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \widetilde{S}(\theta^{(1)}) & 0 & 0 & \widetilde{S}(\theta^{(4)}) - 1 \\ 0 & 1 + \widetilde{S}(\theta^{(2)}) & 1 - \widetilde{S}(\theta^{(3)}) & 0 \\ 0 & 1 - \widetilde{S}(\theta^{(2)}) & 1 + \widetilde{S}(\theta^{(3)}) & 0 \\ 1 - \widetilde{S}(\theta^{(1)}) & 0 & 0 & 1 + \widetilde{S}(\theta^{(4)}) \end{pmatrix}, \quad \widetilde{S}(\theta) = 1 - \frac{\omega}{q_5} \widetilde{L}(\theta). \quad (3.10)$$

Proprietatea 3.2.3. [59] Matricea operatorului de restricție este

$$\widehat{I}_h^{2h} = \left(\widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(1)}) \quad \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(2)}) \quad \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(3)}) \quad \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(4)}) \right), \quad (3.11)$$

cu

$$\begin{aligned} \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(1)}) &= \frac{1}{4}(\cos\theta_1 + 1)(\cos\theta_2 + 1), \quad \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(2)}) = \frac{1}{4}(1 - \cos\theta_1)(\cos\theta_2 + 1), \\ \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(3)}) &= \frac{1}{4}(\cos\theta_1 + 1)(1 - \cos\theta_2), \quad \widetilde{I}_h^{2h}(\theta^{(4)}) = \frac{1}{4}(1 - \cos\theta_1)(1 - \cos\theta_2). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Matricea operatorului care rezolvă sistemul pe grila rară este

$$\widehat{L}_{2h}^{-1}(2\theta) = \frac{1}{\widetilde{L}_{2h}(2\theta)}. \quad (3.13)$$

Proprietatea 3.2.4. [59] Matricea operatorului de prelungire este

$$\widehat{I}_{2h}^h = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (1 + \cos\theta_1)(1 + \cos\theta_2) \\ (1 - \cos\theta_1)(1 + \cos\theta_2) \\ (1 + \cos\theta_1)(1 - \cos\theta_2) \\ (1 - \cos\theta_1)(1 - \cos\theta_2) \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Operatorul 2-grid

Pașii de netezire (3.9), (3.10) și corecția pe grila rară (3.11), (3.13) și (3.14) formează componentele metodei multigrad [35] și astfel operatorul 2-grid este

$$\widehat{M}_h^{2h} = \widehat{S}_h^{\nu_2} \widehat{K}_h^{2h} \widehat{S}_h^{\nu_1}, \quad (3.15)$$

unde matricea operatorului de corecție pe grila rară este

$$\widehat{K}_h^{2h} = \widehat{I}_h - \widehat{I}_{2h}^h (\widehat{L}_{2h})^{-1} \widehat{I}_h^{2h} \widehat{L}_h. \quad (3.16)$$

3.2.2 Factorul de netezire al metodei multigrad pentru problema de convecție-difuzie

Definiția 3.2.1. [86] Factorul de netezire al unei metode numerice care are matricea operatorului de netezire \widehat{S}_h este

$$\mu_{loc}(S_h, \nu) = \sup \left\{ \sqrt[\nu]{\rho_{loc}(\widehat{Q}_h^{2h} \widehat{S}_h^\nu(\theta))}, \theta \in T^l \right\}, \quad (3.17)$$

unde ν reprezintă numărul de pași de netezire, T^l este definit în (3.7) și restul parametrilor necesari sunt definiți în continuare.

Folosind Proprietatea 3.2.2, matricea operatorului de netezire va fi

$$\widehat{S}_h = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+a & 0 & 0 & 1-b \\ 0 & 1+c & 1-d & 0 \\ 0 & 1-c & 1+d & 0 \\ 1-a & 0 & 0 & 1+b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a+1 & 0 & 0 & b-1 \\ 0 & c+1 & d-1 & 0 \\ 0 & c-1 & d+1 & 0 \\ a-1 & 0 & 0 & b+1 \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

unde

$$a = 1 - \frac{\omega}{q_5} \left(q_5 + q_4 e^{-i\theta_1} + q_6 e^{i\theta_1} + q_8 e^{-i\theta_2} + q_2 e^{i\theta_2} \right), \quad b = 1 - \frac{\omega}{q_5} \left(q_5 - q_4 e^{-i\theta_1} - q_6 e^{i\theta_1} - q_8 e^{-i\theta_2} - q_2 e^{i\theta_2} \right),$$

$$c = 1 - \frac{\omega}{q_5} \left(q_5 - q_4 e^{-i\theta_1} - q_6 e^{i\theta_1} + q_8 e^{-i\theta_2} + q_2 e^{i\theta_2} \right), \quad d = 1 - \frac{\omega}{q_5} \left(q_5 + q_4 e^{-i\theta_1} + q_6 e^{i\theta_1} - q_8 e^{-i\theta_2} - q_2 e^{i\theta_2} \right).$$

Teorema 3.2.1. [59] După ν pași de netezire, operatorul S_h obținut cu metoda Gauss-Seidel va avea matricea

$$\widehat{S}_h^\nu = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a^{2\nu-1}(a+1) & 0 & 0 & -a^{2\nu-1}(a+1) \\ 0 & c^{2\nu-1}(c+1) & -c^{2\nu-1}(c+1) & 0 \\ 0 & -c^{2\nu-1}(c-1) & c^{2\nu-1}(c-1) & 0 \\ -a^{2\nu-1}(a-1) & 0 & 0 & a^{2\nu-1}(a-1) \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Matricea $\widehat{Q}_h^{2h} \widehat{S}_h^\nu$ are următoarele valori proprii

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 0, \lambda_3 = \frac{a^{2\nu-1}(a-1)}{2}, \lambda_4 = c^{2\nu}.$$

Pentru $(\theta_1, \theta_2) \in T^l$ valorile λ_3 și λ_4 sunt reprezentate în Figurile 3.1 și 3.2.

Teorema 3.2.2. [59] Valorile proprii λ_3 și λ_4 își ating valorile maxime absolute

$$|\lambda_3|_{max} = \frac{\sqrt{q_5^2 + (q_4 - q_6 + q_8 - q_2)^2} |q_4 - q_6 + q_8 - q_2|^{2\nu-1}}{2q_5^{2\nu}} \text{ pentru } \theta_1 = \theta_2 = \pm \frac{\pi}{2},$$

$$|\lambda_4|_{max} = \frac{|q_6 - q_4 + q_2 - q_8|^{2\nu}}{q_5^{2\nu}} \text{ pentru } \theta_1 = \pm \frac{\pi}{2}, \theta_2 = \mp \frac{\pi}{2}.$$

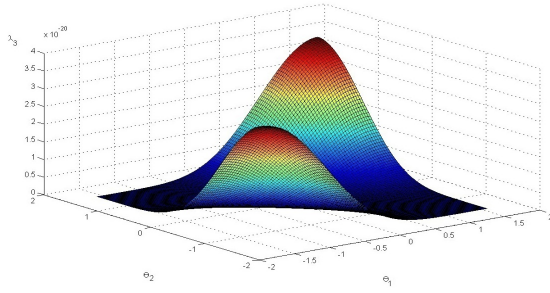


Figura 3.1: Valorile proprii λ_3 pentru $(\theta_1, \theta_2) \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \times \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$

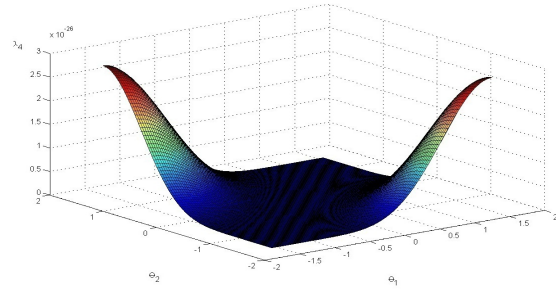


Figura 3.2: Valorile proprii λ_4 pentru $(\theta_1, \theta_2) \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \times \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$

Metoda diferențelor finite			
	$\nu=1$	$\nu=2$	$\nu=3$
$l = 3$	$2.5507 \cdot 10^{-8}$	$8.1475 \cdot 10^{-12}$	$5.5695 \cdot 10^{-13}$
$l = 4$	$5.1015 \cdot 10^{-8}$	$2.3045 \cdot 10^{-11}$	$1.7682 \cdot 10^{-12}$
$l = 5$	$1.0203 \cdot 10^{-7}$	$6.5180 \cdot 10^{-11}$	$5.6137 \cdot 10^{-12}$
Metoda elementului finit			
	$\nu=1$	$\nu=2$	$\nu=3$
$l = 3$	0.2500	0.0625	0.0156
$l = 4$	0.2500	0.0625	0.0156
$l = 5$	0.2500	0.0625	0.0156

Tabelul 3.1: Factorul de netezire în funcție de $\nu = \nu_1 + \nu_2$ și l

Observația 3.2.1. Datele din Tabelul 3.1 arată că:

- i. pentru metoda diferențelor finite factorul de netezire crește atunci când numărul de nivele folosite de metoda multigrad crește;
- ii. dacă este folosită metoda elementului finit, factorul de netezire rămâne constant chiar atunci când numărul de grile crește, astfel fiind independent de pasul grilei. Deci este mai eficientă folosirea metodei elementului finit când numărul de grile este mare.

