

SēMA
BOLETÍN NÚMERO 39
Junio 2007

sumario

Editorial	5
Artículos	7
<i>Métodos de cálculo del vector PageRank</i> , por F. Pedroche	7
<i>A survey on mathematical aspects of lubrication problems</i> , por G. Bayada, C. Vázquez	31
<i>Modelado y simulación numérica de la hidrodinámica marina en zonas costeras</i> , por J. Blasco	75
<i>Numerical Micromagnetics: a review</i> , por C.J. García-Cervera	103
Matemáticas e Industria	137
<i>Topología Molecular</i> , por J.M. Amigó, A. Falcó, J. Gálvez, V. Villar	137
Resúmenes de libros	153
Noticias de SēMA	155
Anuncios	157

Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada SĒMA

Grupo Editor

P. Pedregal Tercero (U. Cast.-La Mancha) E. Fernández Cara (U. de Sevilla)
E. Aranda Ortega (U. Cast.-La Mancha) A. Bueno Orovio (U. Cast.-La Mancha)
J.C. Bellido Guerrero (U. Cast.-La Mancha) A. Donoso Bellón (U. Cast.-La Mancha)

Comité Científico

E. Fernández Cara (U. de Sevilla) A. Bermúdez de Castro (U. de Santiago)
E. Casas Rentería (U. de Cantabria) J.L. Cruz Soto (U. de Córdoba)
P. Pedregal Tercero (U. Cast.-La Mancha) J.M. Mazón Ruiz (U. de Valencia)
I. Peral Alonso (U. Aut. de Madrid) J.L. Vázquez Suárez (U. Aut. de Madrid)
L. Vega González (U. del País Vasco) E. Zuazua Iriondo (U. Aut. de Madrid)

Responsables de secciones

Artículos: E. Fernández Cara (U. de Sevilla)
Matemáticas e Industria: M. Lezaun Iturralde (U. del País Vasco)
Educación Matemática: R. Rodríguez del Río (U. Comp. de Madrid)
Historia Matemática: J.M. Vegas Montaner (U. Comp. de Madrid)
Resúmenes: F.J. Sayas González (U. de Zaragoza)
Noticias de SĒMA: C.M. Castro Barbero (Secretario de SĒMA)
Anuncios: Ó. López Pouso (U. de Santiago de Compostela)

Página web de SĒMA

<http://www.sema.org.es/>

e-mail

info@sema.org.es

Dirección Editorial: Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla - La Mancha. Avda. de Camilo José Cela s/n. 13071. Ciudad Real. boletin.sema@uclm.es

ISSN 1575-9822.

Depósito Legal: AS-1442-2002.

Imprime: Gráficas Lope. C/ Laguna Grande, parc. 79, Políg. El Montalvo II 37008. Salamanca.

Diseño de portada: Alfonso Bueno

Ilustración de portada: Superficies mínimas

Consejo Ejecutivo de la Sociedad Española de Matemática Aplicada
SĕMA

Presidente

Carlos Vázquez Cendón

Vicepresidente

Mikel Lezaun Iturralde

Secretario

Carlos Manuel Castro Barbero

Vocales

Rafael Bru García
Jose Antonio Carrillo de la Plata
Rosa María Donat Beneito
Inmaculada Higuera Sanz
Carlos Parés Madroñal
Pablo Pedregal Tercero
Enrique Zuazua Iriondo

Estimados socios:

En este nuevo número del Boletín encontraréis cuatro interesantes artículos de F. Pedroche, G. Bayada y C. Vázquez Cendón, J. Blasco y C.J. García-Cervera. También encontraréis un trabajo de J.M. Amigó y otros, relativo a la Topología Molecular, en la sección dedicada a *Matemáticas e Industria*. Todo ello acompañado de las secciones habituales de *Resúmenes de libros*, *Noticias* y *Anuncios*.

Esperamos que disfrutéis del contenido. Recibid un cordial saludo,

Grupo Editor
boletin.sema@uclm.es

MÉTODOS DE CÁLCULO DEL VECTOR PAGERANK

FRANCISCO PEDROCHE

Institut de Matemàtica Multidisciplinar
Universitat Politècnica de València.

pedroche@imm.upv.es

Resumen

Los algoritmos de búsqueda de información en internet, como el *PageRank* de Google, constituyen un ejemplo excelente de aplicación de las herramientas básicas del análisis matricial, las cadenas de Markov y el álgebra lineal numérica. En este trabajo se ilustran los métodos de solución que se usan para el cálculo del vector PageRank: el método de la potencia y sus derivados (extrapolación, adaptativo, Arnoldi y BlockRank), y los basados en la resolución de un sistema lineal por métodos iterativos (Jacobi, Gauss-Seidel, Schwarz aditivo, métodos de subespacios de Krylov).

Palabras clave: Motores de búsqueda, PageRank, procesos de Markov, matrices no negativas, sistemas lineales, métodos iterativos, cálculo científico

Clasificación por materias AMS: 15A06 65C40 65F10 65F15 65F50

1 Introducción

En mayo de 2005, una consulta en internet usando el motor de búsqueda Google¹ informaba de que se estaba realizando la petición sobre un total de 8,085 millones de páginas. Otra búsqueda, esta vez realizada el 26 de octubre de 2006, permite estimar que, al menos, hay unos 24,640 millones de páginas web indexadas² por Google. Estos datos dan una idea del tamaño y la velocidad de crecimiento de internet. Si a esto unimos las posibilidades de negocio mediante anuncios publicitarios³ que el mismo Google promueve [79], tenemos

Fecha de recepción: 28/11/05

Trabajo subvencionado por los proyectos DGI número MTM2004-02998 y DGI número MTM2007-64477.

¹Una idea de la popularidad de este tipo de búsquedas es que el verbo *to google* fue añadido oficialmente al *Oxford English Dictionary*, en junio de 2006, con el significado de *usar el buscador Google para obtener información en internet*.

²Estimación hecha a partir de la petición "+el**" OR "+the**" OR "+le**" OR "+der**" OR "+o**" OR "+i**". El signo más obliga a buscar el artículo *el, the, etc.* y los asteriscos son dos palabras cualesquiera; v. [53] para más trucos de Google.

³Los beneficios por publicidad en internet, en EEUU, han crecido un 36% en el primer semestre de 2006 [78].

que es fundamental disponer de un sistema de clasificación de páginas rápido y fiable, para poner orden en toda esta maraña de datos que ha ido creciendo vertiginosamente; para un análisis sobre la estructura de la World Wide Web, véanse, por ejemplo, [22], [44], [55], [59], [66].

El *PageRank* [57], el método inicial de cálculo que usaron los fundadores de Google⁴ para clasificar las páginas web según su importancia, es objeto de constantes mejoras. La finalidad del método es la obtención de un vector, también llamado PageRank, que da la importancia relativa de las páginas⁵. Dado que el vector PageRank se calcula en función de la estructura de las conexiones de la web (v. [24] en un número anterior del Boletín de SEMA) se dice que es independiente de la petición de la persona que realiza la búsqueda. Algunas modificaciones del PageRank para hacer intervenir la petición se han propuesto en [33], [36], [60]. También hay modificaciones del PageRank que incorporan la utilización del botón de página anterior [70].

Desde el punto de vista de la persona que administra una página web se ha mostrado que la técnica para obtener un PageRank óptimo consiste en incluir enlaces a páginas importantes de nuestra misma comunidad web, mientras que los enlaces irrelevantes nos penalizan a nosotros y a toda nuestra comunidad [3]. Un análisis del algoritmo PageRank así como diversas propiedades se puede encontrar, por ejemplo, en [8], [10] [18], [23], [24], [37], [38], [47], [51], [71].

En este trabajo nos centraremos en los nuevos métodos de cálculo del vector PageRank haciendo especial hincapié en aquellos conceptos del álgebra⁶ lineal que intervienen en los modelos. Estos modelos se basan, por una parte, en desarrollar técnicas para acelerar el método clásico de la potencia (que había caído en el abandono y prácticamente casi ni se usaba) y, por otra, en usar una formulación con un sistema de ecuaciones lineales y aplicar entonces un esquema iterativo. El cálculo práctico, atendiendo a las estructuras de computación utilizadas, puede ser centralizado (utilizando un procesador) o en paralelo (usando múltiples procesadores).

El resto del trabajo se estructura de la manera siguiente. En la sección 2 se introduce el concepto de vector clasificador de páginas PageRank y en la sección 3 se revisa el modelo de Brin y Page para su cálculo. En la sección 4 se resumen los métodos de solución basados en el método de la potencia. En la sección 5 se resumen las características de los métodos basados en la escritura de un sistema de ecuaciones lineales. Finalmente, se dan unas conclusiones del trabajo.

⁴Véase [76] para conocer detalles sobre los inicios de la compañía Google Inc.

⁵Las personas registradas en Google pueden instalarse el indicador de PageRank (PR) incluido en la *Google Toolbar*. Con esto se puede conocer el PR, en una escala de 0 a 10, de las páginas que visitemos. Por ejemplo, un diario estatal tiene un PR en torno a 8, mientras que la página de una universidad tiene un PR alrededor de 5.

⁶El uso actual de la palabra *álgebra* proviene del título del libro *Kitab al-jabr wa l-muqabala*, (Libro de la reducción y la comparación) escrito en el siglo IX por Mohammed Ibn Musa al-Khwarizmi [65], [80]; las palabras *guarismo* y *algoritmo* derivan de su nombre [4].

2 El vector PageRank de Google

Una de las características del PageRank es que si uno navega aleatoriamente por internet y está un tiempo suficientemente grande paseando, entonces tendrá una gran probabilidad de encontrar las páginas con mayor PageRank. Para centrar ideas, consideremos un conjunto de cuatro páginas web como en la figura 1. Vemos que desde la página 1 podemos tomar un enlace a las páginas 2 ó 3. También se ve que desde las páginas 2 ó 4 se pueden acceder al resto de páginas.

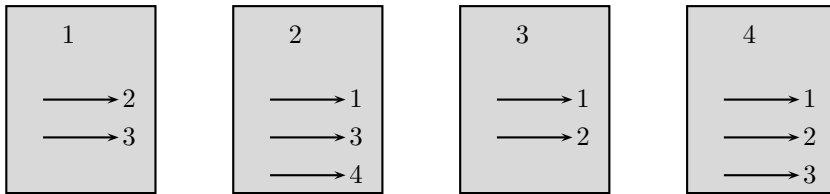


Figura 1: Una web con cuatro páginas mostrando sus enlaces salientes.

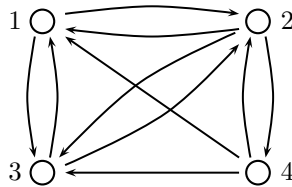


Figura 2: Grafo dirigido correspondiente a la web de la figura 1.

Esta estructura de enlaces entre las páginas se puede representar mediante un grafo dirigido, como el de la figura 2. Dado un conjunto de n páginas web definimos su matriz de conectividad G como la matriz cuadrada de orden n cuyos elementos, denominados g_{ij} , $1 \leq i, j \leq n$, valen 1 si hay enlace de la página j a la página i , con $i \neq j$, y 0 en otro caso. La matriz de conectividad correspondiente al grafo de la figura 2 viene dada entonces por:

$$G = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Imaginemos que tenemos una persona (un o una surfista) que va saltando de manera aleatoria de unas páginas a otras. Queremos construir una matriz de transición P , cuyos elementos den las probabilidades condicionadas de salto. Para ello, vamos a asumir que, cuando se encuentra en una página, *tiene la misma probabilidad de elegir cualquier enlace saliente*. Esta elección es la base del modelo de Brin y Page. En nuestro ejemplo (figura 1), si el surfista está en la página 2 entonces tiene una probabilidad de $1/3$ de ir a cualquiera de las páginas 1, 3 ó 4. Aplicando este razonamiento a las cuatro páginas obtenemos

que la matriz de transición P del surfista aleatorio es en este caso:

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1/3 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 0 & 1/3 \\ 0 & 1/3 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Desde el punto de vista del cálculo es muy fácil obtener la matriz P a partir de la matriz G : basta dividir cada columna de G por la suma de los elementos de G en dicha columna, siempre que esta cantidad no sea cero, es decir, siempre que esta columna no corresponda a una página sin salida. Para formalizar este hecho, definamos el número de enlaces salientes (*out-degree*) de una página j como: $c_j = \sum_{i=1}^n g_{ij}$, $1 \leq j \leq n$. Ahora ya podemos construir la matriz P asociada a la estructura del conjunto de páginas web de acuerdo con nuestra hipótesis de probabilidad de saltos. Ha de ser $P = (p_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, tal que:

$$p_{ij} = \begin{cases} g_{ij}/c_j & \text{si } c_j \neq 0. \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad 1 \leq i, j \leq n. \quad (3)$$

Es obvio que si $c_j \neq 0$, para todo j , entonces P es una matriz *estocástica por columnas*, es decir, la suma de cada columna vale 1 y cada elemento toma un valor entre 0 y 1. Como ejemplo, la matriz P dada por la ecuación (2) es estocástica. Además, esta matriz tiene otras propiedades matemáticas interesantes: su espectro (conjunto de valores propios) es: $\sigma(P) = \{1, -1/2, -1/3, -1/6\}$. Su radio espectral⁷ es $\rho(P) = 1$, y la matriz P es irreducible⁸ y primitiva⁹. Estas propiedades son importantes ya que el vector PageRank [57] es el vector límite de distribución de probabilidad de una *cadena de Markov ergódica*: el vector de estado límite¹⁰ existe, coincide con el *vector de estado estacionario* (un vector de probabilidad asociado al valor propio 1) y es independiente del vector de estado inicial. Esta propiedad del vector de estado límite se verifica, en particular, para matrices estocásticas y primitivas: $P \geq 0$, P irreducible y P sólo tiene un valor propio ($\lambda = 1$) de módulo el radio espectral $\rho(P) = 1$.

En este ejemplo, el vector de estado estacionario (que coincide con el de estado límite) resulta: $v_{est}^T = [2/7 \ 9/28 \ 2/7 \ 3/28] \approx [0,29 \ 0,32 \ 0,29 \ 0,10]$, y es el vector PageRank de las cuatro páginas. La interpretación es la siguiente: si un surfista aleatorio se mueve por un conjunto de cuatro páginas enlazadas como en la figura 2, entonces, para un tiempo suficientemente prolongado, lo más probable es encontrarlo en la página 2 (con

⁷Se define el *radio espectral* de una matriz cuadrada como el valor máximo, en valor absoluto, de sus valores propios.

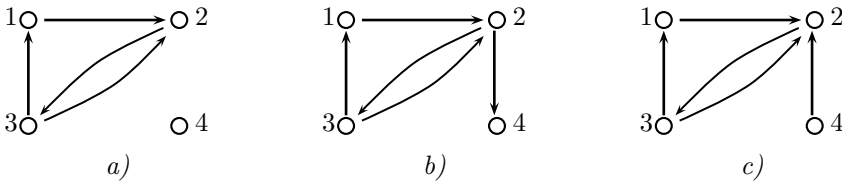
⁸Una matriz A es *irreducible*, si, y solamente si, su grafo es *fuertemente conexo*: para cada pareja de nodos (i, j) con $i \neq j$, se puede ir de i a j a través de una sucesión de arcos orientados. En otro caso, se dice que es *reducible*.

⁹Una matriz cuadrada A se dice que es *primitiva* si es irreducible, no negativa, y con $\rho(A)$ estrictamente mayor que cualquier otro valor propio.

¹⁰Dado un vector de probabilidad v_0 y una matriz estocástica P , el *vector de estado límite* es, si existe, $v_\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} P^k v_0$.

una probabilidad de 0,32), mientras que la probabilidad de encontrarlo en las páginas 1 ó 3 es de 0,29. Dicho de otra forma, el surfista emplea un 32% de su tiempo visitando la página 2. Nótese que las páginas 1, 2 y 3 son citadas por el mismo número de páginas. Lo único que las diferencia es que la página 2 tiene un enlace a la página 4 que revierte posteriormente en un aumento de la probabilidad de la página 2. En este ejemplo la matriz P es primitiva, pero hay casos en los que la estructura de enlaces entre las páginas no conduce a una matriz estocástica y primitiva, como vemos en el siguiente ejemplo. En la sección 3 analizamos cómo conseguir que la matriz P sea estocástica y primitiva.

Ejemplo 1 *Los grafos dirigidos siguientes:*



tienen asociadas las matrices P , según la ecuación (3):

$$a) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0,5 & 0 \\ 1 & 0 & 0,5 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad b) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0,5 & 0 \\ 1 & 0 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad c) \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0,5 & 0 \\ 1 & 0 & 0,5 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

La situación a) no la vamos a permitir, ya que si una página no tiene enlaces entrantes ni salientes no pertenece al conjunto de n páginas en el cual definimos las matrices G y P . La situación b) ilustra el concepto de nodo sin salida (dangling node): el nodo correspondiente a la página 4 no tiene enlaces salientes y por ello $c_4 = 0$ y la matriz P asociada no es estocástica. Solo la matriz asociada al grafo c) es una matriz estocástica. Las tres matrices son reducibles, ya que no todos los nodos son accesibles cuando se parte de un nodo arbitrario. Por tanto, ninguna de ellas es primitiva y no nos sirven para el modelo del surfista aleatorio tal como lo tenemos definido hasta ahora.