3.2.3 Factorul de convergență asimptotică și factorul de reducere a erorii pentru metoda multigrad pentru problema de convecție-difuzie bidimensională

Definiția 3.2.2. [86] **Factorul de convergență asimptotică** al metodei multigrad este

$$\rho_{loc}(M_h^{2h}) = \sup \left\{ \rho_{loc}(\widehat{M}_h^{2h}(\theta)), \theta \in T^l = \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \times \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right], \theta \notin \Lambda \right\} \quad (3.20)$$

unde $\Lambda = \left\{ \theta \in T^l, \widetilde{L}_h(\theta) = 0 \text{ sau } \widetilde{L}_{2h}(\theta) = 0 \right\}$, iar M_h^{2h} este dat în relațiile (3.15) și (3.16)

Definiția 3.2.3. [86] **Factorul de reducere a erorii** al metodei multigrad este

$$\sigma_{loc}(M_h^{2h}) = \sup \left\{ \|(\widehat{M}_h^{2h}(\theta))\|, \theta \in T^l, \theta \notin \Lambda \right\} \quad (3.21)$$

Numărul pașilor de netezire	Metoda diferențelor finite		Metoda elementului finit	
	$\rho_{loc}(M_h^{2h})$	$\sigma_{loc}(M_h^{2h})$	$\rho_{loc}(M_h^{2h})$	$\sigma_{loc}(M_h^{2h})$
$\nu_1 = 0, \nu_2 = 1$	$3.7215 \cdot 10^{-5}$	$4.7404 \cdot 10^{-7}$	0.6249	1.2866
$\nu_1 = 1, \nu_2 = 0$	$3.7215 \cdot 10^{-5}$	$4.7481 \cdot 10^{-7}$	0.6249	1.2866
$\nu_1 = 1, \nu_2 = 1$	$2.0619 \cdot 10^{-13}$	$5.6180 \cdot 10^{-14}$	0.2499	0.6152
$\nu_1 = 2, \nu_2 = 1$	$1.1424 \cdot 10^{-21}$	$1.2624 \cdot 10^{-26}$	0.0859	0.2276
$\nu_1 = 2, \nu_2 = 2$	$6.3298 \cdot 10^{-30}$	$2.8369 \cdot 10^{-39}$	0.0273	0.0753

Tabelul 3.2: Factorul de convergență asimptotică și factorul de reducere a erorii pentru $l=6$

Observația 3.2.2. Datele din Tabelul 3.2 arată că este suficient să se facă un număr mic de pași de netezire înainte și/sau după corecția pe grila rară pentru ca eroarea să fie redusă eficient când este folosită metoda diferențelor finite. Iar pentru metoda elementului finit, rezultatele arată că măcar un pas de netezire trebuie efectuat înainte și după corecția pe grila rară pentru a reduce eroarea de exemplu cu un factor de 0.6 pe ciclul multigrad.

Rezultatele prezentate în Tabelul 3.1 și Tabelul 3.2 au fost determinate folosind parametrii [55], [71], [74]

$$\Omega = [0; 1] \times [0; 1620 \cdot 10^{-6}], c_t = 10^4, \alpha = 0, D = 10^{-12}, V = 10^{-9}, dt = 60sec.$$

3.3 Difuzia pe direcția fluxului

Față de metoda Galerkin, la funcțiile pondere se adaugă o perturbare pe direcția de curgere ("streamline upwind perturbation"), modificare care se aplică tuturor termenilor.

$$\begin{aligned} & \int_a^b \int_c^d c_t \frac{\partial u}{\partial t} v dx dy + \int_a^b \int_c^d \mathbf{V} \nabla u v dx dy + \int_a^b \int_c^d D \nabla u \cdot \nabla v dx dy + \\ & + \int_a^b \int_c^d \mu \mathbf{V} \nabla u \cdot \mathbf{V} \nabla v dx dy - \oint_{\partial\Omega} D \frac{\partial u}{\partial n} v ds - \int_a^b \int_c^d \alpha u v dx dy = \\ & = \int_a^b \int_c^d f v dx dy + \int_a^b \int_c^d f \mu \mathbf{V} \nabla v dx dy. \end{aligned}$$

Parametrul μ care intervine mai sus este definit prin $\mu = \frac{\delta h}{|\mathbf{V}|}$, unde

$$\delta = \begin{cases} 0, & Pe \leq 1 \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{Pe}\right), & Pe > 1 \end{cases}$$

este parametrul care determină valoarea perturbației adăugate la funcțiile pondere.

Definiția 3.3.1. Parametrul Pe definit prin $Pe = \frac{h|V|}{2D}$ se numește numărul lui Péclet și specifică raportul dintre convecție și difuzie.

În Tabelul 3.3 sunt prezentate rezultatele obținute pentru valoarea maximă a erorii în punctele grilei aplicând metoda difuzie în direcția fluxului, folosind următorii coeficienți de difuzie pe cele trei straturi $d_1 = 10^{-12}$, $d_2 = 10^{-10}$, $d_3 = 3 \cdot 10^{-10}$, $v_{x,1} = v_{y,1} = 10^{-9}$, $v_{x,2} = v_{y,2} = 10^{-6}$, $v_{x,3} = v_{y,3} = 10^{-6}$.

Momentul de timp \ Nivelul	s=1	s=2	s=3	s=4	s=5	s=6
$l = 3$	0.7340	2.1675	4.3383	7.2321	10.8486	15.1875
$l = 4$	1.1258	1.5041	2.1445	3.5727	5.3566	7.4953
$l = 5$	1.3536	2.1216	3.2705	4.7978	6.7008	8.9772
$\max_{(x,y) \in \Omega} ue(x,y,s \cdot h_t) $	61	121	181	241	301	361

Tabelul 3.3: Eroarea și valoarea maximă a soluției exacte pentru $h_t = 60sec$

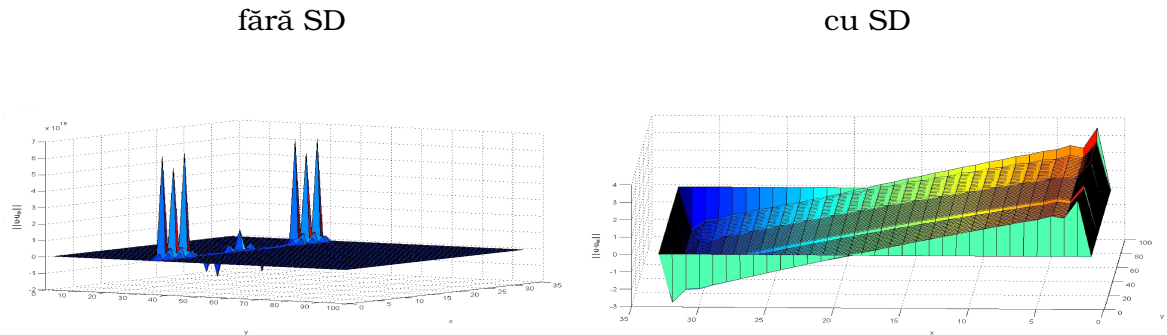


Figura 3.3: Eroarea obținută fără metoda difuziei în direcția fluxului (SD), respectiv cu metoda SD la momentul $T=240$ sec, pe grila cu $l = 3$ pentru cazul în care convecția este dominantă

Observația 3.3.1. În Figura 3.3 este pusă în evidență eficiența metodei difuziei în direcția fluxului (SD): oscilațiile generate de metoda multigrad la frontierele dintre straturile mediului în care are loc fenomenul fizic din cazul când nu se aplică această metodă au dispărut când sunt combinate cele două metode.

3.4 Metoda multigrad pentru problema de convecție-difuzie nestaționară în cazul tridimensional

Modelul matematic al procesului de convecție-difuzie al unei substanțe printr-un mediu lichid în cazul tridimensional este

$$c_t \frac{\partial u}{\partial t} + V_x \frac{\partial u}{\partial x} + V_y \frac{\partial u}{\partial y} + V_z \frac{\partial u}{\partial z} = - \left(D_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \alpha u + f, \quad (x, y, z) \in \Omega \subset \mathbb{R}^3, \quad (3.22)$$

cu condițiile la frontieră de tip Dirichlet $u(x, y, z) = u_0(x, y, z), (x, y, z) \in \partial\Omega$.

În ecuația (3.22) $\bar{V} = V_x\bar{i} + V_y\bar{j} + V_z\bar{k}$ este vectorul coeficienților de convecție, iar $\bar{D} = D_x\bar{i} + D_y\bar{j} + D_z\bar{k}$ este cel al coeficienților de difuzie, α este coeficientul de reacție [32], f este o posibilă sursă de perturbații (datorate de exemplu reacțiilor chimice).

Ecuația discretizată cu metoda diferențelor finite de ordinul al doilea, folosind metoda lui Euler de tip "backward", va fi

$$\begin{aligned} & \left[c_t \frac{1}{h_t} + 2 \left(\frac{D_x}{h_x^2} + \frac{D_y}{h_y^2} + \frac{D_z}{h_z^2} \right) - \alpha \right] u_{i,j,k,t} + \\ & + \left(\frac{v_x}{2h_x} - \frac{D_x}{h_x^2} \right) u_{i+1,j,k,t} \left(-\frac{v_x}{2h_x} - \frac{D_x}{h_x^2} \right) u_{i-1,j,k,t} + \\ & + \left(\frac{v_y}{2h_y} - \frac{D_y}{h_y^2} \right) u_{i,j+1,k,t} + \left(-\frac{v_y}{2h_y} - \frac{D_y}{h_y^2} \right) u_{i,j-1,k,t} + \\ & + \left(\frac{v_z}{2h_z} - \frac{D_z}{h_z^2} \right) u_{i,j,k+1,t} + \left(-\frac{v_z}{2h_z} - \frac{D_z}{h_z^2} \right) u_{i,j,k-1,t} = f_{i,j,k} + c_t \frac{1}{h_t} u_{i,j,k,t_0}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

3.4.1 Rezultate numerice obținute cu metoda multigrad pentru cazul tridimensional

Exemplul 3.4.1.

Domeniul unde s-a aplicat metoda multigrad pentru problema (3.22) este un cub cu latura $[0, 10^{-6}]$, iar coeficienții folosiți în ecuație au fost $c_t = 1, D_x = D_y = D_z = 1 \cdot 10^{-8}, v_x = v_y = v_z = 0, \alpha = 0$ ([71], [74]).

Daca se aleg ca date inițiale $u(x, y, z, t) = u_{ex}(x, y, z, t) = x^2 + y^2 + z^2 + t$, pentru orice $(x, y, z) \in \partial\Omega$, eroarea obținută este reprezentată în Figura 3.4.

nivelul	max	$\ u - u_{ex}\ $
$l=2$	0.5068	0.6194
$l=3$	0.2722	0.4324
$l=4$	0.2720	0.3494
$l=5$	0.2721	0.3067

$$max(u_{ex}(l, t_s)) = 540,$$

$s = 10$ - numărul de pași de timp folosiți

Tabelul 3.4: Erorile obținute cu metoda multigrad pentru problema (3.22)

În Tabelul 3.4 s-a notat cu

$$max = \max_{i=1:N} |u(x_i, y_i, z_i, t_s) - u_{ex}(x_i, y_i, z_i, t_s)|,$$

$$\|u - u_{ex}\| = \sum_{i=1}^N \left[u(x_i, y_i, z_i, t_s) - u_{ex}(x_i, y_i, z_i, t_s) \right]^2,$$

$t_s = s \cdot h_t$ fiind momentul de timp până când se aplică algoritmul multigrad, unde $h_t = 60s$.

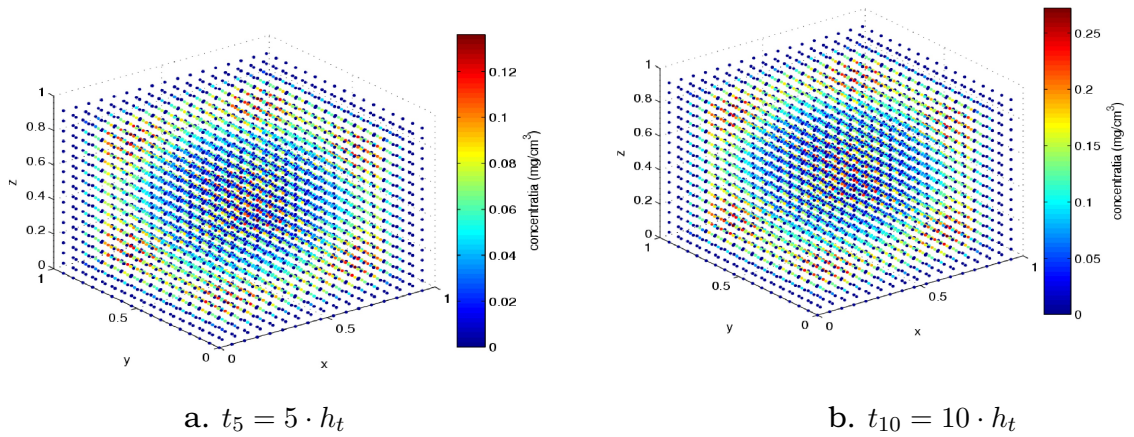


Figura 3.4: Eroarea obținută pentru exemplul 3.4.1 la momentul $t_5 = 5 \cdot h_t$ și $t_{10} = 10 \cdot h_t$

3.5 Metoda multigrad pentru ecuația difuziei într-un mediu cu mai multe straturi

Ecuția procesului de difuzie este un exemplu clasic de ecuație parabolică. În acest paragraf este construită metoda multigrad pentru o astfel de ecuație (lucrarea [60]).

3.5.1 Modelul matematic

Ecuția cu condiții la frontiere este

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i(z, t)}{\partial t} = D(z) \frac{\partial u_i(z, t)}{\partial z}, \\ u(0, t) = u_0, \\ u(b, t) = 0 \text{ sau } -D(z) \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=b} = 0, \\ \left[\left[-D(z) \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right] \right] \Big|_{z=z_{0i}} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n_d - 1, \end{cases} \quad t \geq 0. \quad (3.24)$$

Proprietatea 3.5.1. [60] Sistemul de ecuații liniare obținut cu metoda diferențelor finite aplicată ecuației (3.24) este

$$\frac{u_{i,t} - u_{i,t-1}}{h_t} = D(z_i) \frac{u_{i+1,t} - u_{i-1,t}}{2h_z}, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3.25)$$

Observația 3.5.1. În nodurile care se află pe frontierele dintre straturile din piele ($z_{0i}, i = 1, 2, \dots, n_d - 1$), ecuația care descrie legea de conservare a fluxului este

$$D(z_i^-) \frac{u_{i,t} - u_{i-1,t}}{h_z} = D(z_i^+) \frac{u_{i+1,t} - u_{i,t}}{h_z}, \quad i = 1, 2, \dots, n_d - 1. \quad (3.26)$$

3.5.2 Rezultate numerice, interpretarea rezultatelor

Metoda multigrad a fost folosită în trei moduri:

- **1.** Cunoscând concentrația substanței aplicate, s-a calculat ce cantitate din aceasta poate să ajungă la un anumit nivel din piele (Tabelul 3.5)

a. $D_1 = 1 \cdot 10^{-12}$; $D_2 = 1 \cdot 10^{-10}$; $D_3 = 3 \cdot 10^{-10}$; $c_0 = 2 \cdot 10^{-3}$;

$h(m)$	$l=4$	$l=6$
$20 \cdot 10^{-6}$	$[1.0734; 1.0967] \cdot 10^{-3}$	$[1.0563; 1.0622] \cdot 10^{-3}$
$120 \cdot 10^{-6}$	$[0.9551; 0.9566] \cdot 10^{-3}$	$[0.9360; 0.9363] \cdot 10^{-3}$
$200 \cdot 10^{-6}$	$[0.8415; 0.9551] \cdot 10^{-3}$	$[0.7719; 0.7976] \cdot 10^{-3}$
$1000 \cdot 10^{-6}$	$[0.0541; 0.0653] \cdot 10^{-3}$	$[0.0453; 0.0475] \cdot 10^{-3}$
$1600 \cdot 10^{-6}$	$[1.3482; 2.7545] \cdot 10^{-6}$	$[0.6432; 0.9670] \cdot 10^{-6}$

Tabelul 3.5: Valorile concentrației la adâncimea h în condițiile de la cazul a.

- **2.** Pentru ca la un nivel dat concentrația să fie suficient de mare pentru ca substanța activă să fie eficientă, s-a determinat ce concentrație trebuie să fie aplicată la suprafață. În Tabelul 3.6: c reprezintă concentrația necesară la adâncimea h ; c_0 este concentrația care ar trebui să fie aplicată la suprafața pielii; coeficienții de difuzie cu care s-a lucrat sunt $D_1 = 1 \cdot 10^{-12}$, $D_2 = 1 \cdot 10^{-10}$, $D_3 = 3 \cdot 10^{-10}$ ([71], [74]). S-au folosit 31 de noduri interioare pe fiecare strat, respectiv 63 de noduri interioare în stratul în care concentrația s-a cerut să fie cuprinsă între valorile date.

$h(m)$	$c(g/cm^3)$	$c_0(g/cm^3)$
$15 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-3} \pm 10^{-6}$	$1.2832 \cdot 10^{-3}$
$100 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-4} \pm 10^{-7}$	$1.0578 \cdot 10^{-3}$
$200 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-4} \pm 10^{-7}$	$5.5977 \cdot 10^{-3}$
$1000 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-4} \pm 10^{-7}$	$14.5703 \cdot 10^{-3}$
$1600 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-5} \pm 10^{-7}$	$26 \cdot 10^{-3}$

Tabelul 3.6: Concentrația c_0 care trebuie aplicată la suprafață pentru a obține concentrația c la adâncimea h

- **3.** S-a studiat modul în care variază în timp concentrația substanței care ajunge până la o anumită adâncime într-un interval de timp, știind că la suprafață s-a aplicat o concentrație constantă timp de 2 minute (Figura 3.5).

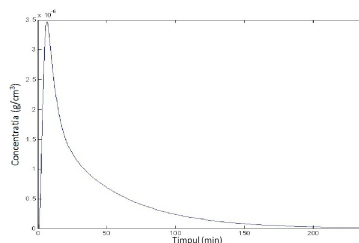


Figura 3.5: Variația concentrației la 200nm adâncime, timp de 4 ore (Nanoparticulele au fost aplicate la suprafață timp de 2 minute)

Metoda prelungirilor în stea

În acest capitol este introdusă o nouă metodă, numită ”metoda prelungirilor în stea” pentru rezolvarea ecuațiilor diferențiale cu derivate parțiale care folosește un sistem de grile din ce în ce mai fine, așa cum a fost prezentată în lucrările [56] și [57].