3 Modelo de Brin y Page

3.1 Sin contemplar nodos *dangling*

El modelo inicial para el cálculo del vector PageRank se basaba en calcular el vector estacionario de la matriz P de orden n , definida por (3), siempre que esta matriz fuera estocástica y primitiva. En este modelo no se contemplan los nodos sin salida¹¹ con lo cual c_j es no nulo para todo j y, en consecuencia, P es estocástica. Sin embargo, Brin y Page se dieron cuenta que la estructura de

¹¹Nos referimos a los *dangling nodes*, nodos sueltos o colgados. Brin y Page dicen que los tenían en cuenta al final de los cálculos, pero no dejan muy claro como lo hacían.

la web daba lugar a que P no fuera primitiva e introdujeron un nuevo modelo basado en una matriz estocástica P' que podemos escribir en la forma:

$$P' = \alpha P + (1 - \alpha)ve^T, \quad (4)$$

donde $0 < \alpha < 1$, $e^T \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ es el vector de unos: $e^T = [1 \ 1 \ \dots \ 1 \ 1]$, y $v \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ es el llamado vector de personalización o de teleportación (*personalization vector*, véase [1], [33]) y es un vector de distribución de probabilidad que se suele tomar como $v = \frac{1}{n}e$. El producto ve^T es una matriz de orden n . El parámetro α se denomina de amortiguamiento (*damping*) y se suele tomar $\alpha = 0,85$, ya que fue el que usaron originalmente Brin y Page [57]. Diversos trabajos actuales se centran en la influencia de α [6], [11], [12]. Se dice que en la ecuación (4), la matriz P' es una combinación lineal convexa de las matrices P y ve^T .

El término $(1 - \alpha)ve^T$, con v un vector de distribución de probabilidad positivo, da lugar a que todos los elementos de P' sean no nulos, con lo cual, P' es irreducible; véase en [51] otra forma de forzar la irreducibilidad. El efecto estadístico de este término es introducir saltos aleatorios que no dependen de las propiedades de enlace de la página. Valores de α próximos a uno ofrecen comportamientos más realistas pero pueden arruinar la irreducibilidad (en el límite $\alpha=1$) y aumentar el número de iteraciones del método de la potencia [47]. Nótese que $\alpha=1$ correspondería a usar la matriz de conectividad real de la web.

Por otra parte, es conocido [9], que una matriz irreducible y no negativa con algún elemento diagonal no nulo es primitiva. En consecuencia, si no hay nodos sin salida, la matriz P' es estocástica y primitiva, que es lo que se desea. Sin embargo, en internet hay páginas sin enlaces salientes y se han de incorporar al modelo; en la sección siguiente vemos una solución.

3.2 Modelo contemplando nodos sin salida

Cuando hay nodos que no tienen enlaces salientes hemos visto que en las columnas respectivas se tiene que $c_j = 0$ y estas columnas están llenas de ceros. En consecuencia P no será estocástica ni tampoco lo será P' (para ilustrar este hecho, úsese la matriz b) del ejemplo 1 con $\alpha = 0,85$ y $v = [1, 0, 0, 0]^T$). Se define entonces la nueva matriz [8], [20], [42], [47], [50], [51]:

$$\bar{P} = \alpha[P + vd^T] + (1 - \alpha)ve^T, \quad (5)$$

donde v y e son los mismos que en el modelo anterior (aunque este nuevo vector de personalización podría tomarse diferente) y el vector $d \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ se define como: $d_i = 1$, si $c_i = 0$, y $d_i = 0$ en otro caso. De esta forma, la matriz \bar{P} , que generalmente se denomina *matriz Google*, es estocástica aunque haya nodos sin salida. La matriz vd^T actúa sobre las columnas pertenecientes a nodos sin salida, asignándoles una probabilidad de salto no nula. Por eso se dice que el modelo PageRank es un *modelo de paseo y salto*. La matriz \bar{P} tiene la desventaja de ser una matriz densa y enorme, pero, como veremos en la sección siguiente, no hará falta calcularla explícitamente.

4 Métodos basados en el método de la potencia

Hemos indicado que el vector PageRank, es decir, el vector estacionario de la cadena de Markov ergódica definida por \bar{P} , es el vector de distribución de probabilidad x que verifica el problema de valores y vectores propios:

$$\bar{P}x = x. \quad (6)$$

Desde que Brin y Page [57] anunciaron la aplicación del método de la potencia (*power method*) [77] para el cálculo del vector PageRank, diversos investigadores se pusieron a trabajar en formas de mejorar el funcionamiento del mismo [2], [10], [32], [33], [41], [64]. En las secciones siguientes presentamos el método de la potencia y diversas modificaciones del mismo.

4.1 El método de la potencia

En el cuadro 1 se muestra el algoritmo del método de la potencia para el cálculo de x que resuelve (6). Se ha usado la *norma uno*, $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$. Nótese que para un vector de probabilidad se tiene $\|x\|_1 = 1$, y las matrices estocásticas por columnas conservan esta norma, es decir $\|\bar{P}x\|_1 = \|x\|_1$. Para el criterio de parada, dado por la tolerancia ϵ , se ha usado también esta norma [13], [25]. Según el cuadro 1 una iteración del método de la potencia requiere el cálculo del producto matriz-vector Px^k . En general esto requiere del orden de n^2 operaciones, es decir, $O(n^2)$. Sin embargo, la matriz P es casi vacía. Algunos autores han indicado que el número medio de enlaces salientes por página es del orden de 7 [43] u 8 [35]. Es decir, cada columna de P solo tiene 7 u 8 elementos no nulos. Como consecuencia, el producto Px^k es del orden de $O(n)$ operaciones, es decir unos 25,000 millones de operaciones. Es importante destacar que este algoritmo no necesita construir explícitamente la matriz \bar{P} para resolver (6). Para aclarar este punto notemos primero que dado que P no es en general estocástica, porque tiene *dangling nodes*, se tiene que:

$$\|Px^0\|_1 = \|x^0\|_1 - d^T x^0. \quad (7)$$

Usando esta ecuación, el parámetro que hemos llamado γ en el algoritmo del cuadro 1 resulta ser, para $k = 0$:

$$\gamma = \|x^0\|_1 - \|x^1\|_1 = \|x^0\|_1 - \|\alpha Px^0\|_1 = (1 - \alpha) + \alpha d^T x^0,$$

donde hemos usado que $\|x^0\|_1 = 1$. De la anterior expresión se tiene que el producto γv vale: $\gamma v = (1 - \alpha)v + \alpha d^T x^0 v$ y como $d^T x^0$ es un escalar esto es lo mismo que: $\gamma v = (1 - \alpha)v + \alpha v d^T x^0$, con lo cual, la tercera línea del bucle del algoritmo del cuadro 1 resulta:

$$x^1 = \alpha Px^0 + (1 - \alpha)v + \alpha v d^T x^0 = \alpha [P + v d^T] x^0 + (1 - \alpha)v,$$

y como $e^T x^0 = 1$, podemos introducir este producto en el segundo término, quedando finalmente:

$$x^1 = \alpha [P + v d^T] x^0 + (1 - \alpha) v e^T x^0,$$

Inicialización:	$x^0 = e/n, \quad k = 0$
repeat	$x^{k+1} = \alpha P x^k$ $\gamma = \ x^k\ _1 - \ x^{k+1}\ _1$ $x^{k+1} = x^{k+1} + \gamma v$ $\delta = \ x^{k+1} - x^k\ _1$ $k = k + 1$
until	$\delta < \epsilon$

Cuadro 1: Algoritmo 1. Método de la potencia.

y si comparamos con la ecuación (6) esto es, precisamente: $x^1 = \bar{P}x^0$. Con lo cual ya se ve que el algoritmo del cuadro 1 realiza las iteraciones del método de la potencia $x^{k+1} = \bar{P}x^k$ sin necesidad de construir explícitamente la matriz densa \bar{P} . Esto es muy importante ya que supone un ahorro tanto en tiempo de computación como de memoria para almacenar los cálculos. Y estos son dos de los factores críticos en cálculo científico.

Con respecto a la velocidad de convergencia del método de la potencia es conocido [69], [77] que viene determinado por el cociente entre los dos primeros valores propios (en módulo) de \bar{P} . En [47] se muestra que si $\bar{P} = P + vd^T$, tiene el espectro $\{1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n\}$ entonces el espectro de \bar{P} , dada por (5), es $\{1, \alpha\lambda_2, \alpha\lambda_3, \dots, \alpha\lambda_n\}$. Como consecuencia, la velocidad de convergencia viene dada por $\frac{|\lambda_1(\bar{P})|}{|\lambda_2(\bar{P})|} = \frac{1}{\alpha|\lambda_2(P)|}$. Como \bar{P} es estocástica se tiene $|\lambda_2(\bar{P})| \leq 1$ y esto junto al hecho que $\alpha < 1$ hace que $\frac{|\lambda_1(\bar{P})|}{|\lambda_2(\bar{P})|} \gg 1$ y la velocidad de convergencia es alta¹². De hecho se ha informado de la convergencia del vector PageRank de Google con unas 50 a 100 iteraciones en cálculos que han durado varios días [49], [51], [57]. En [35] se muestra que sobre una web de 80 millones de nodos trabajando con un procesador AMD Athlon a 1,533MHz, unas 50 iteraciones tardan alrededor de 8 horas. Para más detalles acerca del método de la potencia aplicado a cadenas de Markov, véase [69]. En los apartados siguientes mostramos diversas técnicas para acelerar este método.

4.2 Método de la potencia con extrapolación

La idea de partida de este método se debe a Aitken y se remonta a 1937; v. [77]. Según Aitken, cuando se realizan iteraciones del tipo $x^{k+1} = Ax^k$ es de esperar que en una iteración determinada el vector x^{k-1} pueda aproximarse mediante una combinación lineal de los dos vectores propios dominantes (o sea, asociados a los valores propios dominantes) de A , que denotamos aquí como v_1 y v_2 . Es

¹²Nótese que si \bar{P} es reducible, como suele pasar en la web, con $\lambda_2(\bar{P}) = 1$, entonces $\lambda_2(\bar{P}) = \alpha$. Por ello se suele decir que el segundo valor propio de la matriz Google es α .

Inicialización:	$x^0 = e/n, \quad k = 0$
repeat	$x^{k+1} = \alpha P x^k$ $\gamma = \ x^k\ _1 - \ x^{k+1}\ _1$ if $k + 1 == d + 2$ $x^{k+1} = \frac{x^{k+1} - \alpha^d x^{k+1-d}}{1 - \alpha^d}$ $x^{k+1} = x^{k+1} + \gamma v$ $\delta = \ x^{k+1} - x^k\ _1$ $k = k + 1$
until	$\delta < \epsilon$

Cuadro 2: Algoritmo 2. Método de la potencia con extrapolación.

decir, Aitken asume que para una iteración $k - 1$, con $k > 1$, podemos escribir:

$$x^{k-1} = u_1 + \beta_2 u_2, \quad (8)$$

en donde β_2 es un coeficiente desconocido. Esta idea es la que se usa en [35] para presentar el método de la potencia con extrapolación para el cálculo del vector PageRank. Aquí se tienen las iteraciones $x^{k+1} = \bar{P}x^k$ y se asume $\lambda_2(\bar{P}) = \alpha$. Esto junto con la ecuación (8) nos conduce a:

$$x^k = \bar{\bar{P}}x^{k-1} = \bar{\bar{P}}(u_1 + \beta_2 u_2) = u_1 + \alpha\beta_2 u_2, \quad (9)$$

y de (8) y (9) podemos despejar $u_1 = \frac{x^k - \alpha x^{k-1}}{1 - \alpha}$. Nótese que esta fórmula permite calcular una aproximación del vector propio dominante u_1 a partir de x^k y x^{k-1} . La llamada *extrapolación simple* consiste en utilizar esta fórmula como aproximación a x^3 , es decir: $x^3 = \frac{x^3 - \alpha x^2}{1 - \alpha}$, para después seguir usando $x^4 = Ax^3$, $x^5 = Ax^4$, etc. Los autores de [35] muestran que la extrapolación simple no da buenos resultados y generalizan entonces este método a una extrapolación de grado d , que llaman extrapolación A^d , basada en la fórmula de corrección: $x^k = \frac{x^k - \alpha^d x^{k-d}}{1 - \alpha^d}$. Esta fórmula da lugar al algoritmo 2, mostrado en el cuadro 2. Nótese que la fórmula de extrapolación sólo se emplea una vez y su uso viene gobernado por el parámetro d . Tomar $d = 1$ corresponde a la extrapolación simple. Estos autores realizan experimentos sobre una web de 80 millones de nodos y concluyen que los mejores resultados, en tiempos de convergencia, se obtienen para $d = 6$, resultando una reducción del 30% del tiempo requerido por el método de la potencia clásico del algoritmo 1.

4.3 Método Adaptativo

Es conocido que la velocidad de convergencia de las componentes del vector PageRank no es uniforme; las componentes de una gran mayoría de páginas

convergen muy rápidamente, mientras que un pequeño número, las que tienen mayor PageRank, tardan mucho más en converger. Así, Kamvar *et al* [41] observaron que para una red de 280,000 nodos con 3 millones de enlaces, bastaban unas 16 iteraciones para la convergencia del 66% de las componentes del vector PageRank. Sugirieron entonces que no hacía falta iterar en las componentes de x^k que ya han alcanzado la convergencia. Llamando $x^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)$, un criterio de convergencia para asumir que la componente i -ésima de x ya ha convergido es, por ejemplo: $|x_i^{k+1} - x_i^k|/|x_i^k| < 10^{-3}$. Supongamos ahora, sin pérdida de generalidad, que cuando ya han pasado k iteraciones, tenemos que las componentes x_i^k con $i = 1, 2, \dots, p$ no han convergido mientras que el resto de componentes x_i^k con $i = p + 1, \dots, n$ sí lo han hecho. Llamemos $x_N^k = (x_1^k, \dots, x_p^k)$, $x_C^k = (x_{p+1}^k, \dots, x_n^k)$, escribamos $x^k = \begin{bmatrix} x_N^k \\ x_C^k \end{bmatrix}$, consideremos el esquema iterativo:

$$x^{k+1} = Ax^k, \quad (10)$$

y hagamos una partición 2×2 en bloques de la matriz A compatible con la partición hecha en x^k , es decir: $A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$, con $A_{11} \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $A_{12} \in \mathbb{R}^{p \times (n-p)}$, $A_{21} \in \mathbb{R}^{(n-p) \times p}$, $A_{22} \in \mathbb{R}^{(n-p) \times (n-p)}$. Lo interesante de todo esto es que las matrices A_{21} y A_{22} pueden substituirse por ceros y la matriz A_{12} no es necesaria para posteriores iteraciones. Para ver esto basta con notar que las iteraciones (10) pueden escribirse en la forma:

$$x^{k+1} = \begin{bmatrix} x_N^{k+1} \\ x_C^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & O \\ O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_N^k \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A_{12}x_C^k \\ x_C^k \end{bmatrix}.$$

Nótese que en cada iteración $k + 1, k + 2, \dots$ sólo hay que calcular el producto $A_{11}x_N^k$ ya que el resto de variables corresponden al estado conocido (convergiendo) en la iteración k . Hay que indicar que en la práctica las componentes que convergen no estarán ordenadas como hemos supuesto aquí y habrá que identificarlas para considerar como nulas las correspondientes filas de la matriz de iteración A . En experimentos sobre webs reales se ha obtenido que unas 8 iteraciones es suficiente para asumir que la convergencia en ciertas componentes ya es válida. El proceso de adaptación se puede ir repitiendo cada 8 iteraciones, de manera que cada vez se eliminan más componentes de A . Con esta técnica se han obtenido mejoras, respecto del método de la potencia clásico, del orden del 22% en tiempo de cálculo [41].

Rungsawang y Manaskasemsak llevan a cabo, en [62], una paralelización de este método, después de haber experimentado con la paralelización sobre el método usual de la potencia [54], [61]. En sus experimentos con el método de la potencia adaptativo en paralelo sobre una web de 28 millones de páginas, usando 32 procesadores en paralelo, consiguen aceleraciones del orden de 6 a 8 veces mayor que la conseguida con el método usual (método de la potencia no adaptativo). Los autores de este trabajo, que se esta llevando a cabo


```

 $q^1 = q / \|q\|_2$ 
for  $j = 1$  to  $k$ 
   $z = Aq^j$ 
  for  $i = 1$  to  $j$ 
     $h^{i,j} = (q^i)^T z$ 
     $z = z - h^{i,j} q^i$ 
  end for
   $h^{j+1,j} = \|z\|_2$ 
  if  $h^{j+1,j} = 0$  break
   $q^{j+1} = z / \|h^{j+1,j}\|_2$ 
end for

```

Cuadro 3: Arnoldi(A, q, k).

actualmente, creen que todavía hay muchas opciones para mejorar los tiempos de ejecución. La matriz utilizada, así como otras matrices correspondientes a grafos de páginas de internet pueden obtenerse del servidor [81].