4.1 Problema model

Ecuția diferențială folosită ca model pentru prezentarea metodei este problema de convecție-difuzie

$$\begin{cases} -e\Delta u + au_x = f, & (x, y) \in (0, 1) \times (0, 1), \\ u = 0, & (x, y) \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (4.1)$$

Fie l -nivelul pe care se caută valorile aproximative ale soluției exacte și $n_l = 2^{l+1} - 1$ numărul de noduri din grila corespunzătoare acestui nivel. Aplicând una dintre metodele de discretizare prezentate în Secțiunea 1.2, se poate genera sistemul de ecuații liniare care discretizează ecuația diferențială pe orice nivel $l = 0, 1, \dots$. Acest sistem conține n_l^2 ecuații și n_l^2 necunoscute. În prima etapă acest sistem este rezolvat folosind metoda eliminării a lui Gauss cu pivotare parțială, pe o grilă mai rară, G_{l_0} , astfel încât sistemul care trebuie rezolvat va avea mai puține ecuații și necunoscute. Se alege, de exemplu, $l_0 = 2$ sau $l_0 = 3$.

Astfel, soluția exactă a problemei la nivelul l_0 este aproximată prin valorile $u_i, i \in \{1, 2, \dots, n_{l_0}^2\}$. În a doua etapă, soluția obținută pe nivelul l_0 este folosită pentru a genera soluția pe nivelul superior l . Pentru a calcula aproximațiile soluției pe nivelul l , grila G_{l_0} trebuie divizată mai departe. Fiecare domeniu $\Omega_k, k = 1, \dots, (n_0+1)^2$ (Figura ??) din aceasta va fi împărțit în $(n_i + 1)^2$ subdomenii, unde $n_i = 2^{l_i+1} - 1$ și $l_i = l - l_0 - 1$.

4.2 Determinarea valorilor la frontierele subdomeniilor

4.2.1 Prelungirea în stea

Pentru a determina mai exact valorile aproximative ale soluției pe frontierele domeniilor Ω_k , se pot folosi soluțiile sistemelor obținute discretizând cu metoda diferen-

țelor finite sau a elementului finit ecuația inițială în punctele din grilă corespunzătoare valorilor a_k , respectiv b_k , $k = 1, 2, \dots, n^2 + n$, $n = n_{l_0}$ din Figura 4.1.

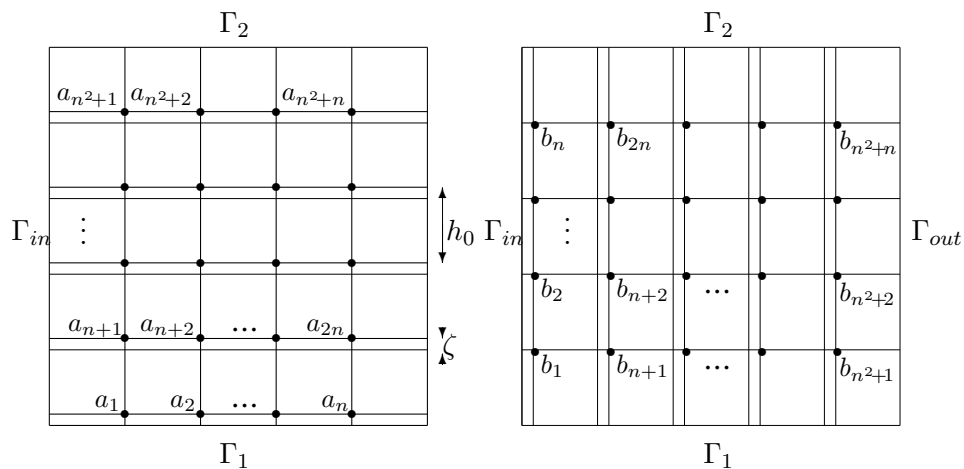


Figura 4.1: Nodurile a_i și b_i din grila G_l

Valorile a_k , respectiv b_k , $k = 1, 2, \dots, n_0(n_0 + 1)$ depind de distanța verticală, respectiv orizontală ζ , cu care sunt deplasate față de vechea grilă G_{l_0} și vor fi notate în continuare cu $a_k(\zeta)$ și $b_k(\zeta)$, $\zeta = jh$, $j = 1, \dots, n_i$, $k = 1, \dots, n_0(n_0 + 1)$, $h = \frac{h_0}{n_i + 1}$.

Acestea sunt soluțiile unor sisteme de forma

$$Aa = T, \tag{4.2}$$

$$Bb = T, \tag{4.3}$$

unde A și B sunt prezentate în continuare în funcție de tipul de discretizare ales.

4.2.2 Discretizare prin metoda diferențelor finite

Proprietatea 4.2.1. [56] Dacă ecuația diferențială cu derivate parțiale (4.1) este discretizată cu metoda diferențelor finite de ordinul al doilea, matricea A din sistemul 4.2 va fi de forma

$$A = \begin{bmatrix} C & D & \Theta & \dots & \Theta & \Theta \\ S & C & D & \dots & \Theta & \Theta \\ \Theta & S & C & \dots & \Theta & \Theta \\ \vdots & & & \ddots & & \\ \Theta & \Theta & \Theta & \dots & S & C \end{bmatrix} \in M_{(n_0+1)n_0, (n_0+1)n_0}(\mathbb{R}), \tag{4.4}$$

$$C = \begin{bmatrix} q_c & q_r & 0 & \dots & 0 \\ q_l & q_c & q_r & \dots & 0 \\ 0 & q_l & q_c & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_c \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} q_u & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_u & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q_u & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_u \end{bmatrix}, S = \begin{bmatrix} q_d & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_d & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q_d & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_d \end{bmatrix} \tag{4.5}$$

$C, D, S \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R})$.

Membrul drept T din sistemul (4.2) este un vector cu componentele

$$t_{in_0+j}(\zeta) = h_0^2 f(jh_0, ih_0 + \zeta) - \begin{bmatrix} 0 & q_u & 0 \\ q_l & q_c & q_r \\ 0 & q_d & 0 \end{bmatrix} u_{fr}(jh_0, ih_0 + \zeta), \quad (4.6)$$

$i = 0, \dots, n_0, j = 1, \dots, n_0,$

u_{fr} fiind o funcție nulă în interiorul domeniului Ω pe care se lucrează și egală cu valorile la frontieră pe $\partial\Omega$, h este pasul grilei de la nivelul l_0 , iar

$$\begin{bmatrix} 0 & q_u & 0 \\ q_l & q_c & q_r \\ 0 & q_d & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -e\alpha y_0 & 0 \\ -e - \frac{ah_0}{2} & 2[e + \alpha(x_0 + y_0)] & -e + \frac{ah_0}{2} \\ 0 & -e\alpha x_0 & 0 \end{bmatrix}.$$

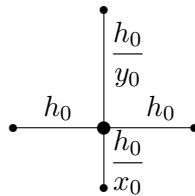


Figura 4.2: Nodurile vecine pentru grila corespunzătoare punctelor a_k

Proprietatea 4.2.2. [56] Valorile $b_k(\zeta), k = 1, 2, \dots, n_0(n_0 + 1)$ depind de poziția lor orizontală, ζ față de vechea grilă și se calculează rezolvând sistemul (4.3) a cărui matrice B este tot de forma (4.4), dar în care matricele bloc sunt

$$C = \begin{bmatrix} q_c & q_u & 0 & \dots & 0 \\ q_d & q_c & q_u & \dots & 0 \\ 0 & q_d & q_c & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_c \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} q_r & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_r & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q_r & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_r \end{bmatrix}, S = \begin{bmatrix} q_l & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & q_l & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & q_l & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & q_l \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

unde

$$\begin{bmatrix} 0 & q_u & 0 \\ q_l & q_c & q_r \\ 0 & q_d & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -e & 0 \\ -e\alpha x_0 + \alpha h_0 \rho \delta & e[2 + \bar{\alpha}(x_0 + y_0)] + \alpha \gamma \rho & e\alpha y_0 + \alpha h_0 \rho \beta \\ 0 & -e & 0 \end{bmatrix}.$$

4.2.3 Discretizare cu metoda elementului finit

Proprietatea 4.2.3. [56] Dacă discretizarea ecuației diferențiale (4.1) se face cu metoda elementului finit, folosind notația

$$\begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ l_4 & l_5 & l_6 \\ l_7 & l_8 & l_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{24}^D & k_{23}^D + k_{14}^C & k_{13}^C \\ k_{34}^A + k_{21}^D & k_{33}^A + k_{44}^B + k_{11}^C + k_{22}^D & k_{43}^B + k_{12}^C \\ k_{31}^A & k_{32}^A + k_{41}^B & k_{42}^B \end{bmatrix},$$

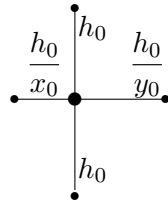


Figura 4.3: Nodurile vecine pentru grila corespunzătoare punctelor b_k

în sistemul (4.2) matricea A va avea următoarele matrice bloc componente

$$C = \begin{bmatrix} l_5 & l_6 & 0 & \dots & 0 \\ l_4 & l_5 & l_6 & \dots & 0 \\ 0 & l_4 & l_5 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_5 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} l_2 & l_3 & 0 & \dots & 0 \\ l_1 & l_2 & l_3 & \dots & 0 \\ 0 & l_1 & l_2 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_2 \end{bmatrix}, S = \begin{bmatrix} l_8 & l_9 & 0 & \dots & 0 \\ l_7 & l_8 & l_9 & \dots & 0 \\ 0 & l_7 & l_8 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_8 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

iar componentele membrului drept vor fi

$$t_{in_0+j}(\zeta) = f_3^A + f_4^B + f_1^C + f_2^D - \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ l_4 & l_5 & l_6 \\ l_7 & l_8 & l_9 \end{bmatrix} u_{fr}(jh_0, ih_0 + \zeta), \quad (4.9)$$