4.4 Algoritmo del tipo Arnoldi

El algoritmo de Arnoldi (v. cuadro 3) es un conocido método para construir una base ortonormal de un *espacio de Krylov*, concepto definido más adelante. Golub y Gerif [28] presentan una adaptación del llamado método de Arnoldi refinado, para el cálculo del vector PageRank. Este algoritmo se esquematiza en el cuadro 4, donde \tilde{I} denota una matriz identidad aumentada con una fila de ceros y $V^{*,k}$ indica la columna k -ésima de V . Estos autores muestran que el criterio de convergencia $\sigma_{\min}(H^{k+1,k} - \tilde{I}) < \epsilon$ es equivalente a $\|Aq - q\| < \epsilon$. Por tanto, aplicando el algoritmo a la matriz \tilde{P} se obtiene como resultado el vector PageRank. Los resultados numéricos presentados muestran que para $\alpha = 0,85$ no se mejoran los tiempos de cálculo del método de la potencia. Sin embargo, para $\alpha = 0,99$ el algoritmo es mucho mejor que el método de la potencia, llegando a necesitar menos de la mitad de iteraciones para $k = 16$. Para $\alpha = 0,999$ el método de la potencia necesita 7,000 iteraciones mientras que el algoritmo propuesto llega a la misma tolerancia con 432 iteraciones, con $k = 4$. Véase [28] para más detalles.

4.5 Métodos de agregación/desagregación

Kamvar *et al* [42] proponen sacar partido a que la web se encuentra agrupada formalmente en servidores que concentran gran cantidad de enlaces. La idea consiste en calcular un vector PageRank local para cada servidor¹³. Estos vectores se usarán después para construir un vector PageRank asociado a toda la web que se utilizará como vector inicial para el cálculo estándar del vector

¹³Idea ya usada en [2] donde se habla de *Host graph*.

```

Repeat
   $[Q^{k+1}, H^{k+1,k}] = \text{Arnoldi}(A, q, k)$ 
  Compute  $H^{k+1,k} - \tilde{I} = U\Sigma V^T$ 
  Set  $v = V^{*,k}$ 
  Set  $q = Q^k v$ 
Until  $\sigma_{\min}(H^{k+1,k} - \tilde{I}) < \epsilon$ 

```

Cuadro 4: PageRank usando una variante del método de Arnoldi refinado.

PageRank. Por tanto este método puede considerarse como un método para calcular un vector inicial apropiado que aumente la velocidad de convergencia. Para calcular el vector PageRank local se puede hacer uso de cualquiera de los métodos mencionados anteriormente o cualquier otro, ya que si los servidores son pequeños los problemas de memoria para el cálculo del vector PageRank local no serán ahora un problema serio. El algoritmo propuesto en [42] se denomina *BlockRank* y consta de los pasos siguientes:

1. Separación de la web en k dominios (servidores o conjuntos de servidores). Por ejemplo, en la figura 3 mostramos una web separada en tres dominios, cada uno de ellos conteniendo sus páginas web correspondientes.
2. Cálculo del vector PageRank local $l_j, j = 1, \dots, k$ asociado a cada dominio, con $\|l_j\|_1 = 1, \forall j$.
3. Cálculo del vector BlockRank. Este es un vector PageRank asociado a la web considerada como bloques de páginas; en la figura 4 corresponde a un vector PageRank asociado a los nodos enumerados como 1, 2 y 3. Este vector se calcula asignando a los k bloques la matriz de Markov $B = L^T A S$, donde L es una matriz $n \times k$ formada con los k vectores PageRank locales de la siguiente forma:

$$L = \begin{bmatrix} l_1 & & & \\ & l_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & l_k \end{bmatrix}, \quad (11)$$

y S es una copia de L pero sustituyendo por unos los elementos de L no nulos. El vector BlockRank es entonces el vector b solución de $Bb = b$.

4. El vector inicial de iteraciones para el cálculo del PageRank global (o sea el asociado a la matriz A), se toma como $x^0 = Lb$.

Este método cuenta con muchas ventajas. Primero, dado que se divide el problema en problemas pequeños, el cálculo de cada PageRank local se puede realizar de forma eficiente y rápida ya que todos los datos pueden caber en

la memoria caché de un ordenador estándar. Segundo, como los cálculos del PageRank local son independientes se pueden usar procesadores en paralelo. Tercero, por lo mismo que en el punto anterior, se puede estar calculando un vector PageRank local de un cierto dominio y, a la vez, realizar una navegación (*crawl*) por otro dominio con el objeto de actualizar el grafo del mismo. Una última ventaja es que este método permite definir un vector de personalización por bloques atendiendo a los servidores. Definiendo un vector $v = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ se puede penalizar la importancia de ciertos dominios y resaltar la de otros. Esto es más efectivo que diseñar un vector de personalización global discriminando millones de páginas individuales. Los autores de este método obtienen mejoras de hasta el 200 % en tiempo de computación cuando se comienza el algoritmo PageRank usual con el vector inicial que ofrece este método; v. [42] para más detalles.

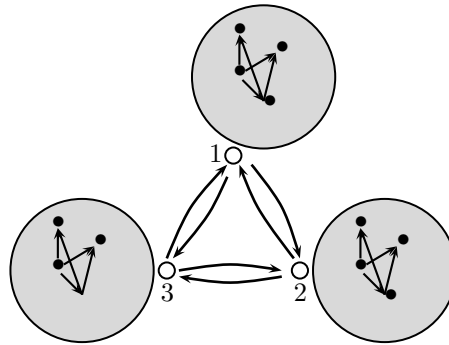


Figura 3: BlockRank sobre una web con tres dominios.

En 2004, Broder¹⁴ et al [14], a la sazón investigadores de IBM y Yahoo!, anunciaron que habían desarrollado una versión similar pero mejorada del método BlockRank, que denominaron *Método de Agregación de grafos*. Este método no calcula un vector inicial x^0 sino una aproximación al vector PageRank x . En sus experimentos dicen que logran aumentar la velocidad del método de la potencia clásica hasta en un 210 % y eso sin optimizar los códigos. Desafortunadamente, el artículo donde muestran los resultados consta de dos páginas y deja más dudas de las que resuelve. Otro investigador de Yahoo!, Pavel Berkhin [8], indica que este método de agregación constituye la técnica actual más práctica de aceleración y se ha venido usando con datos reales del año 2003 de la compañía AltaVista. En la sección 5 veremos que en ciertos casos existen mejores resultados para esta misma web mediante computación en paralelo [25], [26].

Los dos métodos anteriores pueden considerarse como métodos de agregación/desagregación [69]. En [48] y [49] se presenta el método iterativo de agregación/desagregación (IAD) para el cálculo del PageRank. La idea, en términos generales, es la siguiente: conocido el vector PageRank x (por ejemplo,

¹⁴Desde noviembre de 2005 el doctor Andrei Broder es investigador de Yahoo!, donde ocupa el cargo de vicepresidente de nuevas tecnologías de búsqueda.

el del mes pasado) y la matriz P que se usó entonces, se quiere emplear esta información para construir el vector inicial de una nueva ejecución del método de la potencia. El problema es que la red habrá cambiado, y hay que actualizar la matriz P . Los cambios pueden deberse a que se han añadido o eliminado páginas, a que han cambiado un poco los enlaces o a que unos pocos enlaces han cambiado mucho. Se calcula entonces la matriz P actualizada y a partir de ella se obtiene una matriz más pequeña, A , para la cual resulta más rápido calcular un vector PageRank x_A . Después, x_A se emplea para construir un vector x^0 de inicio del método de la potencia en la matriz P actualizada. Langville y Meyer muestran resultados, obtenidos con MATLAB sobre webs pequeñas, con mejoras, en tiempos de cálculo, de hasta el 83%. Indican que este método puede acelerarse con una técnica del tipo extrapolación como la comentada en la sección 4.2. En [40] se da un análisis de la convergencia de este método [48] y se muestra que puede considerarse como un método de la potencia preconditionado por una factorización parcial LU .

Por último, hay que citar a Ipsen y Selee [39] que presentan un algoritmo que agrupa todas las páginas sin salida y aplica entonces el método de la potencia. Su algoritmo es una generalización de los que acabamos de comentar y permite el uso del TrustRank [30] el algoritmo patentado por Google en 2005 para luchar contra el *web spamming*.

4.6 Método de la potencia particionado y en paralelo

En [13] se introduce un modelo para el cálculo del vector PageRank que usa el método de la potencia (como en el algoritmo 1 del cuadro 1) con un modelo del tipo *hipergrafo*. Aquí el elemento central es cómo se realizan los productos matriz-vector. Según estos autores, los modelos en paralelo suelen usar una distribución de los datos en los procesadores del tipo unidimensional, esto es, asignando a cada procesador filas o columnas enteras de la matriz poco densa. Los modelos hipergrafo utilizan otro mecanismo, llamado bidimensional, de distribución de los elementos no nulos de la matriz sobre los procesadores [74]. Los autores sostienen que la técnica es recomendable para el caso de cálculo con diferentes vectores de personalización. Consiguen reducir a la mitad el tiempo usado por iteración con respecto al método usado en [25] y sugieren que esta técnica puede desarrollarse también con una formulación con sistema lineal.

4.7 PageRank asíncrono

En [46], se presenta un método iterativo asíncrono para el cálculo del vector PageRank. Lo denominan PageRank asíncrono y se trata de una puesta en práctica del método de la potencia sin normalización, como en el algoritmo 1 del cuadro 1, mediante esquemas iterativos asíncronos. Los primeros resultados, sobre una web de 281,903 nodos muestran que las técnicas asíncronas pueden ser una buena alternativa en entornos con memoria distribuida. Se informa de aumento de velocidades (en tiempo de cálculo) de hasta 2,66 veces respecto de la que se obtiene con el método de la potencia usual (síncrono).

En la siguiente sección nos ocuparemos de las formulaciones que hacen uso de la escritura de un sistema de ecuaciones lineales para el cálculo del PageRank.

5 Métodos basados en un sistema lineal

Hemos visto que Brin y Page calcularon el vector PageRank utilizando el método de la potencia [57]. Más tarde [2], [10], [19], [56], el problema se formuló mediante un sistema de ecuaciones lineales. Los métodos directos de solución no son aconsejables dado los tamaños, incluso con matrices tan poco densas como las que aparecen. Por tanto, los métodos usados son iterativos; v. [15], [29], [31], [63], [73] para una descripción de métodos iterativos. El uso de estos métodos aplicados en este contexto ha puesto de manifiesto la importancia del parámetro de amortiguamiento α . Para $\alpha = 0,85$ ya se ha dicho que el método de la potencia funciona adecuadamente, al separar suficientemente los dos primeros valores propios [34], pero introduce una cantidad excesiva de saltos aleatorios. Veremos que para $\alpha > 0,85$ los métodos iterativos usados para la solución de un sistema lineal se han revelado como una alternativa para el cálculo del vector PageRank [25]. De hecho, los resultados que Arasu *et al* [2] mostraron en 2002 se obtuvieron usando el método iterativo de Gauss-Seidel con el parámetro $\alpha = 0,9$. Antes de describir con detalle algunos métodos, en la sección siguiente repasamos algunos conceptos sobre métodos iterativos.

5.1 Métodos iterativos para resolver un sistema lineal

De acuerdo con [31] decimos que un método iterativo para resolver el sistema de ecuaciones lineales $Ax = b$ es aquel que produce los vectores x^1, x^2, \dots , (llamados iteraciones) a partir de un vector inicial x^0 siguiendo una regla del tipo $x^{k+1} = \Phi(x^k)$, donde Φ es una función que depende de A y b . Se suele escribir $x^{k+1} = \Phi(x^k, b)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ y se dice que \bar{x} es un punto fijo del método iterativo si $\bar{x} = \Phi(\bar{x}, b)$. Si Φ es una función continua respecto del primer argumento y existe el límite $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k$ entonces este límite es un punto fijo de Φ . Un método se dice *convergente* si para todo b existe el límite \bar{x} y es independiente del valor inicial x^0 . El análisis teórico de la convergencia de los diversos métodos iterativos empleados para el cálculo del vector PageRank se basa en los dos teoremas siguientes [9].

Teorema 1 *Sea A una matriz invertible. Sea la descomposición $A = M - N$, con M una matriz invertible. Sea el esquema iterativo:*

$$x^{k+1} = M^{-1}Nx^k + M^{-1}b, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

Entonces, se cumple que este esquema iterativo converge a la única solución de $Ax = b$ para cualquier x^0 si, y solamente si, $\rho(M^{-1}N) < 1$.

El esquema iterativo (12) se suele escribir también en la forma:

$$x^{k+1} = Tx^k + c, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

donde $c = M^{-1}b$ y la matriz $T = M^{-1}N$ se denomina *matriz de iteración* del esquema iterativo. Cuando la matriz A no es invertible se hace uso del siguiente resultado [9], donde I denota la matriz identidad.

Teorema 2 *Sea A una matriz cuadrada singular. Se cumple que el esquema iterativo (13) aplicado a $Ax = b$ converge a alguna solución $x(x^0)$ para cada x^0 si, y solamente si, (1) $\rho \leq 1$, (2) si $\rho(T) = 1$ entonces $\text{rango}(I - T) = \text{rango}(I - T)^2$ y (3) si $\rho(T) = 1$ entonces si un valor propio tiene módulo 1 ha de ser el valor propio 1.*

Nótese que el *método de la potencia* consiste en resolver el sistema $Ax = 0$ con $A = I - P$, no invertible, usando el sistema iterativo (13) tomando $M = I$, $N = P$, lo que lleva a la matriz de iteración $T = P$. El teorema 2 muestra que este método es convergente cuando la matriz P es la matriz de transición de una matriz de Markov ergódica. De forma similar se analiza la convergencia de los métodos de Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, etc. [5], [9], [63], [69], [73].

5.2 Cálculo del vector PageRank mediante un sistema lineal

La ecuación de valores y vectores propios (6) puede escribirse también como un sistema homogéneo de n ecuaciones lineales con n incógnitas:

$$(I - \bar{\bar{P}})x = 0, \quad (14)$$

sujeto a la condición $x^T e = 1$. Se cumple que $I - \bar{\bar{P}}$ es una M -matriz¹⁵ singular irreducible. Se conocen diversos métodos que pueden aplicarse para resolver (14), v. [69], pero no son aconsejables ya que $\bar{\bar{P}}$ es muy grande. Para evitar esta situación, se introdujo el siguiente enfoque [2], [19], [47], [56]: sustituyendo en la ecuación (6) el valor de \bar{P} dado por (5), se obtiene el sistema de ecuaciones lineales:

$$(I - \alpha\bar{P})x = (1 - \alpha)v, \quad (15)$$

donde $\bar{P} = P + vd^T$. En este caso se cumple que la matriz de coeficientes $(I - \alpha\bar{P})$ es una M -matriz no singular. De nuevo, como $\alpha\bar{P}$ sigue siendo una matriz grande, tampoco interesa escribirla explícitamente. Recientemente, tanto en [47] como en [19], se presentó una nueva estrategia. Ambos trabajos demuestran, de manera diferente, que el vector PageRank x , solución de (6), se puede obtener resolviendo el sistema de ecuaciones lineales *disperso* (o sea, con pocos elementos no nulos):

$$(I - \alpha P)y = v, \quad (16)$$

y haciendo posteriormente $x = y/(y^T e)$. En este caso la matriz de coeficientes $(I - \alpha P)$ es susceptible de ser calculada y almacenada, ya que tiene un gran número de elementos que son cero. Además, esta matriz es una M -matriz no singular, lo que implica que ciertos métodos iterativos como Jacobi, Gauss-Seidel y los de tipo Schwarz puedan aplicarse con garantías de éxito para la resolución

¹⁵Una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, con elementos no diagonales no positivos, se llama M -matriz si se puede escribir en la forma $A = sI - B$ con $B \geq 0$, y $s \geq \rho(B)$.

del sistema (16). En la práctica, estos métodos se aplican en la modalidad de bloques, al descomponer el sistema de ecuaciones (16) en diversos subsistemas, que pueden tener variables comunes entre ellos (*overlapping subdomains*, [16], [58], [68], [72]). Entre las estrategias se usan reordenaciones de las matrices [63].

Los métodos iterativos que se emplean actualmente incluyen los métodos del tipo de *subespacios de Krylov* [67] y su uso en computación en paralelo [25], [27]. Si x^0 es una aproximación inicial a $Ax = b$, el *residuo* inicial es $r^0 = b - Ax^0$ y el *subespacio de Krylov* de dimensión m definido por A y r^0 es aquel cuyos vectores se obtienen mediante combinaciones lineales de los vectores $r^0, Ar^0, A^2r^0, \dots, A^{m-1}r^0$. Es decir: $\mathcal{K}_m(A, r^0) = \langle r^0, Ar^0, A^2r^0, \dots, A^{m-1}r^0 \rangle$. Los métodos iterativos basados en subespacios de Krylov obtienen una solución x^m del tipo $x^m = x^0 + v^m$ donde v^m pertenece a $\mathcal{K}_m(A, r^0)$. El criterio para obtener x^m es que se minimice alguna función. Por ejemplo, el método GMRES (Generalized Minimal RESidual) se basa en minimizar $\|b - Ax\|_2$ con $x \in \mathcal{K}_m(A, r^0)$. Aquí hemos usado la norma-2: $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$.