$i = 0, \dots, n_0, j = 1, \dots, n_0.$

Proprietatea 4.2.4. [56] Pentru matricea B a sistemului (4.3), blocurile de matrice componente sunt

$$C = \begin{bmatrix} l_5 & l_2 & 0 & \dots & 0 \\ l_8 & l_5 & l_2 & \dots & 0 \\ 0 & l_8 & l_5 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_5 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}), D = \begin{bmatrix} l_6 & l_3 & 0 & \dots & 0 \\ l_9 & l_6 & l_3 & \dots & 0 \\ 0 & l_9 & l_6 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_6 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}),$$

$$S = \begin{bmatrix} l_4 & l_1 & 0 & \dots & 0 \\ l_7 & l_4 & l_1 & \dots & 0 \\ 0 & l_7 & l_4 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_4 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}). \quad (4.10)$$

Membrul drept este al sistemului (4.3) obținut cu metoda elementului finit este

$$t_{in_0+j}(\zeta) = f_3^A + f_4^B + f_1^C + f_2^D - \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ l_4 & l_5 & l_6 \\ l_7 & l_8 & l_9 \end{bmatrix} u_{fr}(ih_0 + \zeta, jh_0),$$

$i = 0, \dots, n_0, j = 1, \dots, n_0.$

4.3 Metoda prelungirilor în stea pentru condiții de tip Robin la frontiere

În această secțiune sunt prezentate matricele sistemelor (4.2) și (4.3) pentru cazul în care la frontierele domeniului, în locul condițiilor Dirichlet, sunt folosite condițiile de tip Robin. Pentru matricea sistemului (4.2) modificările intervin doar în prima și ultima matrice bloc de forma C , în timp ce pentru matricea sistemului (4.3) intervin schimbări în toate matricele bloc ale acesteia.

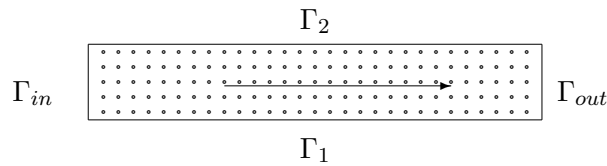


Figura 4.4: Frontierele domeniului problemei model

Pe frontierele Γ_1 și Γ_2 (Figura 4.4) se pun pentru ecuația (4.1) condițiile

$$e \frac{\partial u}{\partial n} + \xi u = g, (x, y) \in \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \quad (4.11)$$

unde e este coeficientul de difuzie, ξ permeabilitatea pereților Γ_1, Γ_2 , iar $\frac{\partial}{\partial n} = \frac{\partial}{\partial x} n_x + \frac{\partial}{\partial y} n_y$ reprezintă derivata pe direcția normalei la frontieră.

Proprietatea 4.3.1. Dacă se folosesc condiții de tip Robin, valorile necunoscutei u pe frontierele Γ_1 și Γ_2 sunt de forma

$$\begin{aligned} u_{i,1} &= pu_{i,2} + qg_{i,1}, \\ u_{i,n_l+2} &= pu_{i,n_l+1} + qg_{i,n_l+2}, i = 1, 2, \dots, n_l, \end{aligned} \quad (4.12)$$

unde

$$p = \frac{e}{e + \xi h_y}, q = \frac{h_y}{e + \xi h_y}.$$

Proprietatea 4.3.2. Matricea sistemului (4.2) va fi, pentru condiții de tip Robin (4.11) la frontiere, de forma

$$A = \begin{bmatrix} C_1 & D & \Theta & \dots & \Theta & \Theta \\ S & C & D & \dots & \Theta & \Theta \\ \Theta & S & C & \dots & \Theta & \Theta \\ \vdots & & & \ddots & & \\ \Theta & \Theta & \Theta & \dots & S & C_2 \end{bmatrix} \in M_{(n_0+1)n_0, (n_0+1)n_0}(\mathbb{R}). \quad (4.13)$$

Matricea A va avea componentele $C, D, S \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R})$ definite în relațiile (4.8) și

$$C_1 = \begin{bmatrix} l_5 + pl_8 & l_6 + pl_9 & 0 & \dots & 0 \\ l_4 + pl_7 & l_5 + pl_8 & l_6 + pl_9 & \dots & 0 \\ 0 & l_4 + pl_7 & l_5 + pl_8 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_5 + pl_8 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}),$$

$$C_2 = \begin{bmatrix} l_5 + pl_2 & l_6 + pl_3 & 0 & \dots & 0 \\ l_4 + pl_1 & l_5 + pl_2 & l_6 + pl_3 & \dots & 0 \\ 0 & l_4 + pl_1 & l_5 + pl_2 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_5 + pl_2 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}),$$

iar componentele membrului drept al sistemului (4.2) sunt

$$t_{in_0+j}(\zeta) = f_3^A + f_4^B + f_1^C + f_2^D - \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ l_4 & l_5 & l_6 \\ l_7 & l_8 & l_9 \end{bmatrix} (u_{fr}(jh_0, ih_0 + \zeta) + q \cdot g(jh_0, ih_0 + \zeta)),$$

$i = 0, \dots, n_0, j = 1, \dots, n_0.$

u_{fr} fiind o funcție nulă în interiorul domeniului Ω pe care se lucrează și pe Γ_1 și Γ_2 , respectiv egală cu valorile la frontieră pe $\Gamma_{in} \cup \Gamma_{out}$, iar h_0 este pasul grilei de la nivelul l_0 .

Proprietatea 4.3.3. Matricea B din sistemul (4.3) va fi de forma

$$B = \begin{bmatrix} C & D & \Theta & \dots & \Theta & \Theta \\ S & C & D & \dots & \Theta & \Theta \\ \Theta & S & C & \dots & \Theta & \Theta \\ \vdots & & & \ddots & & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ \Theta & \Theta & \Theta & \dots & S & C \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}),$$

unde

$$C = \begin{bmatrix} l_5 + pl_8 & l_2 & 0 & \dots & 0 \\ l_8 & l_5 & l_2 & \dots & 0 \\ 0 & l_8 & l_5 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_5 + pl_2 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} l_6 + pl_9 & l_3 & 0 & \dots & 0 \\ l_9 & l_6 & l_3 & \dots & 0 \\ 0 & l_9 & l_6 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_6 + pl_3 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}),$$

(4.14)

$$S = \begin{bmatrix} l_4 + pl_7 & l_1 & 0 & \dots & 0 \\ l_7 & l_4 & l_1 & \dots & 0 \\ 0 & l_7 & l_4 & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & l_4 + pl_1 \end{bmatrix} \in M_{n_0, n_0}(\mathbb{R}).$$

(4.15)

Membrul drept al sistemului (4.3) are componentele

$$t_{in_0+j}(\zeta) = f_3^A + f_4^B + f_1^C + f_2^D - \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ l_4 & l_5 & l_6 \\ l_7 & l_8 & l_9 \end{bmatrix} (u_{fr}(ih_0 + \zeta, jh_0) + q \cdot g(ih_0 + \zeta, jh_0)),$$

$i = 0, \dots, n_0, j = 1, \dots, n_0.$

4.4 Aplicarea metodei prelungirilor în stea

În această parte este prezentată aplicarea metoda prelungirilor în stea pentru mai multe probleme de convecție-difuzie. Este apoi realizată o comparare a rezultatelor obținute cu cele determinate folosind metoda multigrad, iar la final sunt prezentate concluziile acestora.

4.4.1 Compararea rezultatelor numerice obținute cu metoda multigrad cu cele obținute cu metoda prelungirilor în stea

Pentru problema de convecție-difuzie

$$\begin{cases} -e\Delta u + au_x = f, & (x, y) \in (0, 1) \times (0, 1) = \Omega, \\ u = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (4.16)$$

sunt prezentate în Tabelul 4.1 câteva rezultate pentru diferite valori ale coeficienților care intervin în ecuație. Este cunoscut din literatura de specialitate faptul că pentru acest tip de probleme, în cazul când convecția este dominantă, determinarea numerică a soluției este din ce în ce mai dificilă (de exemplu metoda multigrad converge foarte încet sau chiar deloc) pe măsură ce raportul dintre coeficientul de difuzie și cel de convecție devine mai mare.

1	SPFEM	MG	SPDF2	SPMGM
l	a=20	e=10	ue \sim 1.0098	
3	$7.0338 \cdot 10^{-5}$	$1.1430 \cdot 10^{-5}$	0.0013	$7.0338 \cdot 10^{-5}$
4	$7.0338 \cdot 10^{-5}$	$2.8699 \cdot 10^{-6}$	0.0013	$7.0338 \cdot 10^{-5}$
5	$7.0338 \cdot 10^{-5}$	$7.1829 \cdot 10^{-7}$	0.0013	$1.8970 \cdot 10^{-4}$
2	SPFEM	MG	SPDF2	SPMGM
l	a=1/10	e=1	ue \sim 1.7839	
3	$4.0852 \cdot 10^{-4}$	$2.1411 \cdot 10^{-5}$	0.0023	$4.0852 \cdot 10^{-4}$
4	$4.0852 \cdot 10^{-4}$	$5.3661 \cdot 10^{-6}$	0.0023	$4.0852 \cdot 10^{-4}$
5	$4.0852 \cdot 10^{-4}$	$1.3436 \cdot 10^{-6}$	0.0023	$4.8486 \cdot 10^{-4}$

Tabelul 4.1: Erorile obținute cu diferite metode pentru problema 4.16

Rezultatele numerice pentru erorile de aproximare din Tabelul 4.1 sunt obținute cu: metoda multigrad (MG), metoda prelungirilor în stea (SP), folosind discretizarea cu metoda elementului finit (SPFEM), metoda prelungirilor în stea (SP), cu discretizarea cu metoda diferențelor finite de ordinul al 2-lea, și prelungiri cu medii aritmetice (SPDF2), metoda SP, folosind discretizarea și prelungirea cu metoda elementului finit, iar rezolvarea pe subdomenii cu metoda multigrad (SPMGM).