La convergencia de los métodos de Krylov puede mejorarse usando *precondicionadores* [7], [63]. Aquí precondicionar significa variar el sistema de ecuaciones inicial $Ax = b$ de manera que obtenemos uno equivalente que es más rápido de resolver por un método iterativo. Por ejemplo, una manera de precondicionar es mediante una matriz M invertible tal que el sistema $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ sea fácil de resolver mediante un método iterativo; verbigracia, un método de Krylov. El problema principal de los métodos de Krylov para sistemas grandes, como en el caso de Google, es que se han de almacenar los vectores r^0, Ar^0, A^2r^0, \dots . Aquí la solución pasa por desarrollar una buena paralelización de los algoritmos.

5.3 Algunos trabajos recientes

En [25] se comparan el método de la potencia, el método iterativo de Jacobi y los métodos iterativos de Krylov siguientes: GMRES, BiCGSTAB (Biconjugate Gradient Stabilized), BiCG (Biconjugate Gradient), QMR (Quasi-Minimal Residual), CGS (Conjugate Gradient Squared) y CI (Chebyshev Iterations). Además, en algunas pruebas se usaron como precondicionadores los métodos de Jacobi, Jacobi por bloques y Schwarz aditivo. De las conclusiones del estudio destacamos las siguientes. Para las webs probadas los algoritmos QMR, CGS y CI no convergen. En los casos en que se usaron 60 procesadores ninguno de los métodos de Krylov pudo correr debido a limitaciones de memoria. Los métodos de la potencia y Jacobi tienen aproximadamente la misma velocidad de convergencia y el comportamiento más estable. El método de la potencia es el más rápido (en tiempo total de computación) para α en torno a 0,85. Los métodos GMRES y BiCGSTAB son los que ofrecen mejores resultados para $\alpha = 0,9$, $\alpha = 0,95$ y $\alpha = 0,99$. Consiguen reducir las 10 horas que cuesta un cálculo en serie similar a [14], a unos 35 minutos para el caso del método de la potencia en paralelo y a unos 28 minutos para el método BiCGSTAB con un *cluster* de 140 procesadores (70 máquinas) con 280 GB de memoria. En un trabajo posterior [26] muestran que con ciertas mejoras en el tratamiento del

paralelismo consiguen bajar a 333 segundos en el caso del método de la potencia en paralelo y a 391 segundos con el método BiCGSTAB. Hay que resaltar que no indican el tiempo que cuesta almacenar la matriz en memoria. Véase también [21] para otros resultados con métodos de Krylov para calcular el PageRank.

En [45] usan un sistema de identificación de páginas con una 2-tupla de enteros positivos, uno para localizar el servidor (*HostID*) y otro para identificar la página dentro del servidor (*LocalID*). Trabajaron sobre una web de 63 millones de páginas y 801 millones de links distribuidos sobre 470,000 servidores. Estos servidores fueron repartidos en 8 bloques. Sus resultados muestran que con este sistema y utilizando el algoritmo de Gauss-Seidel en paralelo consiguen una velocidad 10 veces mayor que con el método de la potencia en serie.

En [16], la ecuación (16) se resuelve por el método aditivo de Schwarz [17]. Los resultados numéricos, basados en una web pequeña, muestran que el método aditivo de Schwarz con solapamiento es preferible al método de Jacobi por bloques, atendiendo tanto al número de iteraciones como al tiempo empleado para llevarlas a cabo. En general, los mejores resultados se obtiene cuando se realiza una permutación previa de la matriz Google de manera que los elementos queden agrupados en la diagonal.

En [50] se presenta un método llamado *PageRank reordenado*, basado en [52]. Se resuelve el sistema (16) mediante una reordenación previa que agrupa las columnas (filas, en su caso, ya que usan la matriz transpuesta) de ceros. Muestran que el problema se reduce a un sistema lineal muy pequeño, que resuelven con el método de Jacobi. Consiguen multiplicar por 6 la velocidad de cálculo para algunas web consideradas. Otro trabajo reciente es [75] en donde se utiliza un preconditionador del tipo multigrid algebraico (AMG) para una ecuación como (14). Se indica que se obtiene una aceleración significativa de la velocidad de convergencia.

Como se aprecia en esta breve revisión de métodos, hay todavía muchas variables donde encontrar posibilidades de mejora para el cálculo del vector PageRank de una manera más rápida, fiable, y segura.

6 Conclusiones

Los métodos de cálculo para el vector PageRank se pueden separar en dos: aquellos que usan el método de la potencia y los que se basan en un sistema de ecuaciones lineales. Para evitar el empleo de matrices densas se usa el método de la potencia escrito como en el algoritmo 1, cuadro 1, o un sistema de ecuaciones lineales como (16). Los métodos iterativos encuentran su utilidad en valores de $\alpha > 0,85$ donde el método de la potencia puede resultar muy lento. Los estudios analíticos y experimentales no han hecho nada más que comenzar. Las posibilidades de mejora son muy amplias dado que los métodos vistos ofrecen ventajas que son complementarias.

7 Agradecimientos

Deseo agradecer a Rafael Bru una lectura atenta y ciertos comentarios agudos sobre una versión anterior de este manuscrito. Asimismo agradezco a Enrique Fernández-Cara y a un revisor (o revisora) anónimo las múltiples sugerencias que han enriquecido el presente trabajo.

Referencias

- [1] M. S. Aktas, M. A. Nacar y F. Menczer. Personalizing PageRank Based on Domain Profiles. *Proceedings of the sixth WEBKDD workshop: Webmining y Web Usage Analysis (WEBKDD04), in conjunction with the 10th ACM SIGKDD conference (KDD04)*, (B. Mobasher, B. Liu, B. Masand y O. Nasraoui, eds). Seattle, Washington, Estados Unidos. 2004.
- [2] A. Arasu, J. Novak, A. Tomkins y J. Tomlin. PageRank computation and the structure of the Web: experiments and algorithms. In *The Eleventh International WWW Conference*, ACM Press. Nueva York. Estados Unidos. 2002.
- [3] K. Avrachenkov y N. Litvak. The effect of new links on Google PageRank. *Informe Técnico RR-5256*, INRIA. 2004.
- [4] R. Baeza-Yates. Al-Khorezmi: Un Matemático Olvidado. *Ciencia al día*. Vol 1. No 1. 1998.
- [5] R. Barrett, M. W. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, y H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods* SIAM, Filadelfia, Pensilvania, EE.UU, 1994.
- [6] L. Becchetti y C. Castillo . The Distribution of PageRank Follows a Power-Law only for Particular Values of the Damping Factor *WWW 2006*, Mayo 22-26, Edimburgo, Escocia. 2006.
- [7] M. Benzi. Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey. *Journal of Computational Physics* 182, 418-477. 2002.
- [8] P. Berkhin, A survey on PageRank computing. *Internet Mathematics*, vol. 2, No. 1: 73-120. 2005.
- [9] A. Berman y R. J. Plemmons. *Nonnegative matrices in the mathematical sciences*, SIAM, Filadelfia, Pensilvania, Estados Unidos. Reimpresión, 1994.
- [10] M. Bianchini, M. Gori y F. Scarselli. Inside PageRank. *ACM Transactions on Internet Technology (TOIT)*, Volume 5 , Issue 1, pp. 92-128. 2005
- [11] P. Boldi, M. Santini y S. Vigna. PageRank as a function of the damping factor. *Proceedings of the 14th international conference on World Wide Web*.pp. 557-566, Chiba, Japón. 2005.

- [12] P. Boldi. TotalRank: ranking without damping. *Proceedings of the 14th international conference on World Wide Web*.pp. 898-899, Chiba, Japón. 2005.
- [13] J.T. Bradley, D.V. de Jager, W.J. Knottenbelt y Trifunovic, A. Hypergraph partitioning for faster parallel PageRank computation. *Formal techniques for computer systems and business processes proceedings*. 3670: 155-171, 2005.
- [14] A. Broder, R. Lempel, F. Maghoul y J. Pederson. Efficient PageRank Approximation via Graph Aggregation, *Proceedings of the thirteenth World Wide Web Conference*.pp. 484-485. Nueva York, Estados Unidos. 2004.
- [15] R. Bru Métodos iterativos para resolver sistemas lineales. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.*, vol. 24 , pp. 9-29, 2003.
- [16] R. Bru, F. Pedroche y D. B. Szyld. Cálculo del vector PageRank de Google mediante el método aditivo de Schwarz. En *Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería 2005*. J.L. Pérez Aparicio et al (ed.), p. 263. Granada, España. 2005.
- [17] R. Bru, F. Pedroche y D. B. Szyld. Additive Schwarz Iterations for Markov Chains, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, vol. 27, No. 2, pp. 445-458, 2005.
- [18] P. Craven. Google's PageRank Explained and how to make the most of it. <http://www.webworkshop.net/>. 2002.
- [19] G. M. Del Corso, A. Gulli y F. Romani. Fast PageRank Computation Via a Sparse Linear System. *Lecture notes in computer science*, 3243, 118-130. 2004.
- [20] G. M. Del Corso, A. Gulli y F. Romani. Exploiting web matrix permutations to speed up PageRank computation. *Informe técnico*. Instituto di Informatica e Telematica. Universidad de Pisa. Italia. 2004.
- [21] G. M. Del Corso, A. Gulli y F. Romani. Comparison of Krylov Subspace Methods on the PageRank Problem. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, en prensa, 2006.
- [22] N. Eiron, K. S. McCurley y J. A. Tomlin. Ranking the web frontier. *Proceedings of the thirteenth World Wide Web Conference*. pp. 309-318. Nueva York, Estados Unidos. 2004.
- [23] A. Farahat, T. LoFaro, J. C. Miller, G. Rae y L. A. Ward. Authority Rankings from HITS, PageRank, and SALSA: Existence, Uniqueness, and Effect of Initialization. *SIAM Journal on Scientific Computing* Volume 27 , Issue 4, pp. 1181-1201. 2006.
- [24] P. Fernández. El secreto de Google y el álgebra lineal. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.*, vol. 30, pp. 115-141, 2004.

- [25] D. Gleich, L. Zhukov y P. Berkhin. Fast parallel PageRank: A linear system approach. Informe técnico YRL-2004-038, Yahoo!. 2004.
- [26] D. Gleich y L. Zhukov. Scalable computing for power law graphs: experience with parallel pagerank. Informe técnico Yahoo!. 2005.
- [27] D. Gleich, L. Zhukov y P. Berkhin. Fast Parallel PageRank: Methods and Evaluations. *Poster. BASCD 2005*, University of San Francisco. California, Estados Unidos. 2005.
- [28] G. H. Golub y C. Greif. An Arnoldi-type algorithm for computing pagerank. *BIT Numerical Mathematics*. (on-line) 2006.
- [29] G. H. Golub y C. F. Van Loan. *Matrix Computations*, (3r ed.) Johns Hopkins, 1996.
- [30] Z. Gyöngyi, H. García-Molina, Pedersen, J. Combating web spam with TrustRank. *Proceedings of the 30th VLDB Conference* Toront, Canadá. 2004.
- [31] W. Hackbusch. *Iterative solution of large sparse systems*. Springer, Berlin, 1994.
- [32] T. H. Haveliwala. Efficient computation of PageRank. *Informe técnico 1999-31*, Computer Science Department, Stanford University, California, Estados Unidos. 1999.
- [33] T. H. Haveliwala. Topic-sensitive PageRank. In *The Eleventh International WWW Conference*. May 7-11, Honolulu, Hawaii, Estados Unidos. 2002.
- [34] T. H. Haveliwala y S. D. Kamvar. The second eigenvalue of the Google matrix. *Informe técnico*, Stanford University, California, Estados Unidos. 2003.
- [35] T. H. Haveliwala, S. D. Kamvar, D. Klein, C. Manning y G. Golub. Computing PageRank using power extrapolation. *Informe técnico*, Stanford University, California, Estados Unidos. 2003.
- [36] T. H. Haveliwala, S D. Kamvar y G. Jeh. An analytical comparison of approaches to personalizing PageRank. *Informe técnico*, Stanford University, California, Estados Unidos. 2003.
- [37] D. J. Higham. Google PageRank as mean playing time for pinball on the reverse web. *Applied Mathematics Letters*, 18. 1359-1362, 2005.
- [38] I.C.F. Ipsen y R.S. Wills. Mathematical Properties and Analysis of Google's PageRank *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl.*, vol. 34, pp. 191-196, 2006.
- [39] I.C.F. Ipsen y T. M. Selee. PageRank Computation, with Special Attention to Dangling Nodes. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, sometido.

- [40] I.C.F. Ipsen y S. Kirkland. Convergence Analysis of a PageRank Updating Algorithm by Langville and Meyer. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, vol. 27, no. 4, pp. 952-67. 2006.
- [41] S. D. Kamvar, T. H. Haveliwala y G. H. Golub. Adaptive methods for the computation of PageRank. *Linear Algebra and its Applications*. 386, 51-65. 2004.
- [42] S. D. Kamvar, T. H. Haveliwala, C. D. Manning y G. H. Golub. Exploiting the block structure of the web for computing PageRank. *Informe Técnico*, Stanford University, California, Estados Unidos. 2003.
- [43] J. Kleinberg, S. R. Kumar, P. Raghavan, S. Rajagopalan y A. Tomkins. The web as a graph: measurements, models and methods. En *Proceedings of the international conference on combinatorics and computing*. 1999.
- [44] J. Kleinberg y S. Lawrence. The Structure of the Web. *Science*, Vol. 294, pp. 1849-1850, 2001.
- [45] C. Kohlschutter, P. A. Chirita y W. Nejdl. Efficient parallel computation of PageRank *Advances in information retrieval*. 3936: 241-252, 2006.
- [46] G. Kollias, E. Gallopoulos, y D. B. Szyld. Asynchronous iterative computations with Web information retrieval structures: The PageRank case. *Proceedings of the Conference on Parallel Computing 2005*. 13-16 Septiembre 2005, Málaga. (por aparecer).
- [47] A. N. Langville y C. D. Meyer. Deeper inside PageRank. *Internet Mathematics*, Vol. 1(3):335-380. 2005.
- [48] A. N. Langville y C. D. Meyer. Updating Markov Chains with an eye on Google's PageRank. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, vol. 27, no. 4, pp. 968-987, 2006.
- [49] A. N. Langville y C. D. Meyer. Updating PageRank using the group inverse and stochastic complementation. *Informe técnico crsc02-tr32*, North Carolina State University, Mathematics Department. Carolina del Norte, Estados Unidos. 2002.
- [50] A. N. Langville y C. D. Meyer. A reordering for the PageRank problem. *SIAM J. Sci. Comput.* 27 (6) 2112-2120. 2006.
- [51] A. N. Langville y C. D. Meyer. A survey of eigenvector methods for web information retrieval. *SIAM Review* 47 (1) 135-161. 2005.
- [52] C. P-C. Lee, G. H. Golub y S. A. Zenios A Fast two-stage algorithm for computing PageRank and its extensions. *Informe técnico SCCM-2003-15*. Stanford University. 2003.
- [53] J. Long. *Hacking con Google*. Anaya Multimedia, Madrid, 2005.

- [54] B. Manaskasemsak y A. Rungasawang. Parallel PageRank computation on a gigabit PC cluster. *18th International Conference on advanced information networking and applications (AINA'04)*, volume 1. 273-277. 2004
- [55] C. B. Moler. The World's Largest Matrix Computation Google's PageRank is an eigenvector of a matrix of order 2.7 billion. *MATLAB News & Notes*. 2002.
- [56] C. B. Moler. *Numerical Computing with MATLAB*. SIAM. Filadelfia, Estados Unidos. 2004.
- [57] L. Page, S. Brin, R. Motwani y T. Winograd. The PageRank Citation Ranking: Bringing Order to the Web. Stanford Digital Library Technologies Project. 1999. Accesible en: <http://dbpubs.stanford.edu:8090/pub/1999-66>.
- [58] A. Quarteroni y A. Valli, A. *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, Reino Unido. 1999.
- [59] R. Raghavan y H Garcia-Molina. Crawling the hidden web. *In-forme Técnico*, Stanford Digital Library Technologies Project <http://dbpubs.stanford.edu/pub/2000-36>. 2000.
- [60] M. Richardson y P. Domingos. The Intelligent Surfer: Probabilistic Combination of Link and Content Information in PageRank. In: *Advances in Neural Information Processing Systems 14*. 2002.
- [61] A. Rungasawang y B. Manaskasemsak. Partition-Based parallel PageRank algorithm In *3th International Conference on Information Technology and Applications. ICITA 2005..* vol. 2. pp. 57-62. 2005.
- [62] A. Rungasawang y B. Manaskasemsak. Parallel adaptive technique for computing PageRank. In *Proceedings of the 14th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed, and Network-Based Processing (PDP'06)*. pp. 15-50. 2006.
- [63] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems (Second edition)*. SIAM, Philadelphia. 2003.
- [64] S. Serra-Capizzano. Jordan Canonical Form of the Google Matrix: A Potential Contribution to the PageRank Computation *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* Volume 27 , Issue 2, 305 - 312, 2005.
- [65] M. Serres (ed.). *A history of scientific thought: Elements of a history of science*. Blackwell Publishers Ltd, Oxford, R.U., 1995.
- [66] C. Silverstein. Mathematical Analysis of Hyperlinks in the World Wide Web. *SIAM 50th anniversary and 2002 annual meeting. July, 8-12*. Filadelfia, Pensilvania, Estados Unidos. 2002.

- [67] V. Simoncini y D. B. Szyld. Recent computational developments in Krylov Subspace Methods for linear systems. *Numerical Linear Algebra with Applications*, en prensa.
- [68] B. F. Smith, P. E. Bjørstad, y W. D. Gropp. *Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*, Cambridge University Press, Cambridge, Reino Unido. 1996.
- [69] W. J. Stewart. *Introduction to the Numerical Solution of Markov Chains*. Princeton University Press, Princeton, Nueva Jersey, Estados Unidos. 1994.
- [70] M. Sydow. Random surfer with back step. *WWW2004*, Mayo 17-22, Nueva York, EE.UU. 2004.
- [71] M. Thelwall. Can Google's PageRank be used to find the most important academic Web pages?. *Journal of Documentation*. Vol. 59. No. 2. pp. 205-217. 2003.
- [72] A. Toselli y O. B. Widlund. *Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory*. Springer, Heidelberg, Alemania. 2005.
- [73] R. S. Varga. *Matrix Iterative Analysis*. Springer. Berlín, Alemania. 2ª edición, 2000.
- [74] B. Vastenhouw y R. H. Bisseling. A two-dimensional data distribution method for parallel sparse matrix-vector multiplications. *SIAM Review* 47 (1) 67-95. 2005.
- [75] Virnik, E. An algebraic multigrid preconditioner for a class of singular M -matrices. *Proceedings of the 13th ILAS Conference*. 18-21 Julio, Amsterdam. Holanda. 2006.
- [76] D. Vise. *The Google Story*. Delacorte Press. Nueva York, EEUU, 2005.
- [77] J. H. Wilkinson *The algebraic eigenvalue problem*. Clarendon Press. Oxford, Gran Bretaña. 1965.
- [78] Los ingresos por publicidad 'online' aumentan, pero pueden frenarse este año. *ELPAIS.es*, 26-09-2006.
- [79] Soluciones publicitarias de Google, <http://www.google.es/intl/es/ads/>.
- [80] The MacTutor History of Mathematics archive, <http://turnbull.mcs.st-and.ac.uk/history/>.
- [81] The Stanford WebBase Project,
<http://dbpubs.stanford.edu:8091/testbed/doc2/WebBase/>.

A SURVEY ON MATHEMATICAL ASPECTS OF LUBRICATION PROBLEMS

GUY BAYADA*, CARLOS VÁZQUEZ†

*ICJ UMR CNRS 5208 /LAMCOS UMR CNRS 5259. INSA, Math, Bât. Léonard
da Vinci, 21 av. Jean Capelle, 69621-Villeurbanne Cedex (FRANCE),
Departamento de Matemáticas. Universidade da Coruña. Facultad de Informática,
Campus Elviña, 15071-A Coruña (SPAIN)

Guy.Bayada@insa-lyon.fr carlosv@udc.es

Abstract

In this paper a review concerning the main ideas, seminal papers and more recent advances in mathematical modelling of a wide class of lubrication problems is presented. After introducing the main ideas about different topics related to lubrication problems (thin film approximation, cavitation, rough surfaces, elasto-hydrodynamic models, etc) and their mathematical translations, the authors mainly focus on the state of art (recent advances and open problems) in passing to the limit from more general Stokes equations to asymptotic Reynolds-like models. Finally, some comments on inverse problems and their related optimization formulations are also included.

Key words: *tribology, lubrication, Stokes equation, Reynolds equation, cavitation, free boundaries, homogenization, elasto-hydrodynamics, non Newtonian fluids, inverse problems, numerical methods.*

AMS subject classifications: *76D08 76A20 74F10 35R35 35B27 35J60 35J85*

1 Introduction

In many fields of engineering and applied sciences, different technologies reduce friction and wear between relative moving surfaces. In fact, lubrication theory is part of a larger discipline, termed as Tribology, which is defined as the science and technology concerned with close interacting surfaces, including the study of friction, lubrication, wear and erosion. The term *tribology* was

Fecha de recepción: 13/04/2006

Partially supported by Research Projects from MEC of Spain (MTM2004-05796-C02-01) and Xunta de Galicia (PGIDIT-05-PXIC-10503-PN)

first coined in 1966 in a report from a Commission of the British Ministry of Education and Science, the '*Jost Report*' [115], and comes from the greek word *tribos* (which means friction), so that Tribology could be shortly defined as the *science of friction*. In the Jost Report, a group of noted academics analyzed the interactions among friction, lubrication and wear. A later study in the United States estimated in 16 billion dollars per year the potential savings from using appropriate tribological practices [116]. In [50] it is mentioned that losses due to the ignorance of tribology represent a 6 per cent of the GNP of the United States (that is, 200 billion dollars) in 1966. The cost benefit ratio for research to generate improvements is estimated about 1:50 [117]. This research area is actually highly interdisciplinary, including physics, fluid and solid mechanics, thermodynamics, heat transfer, metallurgy, material science, rheology, lubrication, machine design, reliability, and, of course, applied mathematics.

Despite of the previous data, concerning the industrial relevance of tribology, and that in this paper we are mainly concerned with some applications where the presence of lubrication is productive in order to reduce friction and wear; in other situations, friction can be essential and desired, such as to obtain fire from pieces of wood, to brake or drive a vehicle, or just for human running or walking without the effects of uncontrolled sliding. Even wear is useful for writing with a pencil, machining and polishing, for example.

The aim of this review paper is the presentation of the main ideas and recent advances in the modelling, mathematical analysis and numerical simulation of different processes taking place in lubrication technology. The mathematical modelling is mainly based on different versions of Reynolds equation, which represents an asymptotic limit of fluid mechanics models for thin films.

Having in view the objective of the paper, in Section 2 we present a *naive* deduction of the more classical linear Reynolds equation from Navier-Stokes, the rigorous approach being mainly based on asymptotic expansions techniques. In Section 3 we introduce possible cavitation phenomena in lubrication, which give rise to various free boundary problems. Section 4 concerns the lubrication of rough surfaces. In the periodic roughness case, different homogenization techniques allow to obtain asymptotic models from Reynolds equations with highly oscillating coefficients. Section 5 shows different generalized Reynolds equations which are widely used in the mechanical engineering domain to model gas lubricated devices, piezoviscous regimes or elastohydrodynamic local contacts. One further step is given in Section 6, where some examples of elastohydrodynamic problems posed in terms of coupled systems of PDE's are presented. Section 7 is devoted to reviewing the state of the art in the passage to the limit from Stokes to Reynolds for the limit models presented in Sections 3 to 6. Moreover, some comments on porous bearings, non Newtonian fluids or fluid-solid interface conditions are also included in Section 7. In Sections 8 and 9, some ideas and examples concerning the complex and realistic inverse problems are considered. In Section 9, an optimization approach to this problems is presented. Finally, in section 10 some challenges and conclusions are stated.

2 From fluid mechanics to Reynolds equation for thin film lubrication

The scientific study of the three main aspects of tribology (friction, lubrication and wear) was initiated at very different dates. Thus, the basic laws of friction were first correctly deduced by Da Vinci (1519), followed by important advances provided by Amontons (1699) and Coulomb (1785). Later on, in 1886, the theory of lubrication starts with the work of Reynolds [143], where he heuristically deduces the Reynolds equation, which is the key point in the mathematical modelling of thin film lubrication processes. More recently, the origins of the theoretical study of wear are associated to Archard's formula (1953).



Figure 1: O. Reynolds is the author of the seminal paper on lubrication theory.

In this section we mainly focus on the connection between the classical fluid mechanics equations and linear Reynolds equation, which governs the lubricant pressure in thin film lubrication.

Typical lubricated devices consist of a thin flow of lubricant between two surfaces in relative motion. The equations used to describe them can be obtained from the simplification of classical equations in fluid mechanics, by taking into account the thin film geometry between the surfaces (i.e., one dimension in the fluid domain is far smaller than the other two). If we consider an incompressible Newtonian lubricant in an isothermal and isoviscous regime, we can assume that the fluid motion is governed by Navier-Stokes equations:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right] = -\nabla p + \nu \Delta \vec{v} + \rho \vec{f} \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \vec{v} = 0 \quad (2)$$

where the unknowns $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ and p denote the fluid velocity field and pressure, respectively, and the data ρ , ν and \vec{f} denote the density, the viscosity and the external volume forces, respectively.

It is well known that finding solutions of Navier-Stokes equations with appropriate boundary conditions is not always an easy task, so that in many applications we try to simplify these equations as much as possible. In the mathematical modelling of lubrication processes, the natural simplification comes from the fact that the length scale, L_{xy} , in the in-plane xy of the film is significantly larger than the length scale, L_z , across its thickness in the z direction. Typically, we have that $\epsilon = L_z/L_{xy}$ is between 10^{-4} and 10^{-1} . In view of this geometric consideration, an appropriate scaling of the original equations in real variables can be introduced in order to provide easier to handle dimensionless equations. More precisely, we define the new spatial coordinates and velocity components:

$$X = x/L_{xy}, Y = y/L_{xy}, Z = z/L_z,$$

$$V_1 = v_1/V_{xy}, V_2 = v_2/V_{xy}, V_3 = v_3/V_z,$$

where $\vec{V} = (V_1, V_2, V_3)$ denotes the dimensionless fluid velocity and V_{xy} and V_z denote the orders of the velocity in the xy -plane and across the film, respectively. From the continuity equation we can easily deduce the relation $V_z = \epsilon V_{xy}$. Moreover, to obtain the dimensionless Navier-Stokes equations, the scaled pressure and time can be defined in the form (depending on the considered device):

$$P = p(\epsilon Re)/(\rho V_{xy}^2), \quad T = t(V_{xy}/L_{xy}),$$

where $Re = (V_{xy}L_{xy})/\nu$ is the Reynolds number.

For simplicity, we assume that the body forces are negligible. Then, introducing the new unknowns and variables in the original equations and neglecting the terms smaller than $O(\epsilon^2)$, we obtain the following reduced equations:

$$\begin{aligned} \epsilon^2 Re \left(\frac{\partial V_1}{\partial T} + V_1 \frac{\partial V_1}{\partial X} + V_2 \frac{\partial V_1}{\partial Y} + V_3 \frac{\partial V_1}{\partial Z} \right) &= -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{\partial^2 V_1}{\partial Z^2}, \\ \epsilon^2 Re \left(\frac{\partial V_2}{\partial T} + V_1 \frac{\partial V_2}{\partial X} + V_2 \frac{\partial V_2}{\partial Y} + V_3 \frac{\partial V_2}{\partial Z} \right) &= -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{\partial^2 V_2}{\partial Z^2}, \\ \frac{\partial V_1}{\partial X} + \frac{\partial V_2}{\partial Y} + \frac{\partial V_3}{\partial Z} &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

To be noticed is that the missing equation in the momentum conservation implies that the pressure is constant across the lubricant film. Moreover, passing to the limit when ϵ tends to zero and coming back to the original variables, leads

to the simplified model:

$$\begin{aligned} \nu \frac{\partial^2 v_1}{\partial z^2} &= \frac{\partial p}{\partial x}, \\ \nu \frac{\partial^2 v_2}{\partial z^2} &= \frac{\partial p}{\partial y}, \\ \frac{\partial v_1}{\partial x} + \frac{\partial v_2}{\partial y} + \frac{\partial v_3}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \tag{4}$$

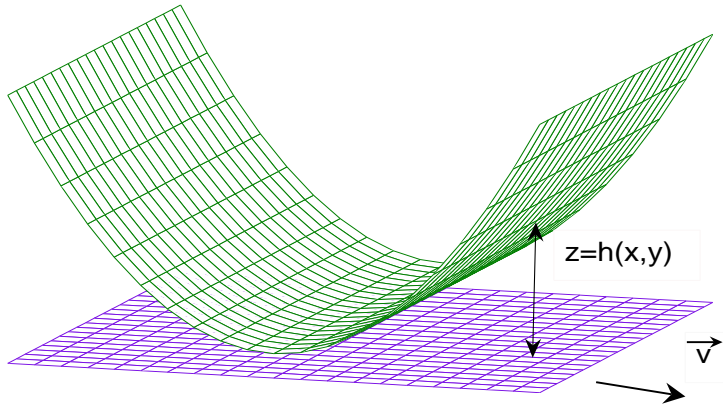


Figure 2: Thin film gap between surfaces $z = h(x, y)$ and $z = 0$.

Now, as the pressure does not depend on the z coordinate, the first two equations can be integrated with respect to z , in order to deduce expressions for v_1 and v_2 . Moreover, we assume a flat lower surface, defined by the equation $z = 0$, the upper surface being defined by a graph, namely $z = h(x, y)$, as can be seen in Figure 2; and the lubricant displacement taking place only in the x -direction, with velocities $v_1 = v_1^u$ at the upper boundary and $v_1 = v_1^l$ at the lower boundary (i.e, v_2 vanishes at both surfaces). Thus, we have:

$$v_1 = \frac{1}{2\nu}(z^2 - zh) \frac{\partial p}{\partial x} + \left(1 - \frac{y}{h}\right) v_1^l + \frac{y}{h} v_1^u \tag{5}$$

$$v_2 = \frac{1}{2\nu}(z^2 - zh) \frac{\partial p}{\partial y} \tag{6}$$

On the other hand, if we integrate the continuity equation in (4) between the limits $z = 0$ and $z = h$, then we have

$$\begin{aligned}
 [v_3]_{z=0}^{z=h} &= - \int_0^{h(x,y)} \frac{\partial v_1}{\partial x} dz - \int_0^{h(x,y)} \frac{\partial v_2}{\partial y} dz \\
 &= - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2\nu} \frac{\partial p}{\partial x} \int_0^{h(x,y)} (z^2 - zh) dz \right) \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{2\nu} \frac{\partial p}{\partial y} \int_0^{h(x,y)} (z^2 - zh) dz \right) \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{h(x,y)} ((1 - y/h)v_1^l + (yv_1^u)/h) dz + v_1^u \frac{\partial h}{\partial x}. \quad (7)
 \end{aligned}$$

Thus, if we assume zero velocity in the z -direction, we get the so called Reynolds equation for the lubricant pressure:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 6(v_1^l - v_1^u) \frac{\partial h}{\partial x} + 6h \frac{\partial}{\partial x} (v_1^l + v_1^u). \quad (8)$$

Remark 1 Notice that in the case of constant velocities in the x -direction at both limit surfaces, the last term in the right hand side vanishes.

Remark 2 When the upper surface moves in the z -direction following the equation $z = h(x, y, t)$, with velocity v_3^u , then the term $v_3^u - v_3^l = v_3^u = \frac{\partial h}{\partial t}$ also appears in the Reynolds equation.

In what follows we assume a constant velocity, $v_1^l = s$, at the lower surface and null velocity, $v_1^u = 0$, at the upper surface.

The previous paragraphs provide a *naive* approach to the deduction of the Reynolds equation from the Navier-Stokes system. This 3-D to 2-D modelling simplification has an analogous 2-D to 1-D reduction. It is on one dimensional Reynolds equations, which model large journal bearings behaviour, where the first analytical solution was obtained by Sommerfeld in (1904), see [150].

Various attempts have been made to give a more solid foundations for the previous process by means of formal asymptotic expansions techniques (see Elrod [95] or Cimatti [70], for example); the first rigorous proofs of asymptotic convergence being due to Bayada-Chambat [22] in 1986 for the Stokes equation and to Nazarov [135] in 1990 for the Navier-Stokes equation. These last authors found the analogies between fluid thin films modelling and plate theory in solid mechanics.

Next, we address some words about boundary conditions in the departure equations. In these previous works, boundary conditions are associated to Stokes equations for the velocity all around the domain occupied by the fluid and no-slip conditions are used. So, passing to the limit leads to retain these boundary conditions for the velocity at the top and bottom surfaces,

while lateral boundary conditions are lost (there exists a boundary layer phenomenon). In fact, they are replaced by a Neumann boundary condition for the pressure in the limit equation, which can be viewed as a flux conservation condition around the 2-D domain in the xy -plane.

This appears to be strange for engineers as they are accustomed to deal with Dirichlet boundary conditions for the pressure in usual devices. However, at the same time, in the work of Conca, Murat and Pironneau [79] a way to deal with mixed boundary conditions (Dirichlet conditions both for pressure and velocity) in Navier-Stokes problems is proposed. The asymptotic procedure leading to Reynolds equation can be generalized to these pressure-velocity data and then the usual Dirichlet condition for the pressure in the limit equation is recovered [25]. Other asymptotic studies involving various geometries (as the one of the journal bearing) can be found in [26]. More precise estimates taking boundary layers into account are given in [87].

On the other hand, taking Navier-Stokes equations instead of Stokes equations as starting point, leads to the same Reynolds equation as soon as the Reynolds number is small, the critical number being the square of the number $1/\epsilon$, introduced in [135] and [11]. In this setting, some anisotropic Poincaré inequalities are used to estimate nonlinear inertial terms, which disappear as the parameter ϵ goes to zero. Interestingly, it can be observed that only very low regularity (L^∞ regularity) for the function h is required to justify Reynolds approximation. So, the *intuitive* physical usual condition for lubrication approximation, *the small slope assumption*, is not necessary.