În continuare metoda prelungirilor în stea este aplicată pentru cinci probleme de convecție-difuzie, în care coeficientul de difuzie este $e = 1$ în primele patru probleme, respectiv $e = \varepsilon$ în ultima, iar coeficienții de difuzie sunt precizați în fiecare tabel.

Problema 4.4.1	MG	SPFEM	MG	SPFEM
	$l = 3$		$l = 4$	
$R=0.001$	$9.7034 \cdot 10^{-5}$	$3.9636 \cdot 10^{-11}$	$1.2372 \cdot 10^{-4}$	$3.9636 \cdot 10^{-11}$
$R=1$	$6.1850 \cdot 10^{-5}$	$8.3193 \cdot 10^{-5}$	$8.6583 \cdot 10^{-5}$	$8.3193 \cdot 10^{-5}$
$R=10$	0.0042	0.0226	0.0010	0.0226
$R=100$	$1.9026 \cdot 10^{+39}$	0.7337	$4.4842 \cdot 10^{+39}$	0.3725
$R=200$	$1.0186 \cdot 10^{+59}$	1.8342	$7.7763 \cdot 10^{+66}$	0.8146

Tabelul 4.2: Erorile obținute cu metoda multigrad și metoda prelungirilor în stea pentru problema 4.4.1

Problema 4.4.1.

$$\begin{cases} -\Delta u + \alpha \nabla u = 0, & (x, y) \in (0, 1) \times (0, 1) = \Omega, \\ u = u_{ex}, & (x, y) \in \partial\Omega, \end{cases} \quad , \alpha = (c, d),$$

cu $u_{ex} = \frac{e^{cx} - 1}{e^c - 1} \frac{e^{dy} - 1}{e^d - 1}$.

Rezultatele obținute în urma aplicării metodei multigrad (MG), respectiv a prelungirilor în stea cu discretizare prin metoda elementului finit (SPFEM) pentru problema de mai sus sunt date în Tabelul 4.2.

Observația 4.4.1. Datele numerice obținute arată faptul că metoda prelungirilor în stea poate fi mai eficientă decât metoda multigrad pentru problemele de convecție-difuzie în cazul în care convecția este dominantă (raportul R dintre modulul coeficientului de convecție și cel de difuzie este mai mare decât 1).

4.5 Aplicații ale metodei prelungirilor în stea în probleme practice

În continuare sunt prezentate două exemple de aplicare a metodei prelungirilor în stea pentru o problemă de convecție-difuzie într-un domeniu rectangular bidimensional care modelează un caz concret necesar în medicină, apoi o problemă de difuzie într-un domeniu cu frontiere neregulate.

4.5.1 Metoda prelungirilor în stea pentru o problemă staționară de convecție-difuzie

Problema model

Pentru a studia problema transportului unui solvent într-un vas de sânge se folosește următoarea ecuație cu derivate parțiale

$$\begin{cases} m\Delta c + \mathbf{n} \nabla c + \alpha c = f, & (x, y) \in \Omega, \\ c = g_1, & (x, y) \in \Gamma_{in}, \\ c = g_2, & (x, y) \in \Gamma_{out}, \\ c = \xi g_3, & (x, y) \in \Gamma, \end{cases} \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2). \quad (4.17)$$

Aici $c = c(x, y)$ reprezintă concentrația solventului în sânge; primul termen, $m\Delta c$, din ecuația (2.9) descrie difuzia, al doilea termen, $n \nabla c$, descrie fenomenul de convecție și se poate descompune în doi termeni, unul pentru convecția pe direcția Ox , $n_1 \frac{\partial c}{\partial x}$ și unul pentru cea pe direcția Oy , $n_2 \frac{\partial c}{\partial y}$; m reprezintă coeficientul de difuzie a solventului, n este un câmp dat de viteze, α este coeficientul de reacție, f este un termen de perturbații posibile pentru concentrația soluției, datorat de exemplu reacțiilor chimice.

Determinarea soluției numerice a problemei de convecție-difuzie de forma (4.17) devine tot mai dificilă (converge slab sau chiar deloc) pe măsură ce raportul din relația (??) crește (adică predomină convecția în proces), și acesta este cazul studiat în problema model (4.17) (raportul aici este 10^4).

Rezultate numerice și concluzii

Pentru problema de convecție - difuzie (4.17), valoarea concentrației pe domeniul ales, determinată cu metoda prelungirilor în stea, este prezentată în **Figura 4.5**.

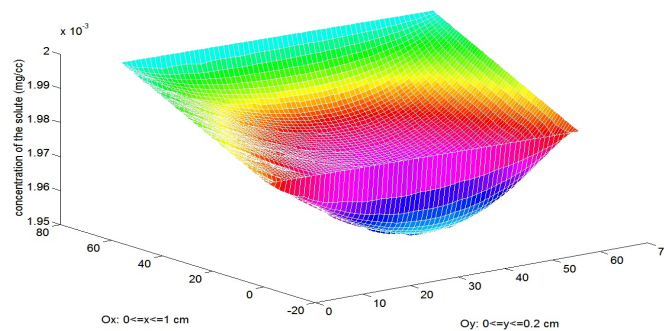


Figura 4.5: Concentrația calculată pe domeniul $[0;1] \times [0;0,2]$

4.5.2 Modelul transportului unui fluid printr-un domeniu cu frontiere neregulate

Domeniul din Figura 4.6 modelează un vas de sânge care are pe pereți depuneri sub forma unor inele toroidale.

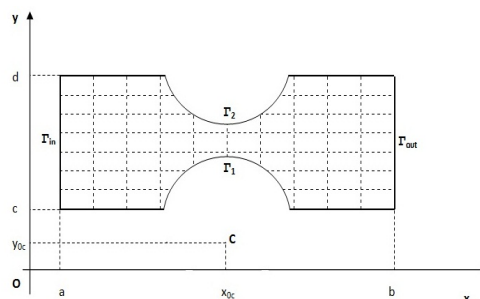


Figura 4.6: Modelul domeniului Ω

Ecuția care descrie procesul de difuzie printr-un vas de forma celui din Figura 4.6 este

$$\begin{cases} -D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - D_2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f, & (x, y) \in \Omega; \\ u = x^2 + y^2, & (x, y) \in \partial\Omega. \end{cases}$$

Coefficienții de difuzie folosiți în rezolvarea problemei au fost $D_1 = D_2 = 1$, iar $f = -4$, caz în care soluția exactă este $u_{ex} = x^2 + y^2$. Pentru domeniul Ω , $a = 0$, $b = 1$, $c = 0$, $d = 0, 2$, iar centrul cercului este $C(x_{0c}, y_{0c})$ cu $x_{0c} = 0, 5$, $y_{0c} = -0, 2$, $R = 0, 25$.

Discretizarea problemei s-a făcut prin metoda diferențelor finite de ordinul al doilea, în punctele din interiorul domeniului ecuația în formă discretizată fiind

$$-D_1 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h_x^2} - D_2 \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h_y^2} = f \quad (4.18)$$

sau

$$\begin{bmatrix} 0 & -\frac{D_2}{h_y^2} & 0 \\ -\frac{D_1}{h_x^2} & 2\left(\frac{D_1}{h_x^2} + \frac{D_2}{h_y^2}\right) & -\frac{D_1}{h_x^2} \\ 0 & -\frac{D_2}{h_y^2} & 0 \end{bmatrix} u_l(x_i, y_j) = f_l(x_i, y_j), (x_i, y_j) \in \Omega_l. \quad (4.19)$$

În cazul punctelor $(x_i, y_j) \in \Omega_l$ din vecinătatea frontierelor Γ_1 și Γ_2 s-a folosit pentru discretizare schema Shortley-Weller [34], [86]

$$2 \begin{bmatrix} 0 & -\frac{D_2}{h_N(h_N + h_S)} & 0 \\ -\frac{D_1}{h_V(h_E + h_V)} & \frac{D_1}{h_E h_V} + \frac{D_2}{h_E h_V} & -\frac{D_1}{h_E(h_E + h_V)} \\ 0 & -\frac{D_2}{h_S(h_N + h_S)} & 0 \end{bmatrix} u_l(x_i, y_j) = f_l(x_i, y_j).$$

Lucrând cu datele de mai sus, pentru soluția exactă aleasă, s-a aplicat metoda prelungirilor în stea, cu grila inițială pe nivelul $l_0 = 2$ și cu grila cea mai fină corespunzând nivelului $l = 5$, eroarea $u - u_{ex}$ pe domeniul Ω este prezentată în Figura 4.7.