This in turn gives a solid basis for using the Reynolds equation to describe the flow in the well known *Rayleigh step bearing* [104] (see Figure 3). Even the junction between a thin film and a cavity (the dimensions of which are of order one with respect to ϵ) can be studied, see [25].

An interesting point, which seems to be always an open problem, takes place in this configuration and summarizes various possible improvements. The point is that, according to the theory, the pressure must be continuous at the point where the junction takes place, but the experimental results in [75] and the results in [6] show a discontinuity. However, a closer view proves that the value of this discontinuity remains proportional to $\epsilon^2 Re$, which reconciles both aspects and leads to two questions: What happens for the thin film behaviour of a flow whose Reynolds number is closed to $1/\epsilon^2$? How to get a supplementary term in the asymptotic expansion of the pressure around a corner where the solution of the Navier-Stokes no longer belongs to H^2 , but only to H^1 ? Combining these two answers, can we expect to recover the experimental results?

To end this section, let us briefly refer to the case of a moving boundary in the initial Navier Stokes problem, which can be linked to a squeezing upper surface, for example. The departure problem is not a classical one as it is posed in a known, time variable domain. In [30], after a change of variables in time and space which leads to a square domain, it is possible to get an asymptotic Reynolds equation in which the time derivative of the pressure no

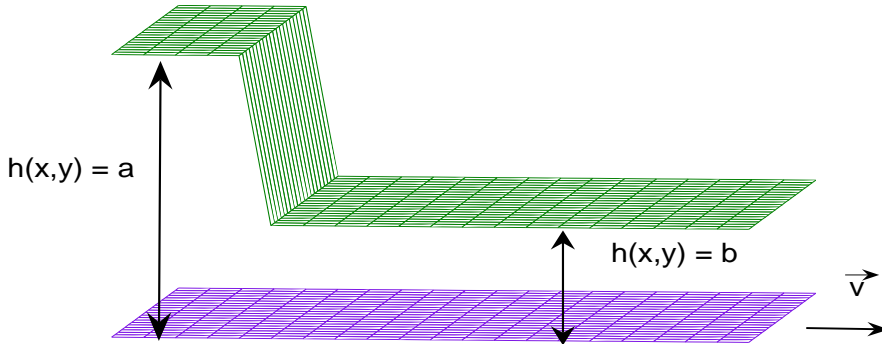


Figure 3: Discontinuous gap corresponding to the Rayleigh step.

longer exists, the time acting only as a parameter. The convergence of the pressure is weaker (in fact, in $L^2(0, T, \mathcal{D}'(\Omega))$) and needs some assumptions on the Reynolds number.

3 Cavitation: free boundary problems in lubrication

Cavitation is one of the most relevant features of lubrication problems. This phenomenon is defined in Dowson-Taylor [86] as the rupture of the continuous fluid film due to the formation of air bubbles inside. The presence of two different regions, the first with a complete fluid film and the second with a partial film (partial lubrication in cavitated area), has been experimentally observed in many lubricated devices such as journal bearings, ball bearings, etc. (see Fig. 4 (right)). This fact makes the Reynolds equation to be no longer valid in the cavitation area. So, the use of cavitation models is needed.

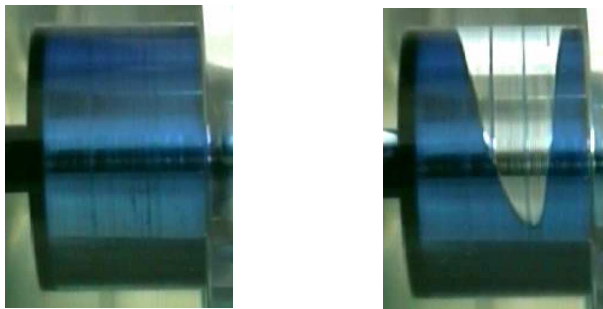


Figure 4: Lubricated device without cavitation (left) and with cavitation (right).

A review concerning the mathematical and physical analysis of the different models is presented in [23]. The common feature of the models lies in the

domain decomposition in two parts: a lubrication region where the Reynolds equation is verified and a cavitation region where the pressure is taken to be a constant (the vapor saturation pressure). The difference between models comes from the condition imposed on the (unknown) free boundary that separates lubricated and cavitated areas. The two most widely used models are the so called Reynolds (or Swift-Stieber) and Elrod-Adams ones.

The fact that the pressure in the full filled area is greater than the (known) saturation pressure induces in a great number of mathematical papers the idea that the theory of variational inequalities could be useful. This idea is reinforced by the fact that initially the most popular numerical method used to cope with cavitation in mechanical engineering, due to Christopherson [78], has been rigorously justified in Cryer [82], by associating it to an obstacle continuous problem (Reynolds cavitation model). Then, for a long time, near all mathematical studies for incompressible Reynolds equation with cavitation deal with such assumption. Qualitative properties of the free boundary have been analyzed [68, 69], specially in the case of small eccentricity in journal bearing devices [66]. More precisely, this model considers as interface conditions

$$p = \frac{\partial p}{\partial \vec{n}} = 0,$$

with \vec{n} being the unitary normal vector to the free boundary. This condition comes from assuming the flux conservation through the interface for the fluxes:

$$\begin{aligned} \vec{Q} &= -\frac{h^3}{\nu} \nabla p + 6(s, 0) h \quad (\text{fluid film region}) \\ \vec{Q} &= 6(s, 0) h \quad (\text{cavitation region}) \end{aligned}$$

and the model can be formulated in terms of a variational inequality (see [118], for example). Equivalently, it admits the following complementarity problem formulation:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial y} \right) \geq 6s \frac{\partial h}{\partial x} \\ &p \geq 0 \\ &\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial y} \right) - 6s \frac{\partial h}{\partial x} \right] \cdot p = 0 \end{aligned}$$

This allows for the use of classical tools of mathematical and numerical analysis in lubrication problems with cavitation.

However, it appears that this model leads to strange results, especially in terms of the flux [20]. While Reynolds equation is conservative, this is not the case for the associated variational inequality and this is especially cumbersome as the value of the output/input flux is of primary interest in terms of cooling in the lubricated devices. Moreover, it implicitly introduces an additional nonphysical constraint: the cavitated region must be contained in the divergent part of the domain, that is where

$$\frac{\partial h}{\partial x} \geq 0.$$

This implicit constraint prevents from the correct modelling of *starvation* phenomena, which are mainly produced at a supply boundary in contact with the convergent part, when the inflow is not enough to complete the film. So, Reynolds cavitation model is not always relevant for a lot of situations. Nevertheless, due to its strong mathematical basis and easy computational approach, it has been widely used as an example for variational inequality studies [109] and most of the mathematical works in lubrication have used this model (see [71, 72, 145], for example) and still continue to use it [123]. However, already in [103], Floberg proposed a new free boundary model, which was not associated to a computational approach. Elrod and Adams proposed in [98] an algorithm dealing with a perturbation approach of a slightly compressible fluid, which opens the way to a lot mechanical studies. The mathematical formulation for such continuous problem appears to be close to the formulation of Brezis-Kinderlehrer-Stampacchia [58] of the dam problem. In some sense, it is also close to a Hele-Shaw problem in which the surfaces are no longer parallel, in relative displacement and with Dirichlet instead of Neumann boundary conditions [18]. More precisely, Elrod and Adams proposed to obtain the interface condition as a conservation law for the flux

$$\vec{Q} = -\frac{h^3}{\nu}\nabla p + 6(s, 0)\theta h,$$

which is now defined in the whole domain. This model assumes that the cavitation region is a fluid-air mixture and the additional unknown θ represents the saturation of fluid in the mixture.

Thus, Reynolds equation with Elrod-Adams cavitation model can be written in the form:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial y} \right) = 6s \frac{\partial \theta h}{\partial x} \quad (9)$$

$$\theta \in H(p) \quad (10)$$

where H denotes the multivalued Heaviside operator. In this way, the points in the fluid region are characterized by $\theta = 1$ and $p > 0$, verifying the Reynolds equation while in the cavitated region $p = 0$ and $\theta \in [0, 1)$ verifies the resulting equation in (9).

Since the appearance of the physically realistic Elrod-Adams model, a lot of effort has been devoted to the rigorous mathematical analysis (existence, uniqueness and regularity of weak solutions) and numerical simulation (with appropriate and justified techniques). This mathematical analysis work starts from the seminal papers of Bayada and Chambat [19, 21], followed by Alvarez and Carrillo [1, 2], Durany and Vázquez [93] and Vázquez [165] concerning stationary problems. The time dependent models have been studied in Carrillo-Álvarez-Díaz, [3], El Alaoui- Bayada [96] or Álvarez-Oujja [4], among others.

In order to summarize some of the ideas concerning the mathematical tools to state existence and uniqueness of solution of Elrod Adams model, let us consider the following variational formulation associated to the boundary

conditions handled in [165] for a journal bearing device:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Find } (p, \theta) \in V \times L^\infty(\Omega) \text{ such that:} \\ \int_{\Omega} h^3 \nabla p \cdot \nabla v = 6\nu_0 s \left(\int_{\Omega} \theta h \frac{\partial v}{\partial x_1} + \int_{\Gamma_0} \theta_* h v \right), \quad \forall v \in V \\ \theta \in H(p) \end{array} \right.$$

where $\Omega = (0, 2\pi) \times (0, 1)$ is the domain associated to a journal bearing device, $\Gamma_0 = (0, 2\pi) \times \{0\}$, $\Gamma = \partial\Omega \setminus \Gamma_0$ and $V = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma} = 0\}$, with the data θ_* satisfying appropriate assumptions. The supply of lubricant takes place at the (left) boundary Γ_0 .

The first step in order to deduce the existence of solution for the above problem is a classical regularization of the multivalued Heaviside operator, which gives rise to the following so called regularized problem:

$$\text{Find } p_\epsilon \in V \text{ such that:} \\ \int_{\Omega} h^3 \nabla p_\epsilon \cdot \nabla v = 6\nu_0 s \left(\int_{\Omega} H_\epsilon(p_\epsilon) h \frac{\partial v}{\partial x_1} + \int_{\Gamma_0} \theta_* h v \right), \quad \forall v \in V$$

In this problem a piecewise Lipschitz function H_ϵ approximates the operator H , the regularization parameter ϵ being small. Next, by using a fixed point argument on the nonlinear term $H_\epsilon(p_\epsilon)$, existence of the solution p_ϵ for the ϵ -dependent regularized problem is deduced. Uniqueness follows from the monotonicity property of p_ϵ with respect to θ_* .

Next, by passing to the limit as ϵ tends to zero, the convergences $\{H_\epsilon(p_\epsilon)\} \rightarrow \theta$ and $\{p_\epsilon\} \rightarrow p$ can be stated, the pair (p, θ) being a solution of the departure problem. Indeed, for a small enough supply saturation θ_* it can be proved that p vanishes at the boundary Γ_0 , as p is upper bounded by the solution of the Reynolds cavitation model which belongs to $H_0^1(\Omega)$.

A tool leading to the uniqueness of the pressure p consists on the complex techniques developed by Carrillo-Chipot [64] for elliptic problems with nonlinear convection terms and also used by Alvarez [1] for a lubrication problem with Dirichlet and periodic boundary conditions modelling a journal bearing device with circumferential supply. Thus, the basic idea in the proof of uniqueness of the pressure p is to obtain the monotonicity of p with respect to the data θ_* , that is assumed to be a Lipschitz function on Γ_0 (in real applications θ_* is a constant parameter).

Also uniqueness for the saturation θ can be obtained.

Moreover, L^∞ estimates for the pressure can be deduced from classical estimates for elliptic variational inequalities [118] and result to be very useful when addressing the mathematical analysis of the piezoviscous hydrodynamic and elasto-hydrodynamic problems.

Numerical methods for solving the Elrod-Adams model for cavitation in different devices and conditions have been presented in [48, 96, 92, 32], for example. These methods are mainly based on the characteristics discretization for the nonlinear convection term and a duality method for the multivalued nonlinear saturation-pressure relation (10). Some numerical approaches [65, 28]

take advantage of the close relation between the Elrod-Adams model and some formulations of the dam problem [129]. In [23, 92] comparisons are made between the operating parameters computed by variational inequality and Elrod-Adams models for journal bearings with different lubricant supply regimes. In Fig. 5, some numerical results taken from [92] illustrate the behaviour of the pressure and the free boundary with respect to the supply parameter θ_* . Moreover, the qualitative property that for small enough values of θ_* the Elrod-Adams model pressure is upper bounded by the Reynolds model pressure is numerically illustrated. The expression of the gap is given by the function:

$$h(x) = 1 + \beta \cos(x),$$

the parameter β being the eccentricity of the journal bearing device. Notice that the isobar marked with zero corresponds to the free boundary separating cavitation and fluid region.

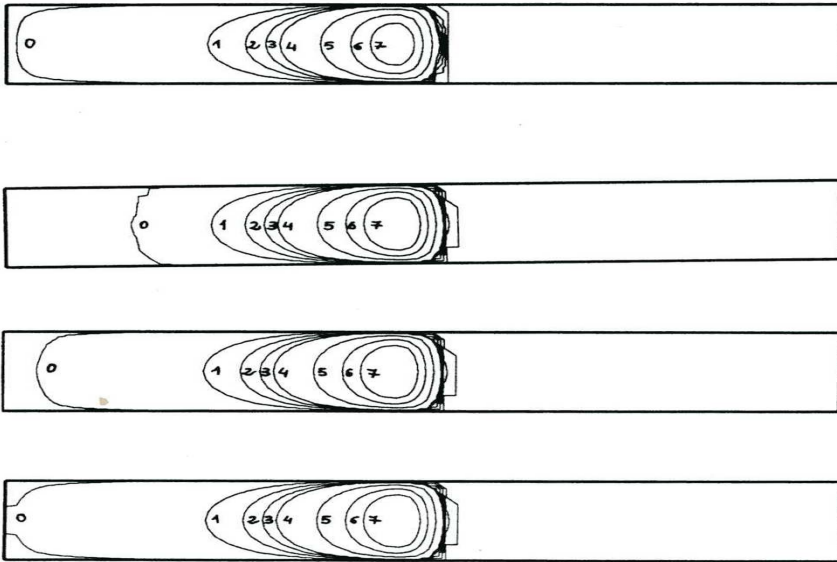


Figure 5: Isobars for $\beta = 0.9$ with the Reynolds (top graphic) and with the Elrod-Adams (three graphics at the bottom) with $\theta_* = 0.6, 0.9$ and 0.95 (from top to bottom).

4 Rough surfaces and homogenization techniques

Surface roughness is a feature which cannot be neglected in numerous applications, as the minimal thickness of the gap can be as small as the order of

magnitude of the roughness (for example, in magnetic reading processes taken place in hard disks or tapes, nanolubrication or rollings). This happens also as soon as operating conditions become very strong so that the gap tends to be close to zero. A pioneer work on the subject is [139], where Patir and Cheng proposed an averaged Reynolds equation, deduced from highly heuristic arguments being the starting point of numerous works. Basically, the idea is to find an equation which retains the shape of Reynolds equation and to multiply the coefficients by some additional functions (the flow factors), which are related to the stochastic characteristics of the roughness pattern. The relations between the flow factors and the roughness parameters are obtained by averaging some calculations related to a kind of local elementary problem on a miniature representative device. Although being widely discussed, results of this kind have been very often used in the tribological literature [164, 124, 119]. For example, the *volume average method* introduced by Whitaker [166] has been also applied to justify this approach and to generalize it to self affine roughness [140].

The introduction of periodic roughness can be viewed both as the consequence of a manufacturing process and as a deliberate choice for improving operational characteristics, such as feeding or friction for example. Assuming periodic roughness, it has been possible to justify an averaged Reynolds equation in a rigorous way either by double scale analysis or more classical homogenization procedures. A relevant motivation of the interest in homogenized models lies in their numerical simulation. The idea is that well-justified homogenized models do not require extremely fine meshes to compute the involved physical magnitudes as it is the case when solving the small parameter dependent problem. In Fig. 6 can be observed an example of a highly oscillating pressure distribution in the case of rough surfaces.

From the mathematical viewpoint, the inclusion of roughness gives rise to highly oscillating coefficients in Reynolds equation. More precisely, the gap function takes the form

$$h_\delta(x) = h_0(x) + h_1\left(\frac{x}{\delta}\right), \quad x = (x_1, x_2), \quad (11)$$

where δ is a small parameter and $h_1 \in C^0(Y)$ and is Y -periodic (Y is the periodic cell; see Fig. 7). This deterministic approach has been extended to the variational inequality model of cavitation, to elasto-hydrodynamic problems and to the compressible air lubrication equations, both stationary and instationary. If the roughness takes place on both surfaces in relative motion, then the basic lubrication problem is not only to be homogenized in space but also in time. One can then appreciate the differences of behaviour of devices with two sides roughness, roughness on a fixed surface and roughness on a moving one [36]. The homogenization of the stationary variational inequality model for cavitation, also coupled with an elastic rod model, has been carried out in [35]. More recently, a first attempt to study the homogenization of Elrod-Adams model has been done in [42].

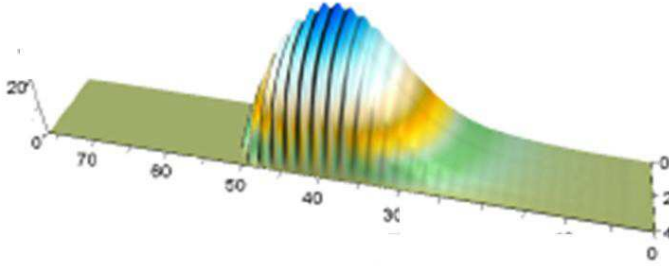


Figure 6: Example of pressure distribution for surfaces with periodic roughness.

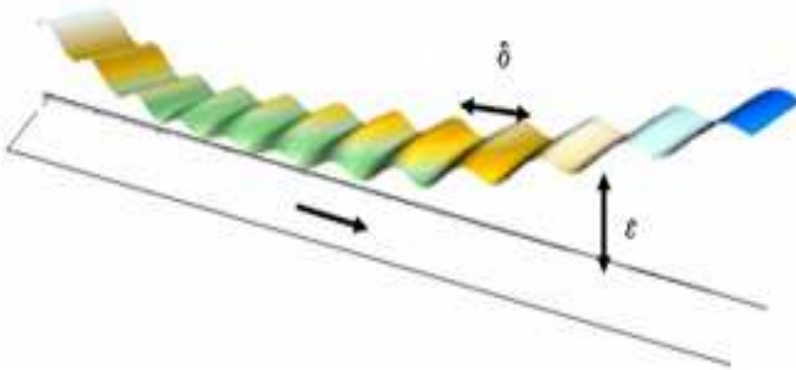


Figure 7: Example of surface with periodic roughness.

In order to illustrate the rough case, let us state the variational formulation of the latter problem studied in [42]:

$$(\mathcal{P}_\delta) \begin{cases} \text{Find } (p_\delta, \theta_\delta) \in V_a \times L^\infty(\Omega) \text{ such that} \\ \int_\Omega h_\delta^3 \nabla p_\delta \cdot \nabla v \, dx = 6\nu_0 s \int_\Omega \theta_\delta h_\delta \frac{\partial v}{\partial x_1} \, dx \quad \forall v \in V_0, \\ p_\delta \geq 0, \quad H(p_\delta) \leq \theta_\delta \leq 1 \quad \text{a.e. in } \Omega, \end{cases}$$

where $\Omega = (0, 2\pi) \times (0, 1)$ is the domain associated to a journal bearing device, $\Gamma_0 = (0, 2\pi) \times \{0\}$, $\Gamma_a = (0, 2\pi) \times \{1\}$, $p_a > 0$, H denotes the multivalued Heaviside operator and the involved spaces are the following:

$$\begin{aligned} V_a &= \left\{ v \in H^1(\Omega), v \text{ is } 2\pi x_1\text{-periodic} : v|_{\Gamma_0} = 0, v|_{\Gamma_a} = p_a \right\}, \\ V_0 &= \left\{ v \in H^1(\Omega), v \text{ is } 2\pi x_1\text{-periodic} : v|_{\Gamma_0} = 0, v|_{\Gamma_a} = 0 \right\}. \end{aligned}$$

The main purpose is to study the behaviour of problem (\mathcal{P}_δ) as δ tends to 0 (the homogenized problem). Thus, the homogenized problem for (\mathcal{P}_δ) can be written as follows [42]:

$$(\mathcal{P}^*) \left\{ \begin{array}{l} \text{Find } (p_0, \Xi_1, \Xi_2) \in V_a \times L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega) \text{ such that} \\ \int_{\Omega} \mathcal{A} \cdot \nabla p_0 \nabla \phi = 6\nu_0 s \int_{\Omega} \underline{b}^0 \nabla \phi \quad \forall \phi \in V_0, \\ p_0 \geq 0, \quad p_0 \cdot (1 - \Xi_i) = 0, \quad (i = 1, 2) \quad \text{a.e. in } \Omega, \end{array} \right.$$

with $\mathcal{A} = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* \end{pmatrix}$, $\underline{b}^0 = \begin{pmatrix} \Xi_1 b_1^* \\ \Xi_2 b_2^* \end{pmatrix}$, the coefficients a_{ij}^* and b_i^* being functions of p_0 and obtained by solving associated local problems.

In the previous setting, there exists a homogenized pressure p_0 (in fact, p_0 is the two-scale limit of $\{p_\delta\}$) and two saturation functions, Ξ_1 and Ξ_2 , such that (p_0, Ξ_1, Ξ_2) is a solution of the homogenized problem, (\mathcal{P}^*) . The solution of the homogenized problem is not trivial, since we are unable to prove that the two saturation functions belong to $[0, 1]$ in cavitated areas. In [42], also appropriate numerical methods have been developed to illustrate the theoretical results of convergence and the advantages when using the homogenized models.

However, up to now, the homogenization of a Elrod-Adams cavitation model is not completely satisfactory. The main difficulty comes from the behaviour of the saturation function θ as the roughness period tends to zero. Contrary to the pressure, the amplitude of the oscillations in saturation does not vanish (see Fig. 8). A full description of the averaged problem can only be obtained in some particular cases (for example, for one-dimensional roughness). Nevertheless, the general structure of the homogenized problem is not completely clear. It is proved in [42] that the homogenized problem possesses a particular solution (p_0, Ξ, Ξ) with an isotropic saturation Ξ belonging to $[0, 1]$ (in fact, $H(p_0) \leq \Xi \leq 1$). Then, to be able to prove uniqueness is an important challenge problem. Another challenge in this field is to be able to compute the corrector term. Homogenization makes disappear micro inter asperity cavitation [149]. It is relevant for engineers to have a good approximation of the real pressure gradient, which is important around the boundary of the cavitation areas. The knowledge of this gradient allows designers to compute the stresses applied to the surface which are directly related to the reliability of the devices.

5 Generalized Reynolds equation

From the classical basic Reynolds equation as a starting point (eventually coupled with cavitation and/or roughness modelling), a lot of generalizations can be found in the literature. Most often, they are obtained by relaxing the assumptions introduced in the process leading from Stokes to Reynolds that has

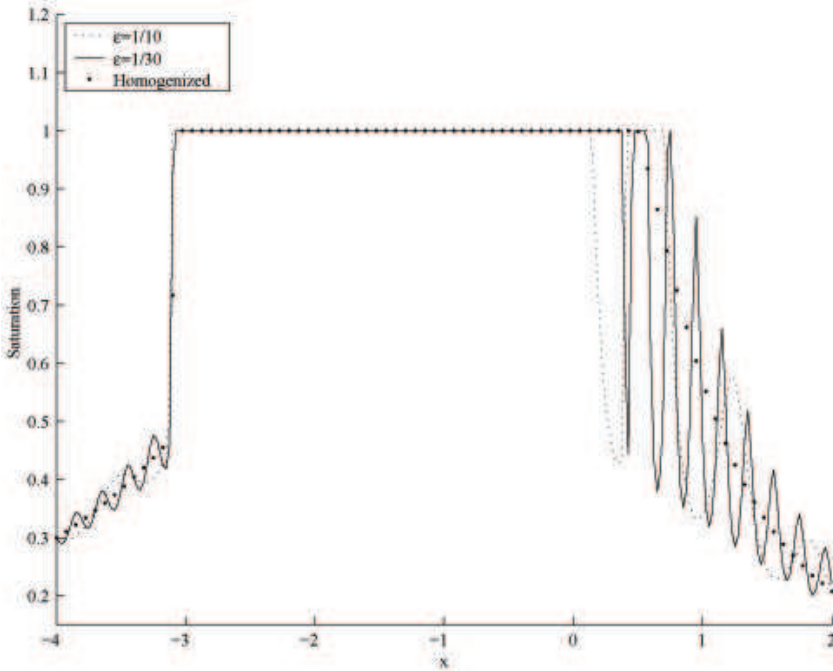


Figure 8: Computed saturation associated to a rough surface contact

been described in Section 2, as they are not always valid in real applications. Let us enumerate some of the possible generalized equations:

1. In some cases, experimental measurements show that lubricant viscosity is not always constant and depends on the pressure (piezoviscous regime). Although several constitutive laws have been adjusted in the literature, the most usual viscosity-pressure relation in lubricants is Barus law, which can be written as

$$\nu(p) = \nu_0 e^{\alpha p},$$

where ν_0 and α are piezoviscosity constant coefficients. In the roughless case, the existence and uniqueness of solution for the associated Elrod-Adams model have been obtained in [93, 165] for different boundary conditions.

More general laws can be considered as those ones in [12]. So far, they seem to fall into the scope of the works [145, 45] concerning elastohydrodynamic problems as far as the existence proof is concerned with.

2. In other cases, mainly in gas lubricated devices, the density depends on the pressure (compressible regime). The most usual relation can be written

in the form

$$\rho(p) = \rho_0 + \xi p,$$

where ρ_0 is a positive constant and ξ is a small parameter, in the case of a slightly compressible fluid, and as

$$\rho(p) = p,$$

for the air.

3. In many lubricated devices, the high pressure values can deform the surfaces in contact (elastohydrodynamic regime). In such cases a pressure-gap relation has to be introduced. For example, in the case of point or linear contacts, Hertz theory for dry contacts [163, 153] is extended to provide nonlocal relations as

$$h(p)(x_1, x_2) = h_0(x_1, x_2) + \int_{\Omega} k(x_1, x_2, y_1, y_2) p(y_1, y_2) dy_1 dy_2. \quad (12)$$

These various aspects are simply taken into account by plugging into Reynolds equation these new relations. Consequently, this leads to a wide set of nonlinear equations which retain the general structure of the basic Reynolds equation.

As a first illustrative example, we can consider the following variational formulation of an elastohydrodynamic problem which is nonlinear and nonlocal:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Find } (p, \theta) \in V \times L^\infty(\Omega) \text{ such that:} \\ \int_{\Omega} h^3(p) e^{-\alpha p} \nabla p \cdot \nabla v = 6\nu_0 s \left(\int_{\Omega} \theta h(p) \frac{\partial v}{\partial x_1} + \int_{\Gamma_0} \theta_* h(p) v \right), \quad \forall v \in V \\ p \geq 0, \quad p(1 - \theta) = 0, \quad 0 \leq \theta \leq 1 \quad \text{a.e. in } \Omega \end{array} \right.$$

where $V = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma} = 0\}$, with the data θ_* satisfying appropriate assumptions. The previous problem models a ball bearing contact that is lubricated by a piezoviscous fluid (see Figure 9). The supply of lubricant takes place at the (left) boundary Γ_0 and Elrod-Adams is used for cavitation.

In some sense, elastohydrodynamic equations (like the previous one) are now being used as a primary tool in a lot of software applications to simulate lubricated devices. Existence results have been given in [137] for variational inequality cavitation models and in [40, 88] associated to the above considered Elrod-Adams model. These results have been mainly obtained by fixed point procedures, regularization techniques and L^∞ estimates. Moreover, small data assumptions are required. These assumptions have been recently relaxed in [14]. In the recent paper [43], for the case of rough surfaces, an appropriate homogenized problem is rigorously justified by means of periodic unfolding techniques.

We must also mention that non Newtonian effects must be often associated to elastohydrodynamic problems. Indeed, it is known that under high loading,

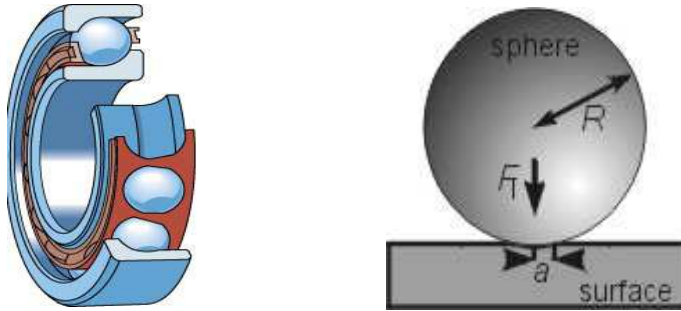


Figure 9: Schematic of a one row ball bearing device (left) and a sphere-plane contact (right).

the non Newtonian characteristics of the lubricant are useful and induce qualitatively new behaviours. As an example, a multilayer fluid model including interfacial slip has been proposed in [94] by taking the viscosity incorporating shear rate to exhibit shear thinning effects.

From the numerical viewpoint, solving the previous elastohydrodynamic problem for real operating conditions is difficult, especially if the piezoviscosity coefficient is not small. In high pressure areas, the left hand side of the equation becomes negligible and the deformed surface has a flat shape. Typically, a pressure spike appears at the outlet region. The general opinion is that this spike can become a singularity under strong operating conditions, which is not unreasonable in view of the present mathematical results [14]. Nowadays, most popular methods for solving such problem seem to be based on a multigrid approach using finite difference and regular meshes (see [126] for details). In particular, this allows for developing specific algorithms for computing the integral term. Also, numerical methods based on characteristics combined with duality methods for the hydrodynamic problem and appropriate numerical quadrature for the nonlocal term have been applied in [89]. Furthermore, these methods can be successfully improved in terms of computational cost by adapting them to high performance computer architectures [5]. Recently, discontinuous Galerkin finite element approach has also been applied and seems to be efficient [125].

Next, as another illustrative example, let us consider the compressible Reynolds equations.

Several current technologies involve lubrication flows of gases with ultra-thin gap thicknesses of a few nanometers. Typical examples are rigid disks or tapes used for magnetic storage devices and micromechanisms such as silicon accelerometers (see Fig. 10). Models for these flows are necessarily based on the kinetic theory of gases, so as to account for compressibility and rarefaction effects. Such models are described, for example, by using the following *first order slip* compressible Reynolds model:

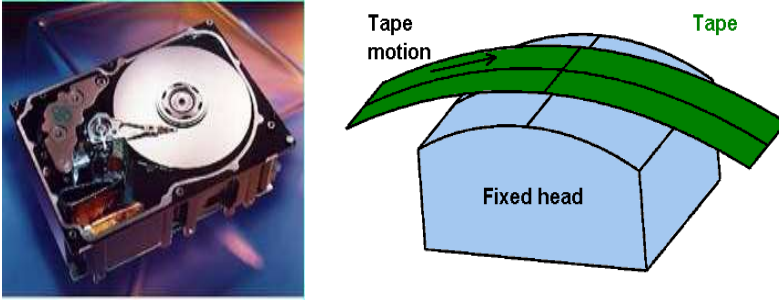


Figure 10: Real hard disk device (left) and head-tape device sketch (right).

Find $p \in V_a$ such that:

$$\int_{\Omega} (\alpha h^2 \nabla p + h^3 p \nabla p) \cdot \nabla \varphi = 6\nu_0 s \int_{\Omega} h p \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \varphi \quad \forall \varphi \in V_0, \quad (13)$$

where

$$V_a = \{ \varphi \in H^1(\Omega) : \varphi = p_a \text{ on } \partial\Omega \} \text{ and } V_0 = \{ \varphi \in H^1(\Omega) : \varphi = 0 \text{ on } \partial\Omega_h \}.$$

The differential version of the variational formulation (13) seems to appear firstly in the mathematical literature in a paper of Di Prima in 1968 [83], where he points out the boundary phenomena appearing for high values of the involved parameters. Nowadays, this problem is very interesting, as this number is always increasing in recent applications. Contrary to the classical Reynolds equation, compressible Reynolds model presents a nonlinear diffusive term. By changing the unknown, $u = p^2$, first results about existence and uniqueness are obtained in [77, 76]. An interesting property relies on the possibility to find a maximum principle so implying that cavitation would not be possible. Recent works about (13) are linked to the possibility of diminishing the regularity of the gap function in order to prove some existence theorem [113]. In [156], this regularity of the pressure is analyzed both for the compressible and incompressible 2-D Reynolds equations in the case of a Rayleigh step geometry (as the one in Fig. 3). More precisely, $W^{1,\infty}$ regularity is stated. More recently, in [157] a nonlinear problem modelling the tape deflection in a magnetic head profile is studied.

Let us now mention one of the most popular compressible models, the Fukui-Kaneko model [107], which is governed by the equations

$$\begin{cases} \nabla \cdot (h^2 (Q(h p) \nabla p)) = \nabla \cdot (\Lambda h p) & \text{in } \Omega, \\ p = p_a & \text{on } \partial\Omega, \end{cases} \quad (14)$$

where Q is a continuous positive function such that $Q(z) \rightarrow \infty$ as $z \rightarrow 0$. Along the years, effective numerical methods have been proposed to deal with the resulting equations (e.g. [167]) and they have been applied to static and dynamic analysis and more recently incorporated into optimal-design methodologies.

Modern (lithographic) fabrication technologies add another mathematical difficulty which is not considered in the previous analysis of the Reynolds equation [76, 77, 74, 127]: the gap thickness is *discontinuous* in practise. The purpose of [61] was then to bridge the gap between theory and state-of-the-art applications in the area of rarefied compressible lubrication problems. For this purpose, it is shown that (14) leads to well-posed problems in what concerns existence, uniqueness and positivity of solutions. The main difficulty comes from the divergence of the coefficients as p tends to either zero or $+\infty$. In [62], the well-posedness of a wide family of nonlinear models is stated, including the continuum, the first and second order slip and the Fukui-Kaneko compressible models.