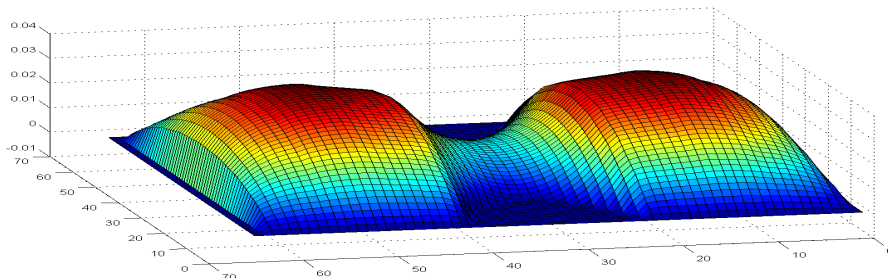


Figura 4.7: Eroarea pe grila cu $l = 5$ și $l_0 = 2$

Bibliografie

- [1] R. E. BANK, M. BENBOURENANE, *The Hierarchical Basis Multigrid Method for Convection-Diffusion Equations*, Numer. Math., 61 (1992): 7-37.
- [2] P. BASTIAN, G. WITTUM, *On Robust and Adaptive Multigrid Methods*, Multigrid Methods IV, Proceedings of the fourth European Multigrid Conference, Birkhäuser, ISNM International Series of Numerical Mathematics, 116, pp. 1-17, Amsterdam, 1994.
- [3] S. R. BHATTARAI, R. BAHADUR, S. ARYAL, N. BHATTARAI, S. Y. KIM, H. K. YI, P. H. HWANG, H. Y. KIM, *Hydrophobically Modified Chitosan/Gold Nanoparticles for DNA Delivery*, J. Nanopart. Res. 10 (2008): 151-162.
- [4] E.B. BECKER, G.F. CAREY, J.T. ODEN, *Finite Elements. An Introduction*, Texas Institute for Computational Mecanics, UT Austin, 1981.
- [5] S. BOCA, M. POTARA, F. TODERAŞ, O. STEPHAN, P. L. BALDECK, S. AŞTILEAN, *Uptake and Biological Effects of Chitosan-capped Gold Nanoparticles on Chinese Hamster Ovary Cells*, Materials Science and Engineering C31 (2011): 184-189.
- [6] D. BRAESS, *The Contraction Number of a Multigrid Method for Solving the Poisson Equation*, Numer. Math. 37 (1981): 387-404.
- [7] J. H. BRAMBLE, *Multigrid Methods*, Pitman Research Notes in Mathematics, V 294, John Wiley and Sons, 1993.
- [8] A. BRANDT, *Multi-level adaptive technique (MLAT) for fast numerical solution to boundary value problems*, Proceedings of the 3rd International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics, Lecture Notes in Physics, 18 (eds H. Cabannes and R. Temam), pp. 82-89, Springer, Berlin, 1973.
- [9] A. BRANDT, *Multi-level adaptive techniques (MLAT). I. The multigrid method*, Research Rep. RC 6026, IBM T.J. Watson Research Center, Yorktown Heights, NY, 1976.
- [10] A. BRANDT, *Multilevel Adaptive Solutions to Boundary Value Problems*, Mathematics of Computation, 31 (1977): 333-390.

- [11] A. BRANDT, *Multigrid Techniques: 1984 Guide with Applications to Fluid Dynamics*, GMD-Studien Nr. 85, Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung, St. Augustin, Bonn, 1984.
- [12] A. BRANDT, *Guide to Multigrid Development with Applications to Computational Fluid Dynamics*, Lecture Notes in Mathematics, Springer, 1984
- [13] W. L. BRIGGS, H. VAN EMDEN, S. MCCORMICK, *A Multigrid Tutorial, Second Edition*, SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- [14] W. L. BRIGGS, H. VAN EMDEN, S. MCCORMICK, *A Multigrid Tutorial, Second Edition, part II*, SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- [15] BORZI, A. *Introduction to Multigrid Methods*, Lecture Notes in Mathematics, Oxford University Computing Laboratory, 1994.
- [16] X. L. CAO, C. CHENG, Y. L. MA, C. S. ZHAO, *Preparation of Silver Nanoparticles with Antimicrobial Activities and the Researches of their Biocompatibilities*, J Mater Sci: Mater Med, 21 (2010): 2861-2868.
- [17] D. M. CAUSON, C. G. MINGHAM, *Introductory Finite Differences Method*, <http://www.cs.man.ac.uk/~fumie/tmp/introductory-finite-difference-methods-for-pdes.pdf>
- [18] T.F. CHAN, W. L. WAN, *Robust Multigrid Methods for Elliptic Linear Systems*, J. Comput. Appl. Math., 123 (2000): 323–352.
- [19] L. CHEN, J. XU, *An optimal streamline diffusion finite element method for a singular perturbed problems*, AMS Contemporary Mathematics Series: Recent Advances in Adaptive Computation, 383 (2005): 236–246.
- [20] I. CHIOREAN, T. CĂȚINAȘ, R. TRÎMBIȚAȘ, *Analiză numerică*, Presa Universitară Clujeană , Cluj Napoca, 2010.
- [21] G. COMAN, *Analiză numerică*, Libris, Cluj Napoca, 1995.
- [22] G. COMAN, I. CHIOREAN, T. CĂȚINAȘ, *Numerical Analysis- An Advanced Course*, Presa Universitară Clujeană, Cluj Napoca, 2007.
- [23] E. E. Connor, J. Mwamuka, A. Gole, C. J. Murphy, M.D. Wyatt, *Gold nanoparticles are taken up by human cells but do not cause acute cytotoxicity*, Small, 1, Issue 3 (2005): 325-7.
- [24] M. CRIȘAN, C. CATTANI, R. BADEA, P. MITREA, M. FLOREA, D. CRIȘAN, D. MITREA, R. BUCUR, G. CHECICHES, *Modelling Cutaneous Senescence Process*, D. Taniar et al. (Eds.): ICCSA 2010, Part II, LNCS 6017, 215–224, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 2010.
- [25] M. CRIȘAN, C. CATTANI, R. BADEA, R. COSGAREA, S. DUDEA, P. MITREA, M.LUȘOR, *Complex histological, genetical, ultrasonography and clinical studies in early noninvasive diagnosis of the photoinduced cutaneous senescence and in the photoinduced skin cancers, using computerized imaging, modern biotechnology and mathematical modelling methods*, Automat. Comp. Appl. Math., 18 (2009), No.2 : 231-255,

- [26] J.E. DENDRY JR., J.D. MOULTON, *Black Box Multigrid with a Coarsening Factor of Three*, Numerical Linear Algebra With Applications, 17 (2010): 577-598.
- [27] J. EBERHARD, G. WITTUM, *A Coarsening Multigrid Method for Flow in Heterogeneous Porous Media*, Multiscale Methods in Science and Engineering, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 44 (2005): 113-134.
- [28] H.C. ELMAN, D.J. SILVESTER, A.J. WATHEN, *Finite Elements and Fast Iterative Solvers*, Oxford University Press, Oxford, 2005.
- [29] H. C. ELMAN, A. RAMAGE, *Fourier Analysis of Multigrid for a Model Two-Dimensional Convection-Diffusion Equation*, <http://www.cs.umd.edu/~elman/papers/elman-ramage-mg.pdf>
- [30] R. P. FEDORENKO, *A relaxation method for solving elliptic difference equations*, USSR Comput. Math. Math. Phys. 1 (1962): 1092–1096.
- [31] R. P. FEDORENKO, *The speed of convergence of one iterative process*, USSR Comput. Math. Math. Phys., 4 (1964): 227–235.
- [32] L. FORMAGGIA, S. PEROTTO, P. ZUNINO, *An anisotropic a-posteriori error estimate for a convection-diffusion problem*, Comput. Visual. Sci., 4 (2001): 99–104.
- [33] M. M. GUPTA, J. ZHANG, *High Accuracy Multigrid Solution of the 3D convection-diffusion equation* Applied Mathematics and Computation, 113 (2000): 249-274.
- [34] W. HACKBUSH, *Multigrid Method and Applications*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1985.
- [35] W. HACKBUSH, *Elliptic Differential Equations*, Springer-Verlag, New York, 1992.
- [36] P. HANSBO, *The characteristic streamline diffusion method for the time-dependent incompressible Navier–Stokes equations*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 99 (1992): 171–186.
- [37] S. H. HSU, Y. B. CHANG, C. L. TSAI, K. Y. FU, S. H. WANG, H. J. TSENG, *Characterization and Biocompatibility of Chitosan Nanocomposites*, Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 85 (2011): 198-206.
- [38] T. HUGHES, A. BROOKS, *A multidimensional upwind scheme with no crosswind diffusion*, Finite element methods for convection dominated flows, ASME, New York, 1979.
- [39] C. JOHNSON, U. NAVERT, *An analysis of some finite element methods for advection–diffusion problems*, Analytical and Numerical Approaches to Asymptotic Problems in Analysis, North-Holland Publ., Amsterdam, 1981.
- [40] C. JOHNSON, *Finite element methods for convection–diffusion problems*, Computing Methods in Engineering and Applied Sciences, North-Holland Publ., Amsterdam, 1981.

- [41] C. JOHNSON, *The characteristic streamline diffusion finite element method*, Math. Appl. Comput. 10 (1991): 229–242.
- [42] M. KARALASHVILI, S. GROSS, W. MARQUARDT, A. MHAMDI, A. REUSKEN, *Identification of transport coefficient models in convection-diffusion equations*, SIAM Journal on Scientific Computing, vol. 33, no. 1(2011): 303-327.
- [43] U. LANGER, D. PUSCH, *Convergence Analysis of Geometrical Multigrid Methods for Solving Data Sparse Boundary Element Equations*, Comput. Visual Sci., 11 (2008): 181-189.
- [44] R. W. LEWIS, P. NITHIARASU, K. N. SEETHARAMU, *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2004.
- [45] J. MANDEL, M. BREZINA, P. VANEK, *Energy Optimization of Algebraic Multigrid Bases*, Computing 62 (1999): 205-228, Springer-Verlag.
- [46] S. MCCORMICK, *Multigrid Methods*, SIAM, Philadelphia, Pennsylvania, 1987.
- [47] U. MEYER YANG, *On long- Range Interpolation Operators for Aggressive Coarsening*, Numerical Linear Algebra With Applications 17 (2010): 453-472.
- [48] W. F. MITCHELL, *The hp-multigrid method applied to hp-adaptive refinement of triangular grids* Numer. Linear Algebra Appl. 17 (2010): 211–228.
- [49] D. MORIN, *Fourier analysis*, <http://www.people.fas.harvard.edu/~djmorin/waves/Fourier.pdf>
- [50] K.W. MORTON, D.F. MAYERS, *Numerical Solution of Partial Differential Equations, An Introduction*, Cambridge University Press, 2005.
- [51] A.C. MUREȘAN, Y. NOTAY, *Analysis of aggregation-based multigrid*, SIAM Journal on Scientific Computing, 30 (2008): 1082–1103.
- [52] A. NAPOV, Y. NOTAY, *When does two-grid optimality carry over to the V-cycle?* Numerical Linear Algebra With Applications, 17 (2010): 273-290.
- [53] A. NAPOV, Y. NOTAY, *Smoothing factor, order of prolongation and actual multigrid convergence*, Numer. Math. 118 (2011): 457–483.
- [54] C. R. NĂSTASE, D. J. MAVRIPLIS *Discontinuous Galerkin Methods Using an hp-Multigrid Solver for Inviscid Compressible Flows on Three-dimensional Unstructured Meshes*, 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, January 9–12, 2006, Reno, NV.
- [55] D. NEUMANN, *Modeling Transdermal Absorption*, Biotechnology: Pharmaceutical Aspects, Vol. VII, Springer NY, 2008.
- [56] G. NUȚ, *A Prolongation Technique for Solving Partial Differential Equations with a Multigrid Method*, Proceedings of Modelling and Development of Intelligent Systems Conference, Lucian Blaga University Press, pp. 105-115, Sibiu, 2011.

- [57] G. NUȚ, I. CHIOREAN, M. CRIȘAN, *The Finite Element Method Applied to a Problem of Blood Flow in Vessels*, Computational Mathematical Methods in Medicine, doi:10.1155/2012/204926, 2012.
- [58] G. NUȚ, I. CHIOREAN, P. BLAGA, *Convergence and Error of Some Numerical Methods for Solving a Convection-Diffusion Problem*, Applied Mathematics, Vol. 4 No. 5A (2013): 72-79. doi: 10.4236/am.2013.45A009.
- [59] G. NUȚ, *A Two-dimensional Convergence and Error Study for the Time Dependent Convection-diffusion Equation*, Proceedings of 13th International Conference Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, Vol. IV, pp. 1097-1108, Almeria, Spain, 2013.
- [60] G. NUȚ, *Mathematical Modelling of the Skin Penetration by Nanoparticles Carried Drugs*, Annals of the Tiberiu Popoviciu Seminar of Functional Equations, Approximation and Convexity, 11 (2013): 97-111.
- [61] G. NUȚ, I. CHIOREAN, *The Frequency Spectrum for the Local Fourier Analysis of Multigrid Method in the One-dimensional Case*, Proceedings of the "European Integration- Between Tradition and Modernity"- Conference, Târgu Mureș, 2013 (to appear).
- [62] M. OLSHANSKII, A. REUSKEN, *On Robust Multigrid Method for Convection-Diffusion Finite Element Problems*, http://www.mathcs.emory.edu/~molshan/ftp/pub/proceed_cd.pdf
- [63] M. OLSHANSKII, A. REUSKEN, *Convergence Analysis of a Multigrid method for a Convection- dominated Model Problem*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Volume 42 Issue 3 (2004): 1261-1291.
- [64] B. OSGOOD, *The Fourier Transform and its Applications*, <http://see.stanford.edu/materials/lsoftaee261/book-fall-07.pdf>
- [65] A. PARDHANANI, W. SPOTZ, G. F. CAREY, *A Stable Multigrid Strategy for Convection-Diffusion Using High Order Compact Discretization*, Electronic Transactions on Numerical Analysis, 6 (1997): 211-223.
- [66] T. M. PERTMER, M. D. EISENBRAUN, D. MCCABE, S. K. PRAYAGA, J. R. HAYNES, *Gene gun-based nucleic acid immunization: elicitation of humoral and cytotoxic T lymphocyte responses following epidermal delivery of nanogram quantities of DNA*, Vaccine 13 (2004): 1427-1430.
- [67] C. PFLAUM, *A Multigrid Conjugate Gradient Method*, Applied Numerical Mathematics, 58 (2008): 1803-1817.
- [68] B. PHIPPS, M. CORMIER, B. GALE, W. W. VAN OSDOL, *Transdermal drug delivery*, Encyclopedia of Biomaterials and Biomedical Engineering, 2004.
- [69] R. O. POTTS, M. L. FRANCOEUR, *The influence of stratum-corneum morphology on water permeability*, J. Invest. Dermatol. 96 (1991): 495-499.

- [70] L. QIAN, X. FENG, Y. HE, *The characteristic finite difference streamline diffusion method for convection-dominated diffusion problems*, Applied Mathematical Modelling 36 (2012): 561–572.
- [71] B. AL-QALLAF, D. BHUSAN DAS, D. MORI, Z. CUI, *Modelling Transdermal Delivery of High Molecular Weight Drugs from Microneedle Systems*, Phil. Trans. R. Soc. A, 365 (2007): 2951-2967.
- [72] A. RAMAGE, H. C. ELMAN, *Some observations on multigrid convergence for convection–diffusion equations*, Comput. Visual Sci., 10 (2007): 43–56.
- [73] A. REUSKEN, *Convergence Analysis of a Multigrid Method for Convection-Diffusion Equations*, Numerische Mathematik, Vol.91, Issue 2 (2002): 323-349.
- [74] J. E. RIM, P. M. PINSKY, W. W. v. OSDOL, *Multiscale Modeling Framework of Transdermal Drug Delivery*, Annals of Biomedical Engineering, Vol. 37, No. 6 (2009): 1217-1229.
- [75] W. RUGE, K. STÜBEN, *Algebraic Multigrid*. In *Multigrid Method, Frontiers in Applied Mathematics*, SIAM, Philadelphia, 1987.
- [76] M. SALA, R.S. TUMINARO, *A new Petrov–Galerkin smoothed aggregation preconditioner for nonsymmetric linear systems*, SIAM Journal on Scientific Computing 31 (2008): 143–166.
- [77] B. SEIBOLD, *Performance of Algebraic Multigrid Methods for Non-symmetric Matrices Arising in Particle Methods*, Numer. Linear Algebra Appl., 17 (2010): 433-451.
- [78] Y. SHAPIRA, *Matrix –Based Multigrid: Theory and Applications*, Second Edition, Springer, 2008.
- [79] M. STOLNITZ, A. N. BASHKATOV, E. A. GENINA, V. TUCHIN, *Mathematical modeling of clearing liquid penetration into the skin*, Saratov Fall Meeting 2006: Optical Technologies in Biophysics and Medicine, Vol. 6535 (2007): 653520.
- [80] K. STÜBEN, U. TROTTEBERG, *Multigrid Methods: Fundamental Algorithms, Model Problem Analysis and Applications*, GMD-Studien, 1989.
- [81] K. STÜBEN, *An introduction to algebraic multigrid*, GMD Report 70, Fraunhofer SCAI, Sankt Augustin, Germany, 1999.
- [82] M. STYNES, *Convection-diffusion problems, SDFEM/SUPG and a priori meshes*, *International Journal of Computing Science and Mathematics* 1, Issue 2-4 (2007): 412-431.
- [83] A. THEKALE, T. GRADL, K. KLAMROTH, U. RUDE, *Optimizing the Number of Multigrid Cycles in the Full Multigrid Algorithm*, Numerical Linear Algebra With Applications, 17(2010): 199-210.
- [84] D. TRIF, *Ecuații cu derivate parțiale*, UBB, Cluj, 1993.

- [85] D. TRIF, *Metode numerice pentru ecuații diferențiale și sisteme dinamice*, Transilvania Press, Cluj, 1997.
- [86] U. TROTTEBERG, C. OOSTERLEE, A. SCHULLER, *Multigrid*, Elsevier Academic Press, London, 2001.
- [87] R. S. VARGA, *Matrix Iterative Analysis*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2000.
- [88] D. VASILEVA, *Numerical Analysis and Its Applications on an Adaptive Semirefinement Multigrid Algorithm for Convection-Diffusion Problems*, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 2009.
- [89] P. WESSELING, *An Introduction to Multigrid Method*, John Wiley & Sons, New York, 1991.
- [90] R. WIENANDS, W. JOPPICH, *Practical Fourier Analysis for multigrid methods*, Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, Florida, 2005.
- [91] D. V. M. YI-LO LIN, J. C. JEN, S.H. HSU, I.M. CHIU, *Sciatic Nerve Repair by Microgrooved Nerve Conduits Made of Chitosan-Gold Nanocomposites*, *Surgical Neurology*, 70, S1 (2008): 9-18.
- [92] G. YONGBIN, *Multigrid method and fourth-order compact difference discretization scheme with unequal meshsizes for 3D poisson equation* *Journal of Computational Physics*, 229 (2010): 6381-6391.
- [93] J. ZHANG, *Multigrid Method and Fourth Order Compact Difference Scheme for 2D Poisson Equation with Unequal Meshsize Discretization*, *Journal of Computational Physics*, 179 (2002): 170-179.