Furthermore, periodic roughness can be introduced in surfaces and the nonlinearity in the diffusive term induces supplementary difficulties in the homogenization procedure. Two-scale analysis reveals to be a good tool for such problem [112, 74].

Finally, let us mention that instationary effects have to be introduced in some practical applications [113]; contrary to the incompressible case, the time derivative of the pressure exists.

6 Coupling Reynolds with other PDE models

In this section we just mention some examples of problems that are posed in terms of a coupled system of PDE's, one of them being a Reynolds-like equation. The first example can be obtained in the framework of the mathematical modelling of flexible storage devices. In these cases, a compressible Reynolds equation (as those quoted in the previous section) is coupled with an appropriate elastic model in order to take into account the possible deformation of the flexible storage device (for example, in head tape devices [105, 106]). In [7], a coupled model between a 1-D first-order slip compressible Reynolds equation and a linear rod equation is used for the case of wide enough tapes, the mathematical analysis of which is performed in [105]. For not enough wide tapes, two spatial dimensions have to be considered, so that in [67, 9] a coupled model between a first order slip Reynolds equation and a Koiter model is proposed, mathematically analyzed and numerically solved. More precisely, the problem is posed as follows [67, 9]:

Find $(p, \vec{u}) \in V_a \times W(\Omega_e)$ such that:

$$\int_{\Omega_h} (\gamma(h_r + u_3)^2 + (h_r + u_3)^3 p) \nabla p \nabla \varphi = 6\eta_a V \int_{\Omega_h} (h_r + u_3) p \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \quad \forall \varphi \in V_0$$

$$\int_{\Omega_e} R^M \gamma_t(\vec{u}) \gamma_t(\vec{v}) \sqrt{g} + \int_{\Omega_e} R^F \rho(\vec{u}) \rho(\vec{v}) \sqrt{g} = \int_{\Omega_e} (\tilde{p} - p_a) v_3 \sqrt{g} \quad \forall \vec{v} \in W(\Omega_e),$$

where

$$V_a = \{ \varphi \in H^1(\Omega_h) : \varphi = p_a \text{ on } \partial\Omega_h \}, \quad V_0 = \{ \varphi \in H^1(\Omega_h) : \varphi = 0 \text{ on } \partial\Omega_h \},$$

$$V_t^* = \{v_t = v^\alpha \vec{a}_\alpha : v^\alpha \in H^1(\Omega_e), v^\alpha = v_{,\beta}^\alpha = 0 \text{ on } \Gamma_1 \cup \Gamma_2\},$$

$$V_3^* = \{v \in H^2(\Omega_e) : v = v_{,\beta} = 0 \text{ on } \Gamma_1 \cup \Gamma_2\}, W(\Omega_e) = V_t^* \times V_3^*$$

The domains of the elastic and hydrodynamic problems are given by Ω_e and Ω_h , respectively. In this case, the main unknowns are the air pressure p over the head and the tape displacement \vec{u} .

Besides the gaz bearing case, some mathematical models for the lubrication of elastic surfaces can be considered as coupled systems including incompressible Reynolds equations and appropriate elastic equations. For example, in [72] the mathematical analysis of a model where the Reynolds equation is coupled with a plate equation governed by a biharmonic operator, which provides the elastic deformation of a thin pad bearing. Furthermore, cavitation is taken into account by means of a variational inequality formulation. This model is extended for a journal bearing device when Elrod-Adams cavitation is used in isoviscous and piezoviscous regimes in [37] and [90], respectively. A more appropriate coupled problem that incorporates the curvature effects by means of a Koiter model for the thin bearing deformation is proposed in [10] and mathematically analyzed in [8]. The problem is posed as follows:

Find $(p, \theta, \vec{u}) \in V_a \times L^\infty(\Omega) \times W(\tilde{\Omega})$ such that:

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (h_r + u_3)^3 \nabla p \nabla \varphi = 12\nu_f s \int_{\Omega} (h_r + u_3) \theta \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} & \forall \varphi \in V_0, \\ \theta \in H(p) \text{ in } \Omega, \\ \int_{\tilde{\Omega}} R^M \gamma_t(\vec{u}) \gamma_t(\vec{v}) \sqrt{g} + \int_{\tilde{\Omega}} R^F \rho(\vec{u}) \rho(\vec{v}) \sqrt{g} = \int_{\tilde{\Omega}} \tilde{p} v_3 \sqrt{g} & \forall \vec{v} \in W(\tilde{\Omega}), \end{cases}$$

where now $\tilde{\Omega}$ and Ω denote the domains for the elastic and hydrodynamic problems, respectively. In this case the main unknowns are the fluid pressure p , the saturation of lubricant θ and the bearing displacement \vec{u} . In lower spatial dimensions, the coupling with different rod models has been considered in [34].

Since in this review we have restricted our considerations to the isothermal regime, we do not include in this section the thermo-hydrodynamic and thermo-elasto-hydrodynamic coupled problems and their related literature.

7 From Stokes to Reynolds revisited. New Stokes model problems

In the three preceding sections, we have accepted equation (8) despite the fact that the supporting assumptions are no longer valid in some applications. So, a natural question is to try to generalize the techniques described in Section 2 for more general settings.

7.1 Cavitation

We have already said that cavitation is a complex phenomenon. It can be viewed as a "...*disruption of what would be otherwise a continuous liquid phase...*",

as defined in [86] and illustrated in Fig. 4. Recently, it has been proved that the existence of a lower bound for the pressure allows to control the smoothness of the 3-D Navier-Stokes solution [148], so linking in some sense cavitation effects and the singularity of the solution. Due to its importance in lubrication, cavitation has been the subject of numerous experimental and theoretical approaches with the aim of understanding it in its 3-D characteristic and to find how to model it in the thin film case. The model initially proposed by Lundholm [128] and then rewritten in Elrod-Adams [98] has the advantage to be easily explained in terms of continuity of averaged flux through the gap and has induced a lot of computational studies. However, it lacks of any justification in terms of local physics and the discontinuity of the saturation (which often appears) is not clearly understood. A model proposed in Coyne-Elrod [81] for the description of the free boundary between a fluid and a bubble of air, including the curvature, was so complicated that it seems it has never been used.

Recently, an attempt to obtain 2-D cavitation models directly has been carried out in [138] by using a multifluid approach. A limit system, governed by a generalized 1-D Buckley-Leverett equation for the relative saturation between fluids θ and a generalized Reynolds equation with saturation dependent coefficients for the pressure p is deduced by an asymptotic technique. More precisely, the system of equations which has been obtained in [44] can be written in the form:

$$\frac{\partial}{\partial t}(h\theta) + \frac{\partial}{\partial t}(Qf(\theta) + shg(\theta)) = 0 \quad \text{in } (0, +\infty) \times (0, L), \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(A(\theta) \frac{h^3}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) = 6s \frac{\partial B(\theta)h}{\partial x} \quad \text{in } (0, +\infty) \times (0, L), \quad (16)$$

together with appropriate initial and boundary conditions. The data are the gap $h = h(x)$, the inflow $Q = Q(t)$ and the velocity s . The expressions of the functions f, g, A and B are provided in [44], where this model is mathematically analyzed to state the existence, regularity and uniqueness of solution. Notice that (15)-(16) is a difficult non autonomous system posed on bounded domain. Moreover, appropriate numerical methods allow for the comparison with the solution provided by the corresponding Elrod-Adams model, showing very close results for models with a very different motivation, thus emphasizing the validity of Elrod-Adams one. The numerical results show that the saturation function of the Elrod-Adams model can be approximated in a satisfactory way by the solution of (15) as the mobility coefficient (the ratio between the viscosity of the two fluids) tends to zero. In particular, the discontinuity of the saturation at the end of the cavitation area is well reproduced as a shock. However, the pressure, which solves (16), is somewhat different from the pressure obtained by the Elrod-Adams model. This is primary due to the no-slip condition which avoids that one of the fluids fills the gap completely. It can be thought that introducing other physical effects in the initial 3-D model (compressibility, slip effects, thermodynamical change of phases conditions, etc.) could improve the results.

7.2 Roughness

In [24] a starting point full 3-D Stokes problem with periodic roughness is considered to pass to the limit and obtain a Reynolds type model. Obviously, two small parameters exist in the departure problem: the period of the roughness μ and the gap order parameter ϵ . It can be proved that the order in which we pass to the limit in these two parameters has some importance. For different ratios between both small parameters, homogenization techniques allow to obtain various thin film equations. It is possible to distinguish three situations: the case $\epsilon \ll \mu$, the case $\mu \ll \epsilon$ and the case $\mu = O(\epsilon)$. In the three situations, it is possible to find a kind of asymptotic equation and it is only in the first case that (8) is recovered. This in turn gives the limit of validity of equation (8) and the existence of a critical ratio between small parameters that can provide interesting data for engineering. The most general situation arises when we make simultaneously ϵ and μ tend to zero with the constant ratio $\lambda = \epsilon/\mu$. The limit equation is then a Reynolds-like equation with coefficients that are functions of λ . Then, making λ tend to zero allows us to recover the equation obtained by letting ϵ and then μ tend to zero from Stokes equation. Conversely, letting λ tend to infinity is equivalent to let μ and then ϵ tend to zero. So far, we are mostly interested in the behaviour of the pressure. Another operating parameter is the friction, which is defined as

$$F = \frac{h}{2} \nabla p + \frac{\nu s}{h}.$$

Quite surprisingly, studying the behaviour of the friction F in rough surfaces as a function of ϵ and μ , another subcritical ratio appears; see [46].

7.3 Coupled elastohydrodynamic problems

The rigorous justification via asymptotic expansion of the elastohydrodynamic models governed by a PDE system including a Reynolds-like equation is an old open problem. The idea is to develop procedures analogous to these in [22, 135] in order to justify the asymptotic models as limits of departure coupled problems for the (Navier-)Stokes and elastic models. In the elastic part, either pure 3-D models or asymptotic 2-D models can be used. For example, in [29] a nonhomogeneous Stokes-rod problem is posed, which could be used as a departure model to pass to the limit in the fluid thin film domain and deduce an asymptotic coupled model. In this sense, fluid-structure interaction problems are at the origin of elastohydrodynamic lubrication modelling. Furthermore, when the starting problem consists of two purely 3-D models, two small parameters are involved, associated to the fluid thin film and the thin structure.

The case of Reynolds-Hertz model (12) is somewhat different as the Hertz approximation itself is not rigorously established yet. The half-space Hertz approximation models the answer of an elastic solid locally submitted to a normal stress, which in the elastohydrodynamic regime is nothing else than the hydrodynamic pressure. Thus, there are two geometrical parameters for the

elastic problem (one is large and the other is small) and another parameter for the hydrodynamic part. So, although widely accepted in the mechanical engineering domain, this elastohydrodynamic model has still to be rigorously established.

7.4 Porous bearings

Let us briefly describe another device in which geometrical small parameters competition is of great importance. Some lubricated bearings have a porous part which acts as a *reservoir* of lubricant (see Fig. 11). The full 3-D system description makes appear, jointly with the small gap parameter ϵ , another small parameter ν which is the period of the microstructure of the porous media. In this setting, also a rigorous study of the limit of the system as both ϵ and ν tend to zero makes appear a critical ratio $\nu/(\epsilon^{3/2})$; see [27]. This ratio has been found by considering that the flow coming from the porous part is of the same order of the free flow. The obtained problem is close to a Ventcel system [120], with the 2-D Reynolds equation acting as a boundary condition for a 3-D Darcy problem. Interestingly, this ratio is very closed to the one for which such bearings work in real situations. Another aspect of this problem is to view it as a fissure through a porous media, widely studied in the literature [121].

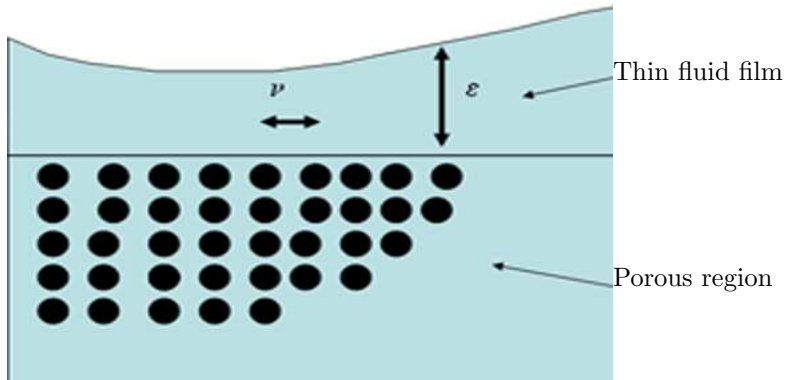


Figure 11: Schematic of a porous bearing.

7.5 Non Newtonian and non classical fluids

Such situations with two (or more) small parameters can be found also when dealing with non Newtonian fluids (micropolar, viscoelastic, etc.). For thin film lubrication, the usual assumption of a linear relationship between shear stress and shear strain may fail, due to the additives contained in the lubricant and to the very severe operating conditions. This is a wide field of interest in the mechanical literature as it is difficult to rigorously obtain behaviour laws which are applicable in real situations. Near all models for non Newtonian

flows can be associated to a thin film asymptotic lubrication model. These non Newtonian models are most often depending on some rheological parameters, the dependence of which with respect to ϵ is nearly always an important feature in the formal or rigorous asymptotic procedure.

In view of their mathematical formulation, micropolar fluids are perhaps the closest to Newtonian ones. They model flows in which there is a lot of small rigid particles. An additional field (the micro-rotation) together with a supplementary equation is added to the Stokes system [101]. A new additional parameter, the characteristic length of the micro-rotation effects, is introduced and has to be compared with the gap parameter ϵ so leading to define a critical ratio involving these two parameters. One of the first studies concerning micropolar lubrication appears in Prakash-Sinha [141], where a modified Reynolds equation is introduced. The related mathematical proof has been given in [41]. For practical purposes, the main difficulty lies in the statement of the boundary condition to be satisfied by the micro-rotation field at the fluid-solid interface. Although assuming homogeneous boundary conditions is the common use, a more realistic physical situation by assuming a *boundary viscosity effect* condition can be introduced [49] and naturally leads to a slip condition on this interface [16]. Other situations have been considered in [31].

Another class of problems for which the asymptotic procedures are mathematically well described include quasi-Newtonian fluids (Carreau's law, power law, Willamson's law), in which various stress-velocity relations are chosen [56, 133, 52, 59, 155].

A wide class of viscoelastic fluids is provided by Olroyd-B model, based upon a constitutive equation which is an interpolation between purely elastic and purely viscous behaviours, thus introducing a supplementary parameter describing the relative proportion of both behaviours (i.e., the solvent to solute ratio). From mathematical aspects, few results exist concerning these models and the way how to obtain thin film approximations is highly heuristic, mainly depending on the order of the magnitude of the Deborah number with respect to the gap parameter ϵ , and on the assumed estimates for the stress tensor components [160, 168, 33]. The same problem exists when trying to gain the thin film approximation for a second order flow [57, 147, 111].

Finally, in order to summarize this section, let us point out the problems of two new kinds appearing here:

In some cases, it is impossible to uncouple pressure and velocity as for a Bingham fluid, so that new numerical approaches are needed to solve such systems. In this sense, the method of reduction of dimension proposed in [144] could be handled.

The primary unknown is not always the pressure but the normal stress. If the normal stress does not vary through the gap, this is no longer the case of the pressure and the question is how to deal with the boundary conditions associated to the cavitation problem. Boundary conditions could also be discussed [147, 161].

So far in this section, the departure 3-D models were mathematically well posed and difficulties are mainly related to the asymptotic thin film procedure. However, in some other cases which cover a wide range of practical applications (see also Section 10), the departure equations are not always well posed or things are not always so easy. Thus, in some important cases, the starting point of the pass to the limit procedure is unclear or we do not have sufficient mathematical properties to perform it. For example, only recently it has been possible to justify the gas Reynolds equation for a full compressible flow [130], by starting from a compressible Stokes equation whose existence and uniqueness has been recently obtained in [122]. In the piezoviscous regime setting, in the recent paper of [142] new terms appear in the heuristic procedure to obtain a Reynolds-like equation. Furthermore, existence results for Stokes problem including an exponential viscosity-pressure relation do not exist despite the new results in [108].

7.6 Fluid-solid interface conditions

Another not so well known free boundary problems around Reynolds equation are associated to the possibility of slippage at the fluid-solid interface. This problem is widely discussed and it is of primary importance for non Newtonian lubricants and in micro-nano lubrication [114]. Assuming a full slippage does not really change the shape of the corresponding Reynolds equation. However, introducing friction conditions at the fluid-solid interface, as the Coulomb or Tresca conditions between two solids, allow the fluid to slip only if the tangential stresses are greater than the (normal) pressure, so defining various areas (and a new free boundary) at the surface of the device. This behavior can be relatively easily taken into account numerically by a fixed point approach. For specific data, Strozzi in [152] gives an existence theorem for 1-D Reynolds equation with Tresca boundary conditions.

However, as in the preceding section, the final goal should be to recover such formulation from the Stokes problem and not only from the Reynolds one. In that sense, a starting point is the paper of Consiglieri [80], which gives a weak formulation for a non Newtonian problem with Coulomb friction at the fluid-solid interface. It appears that it is possible to pass to the limit (when ϵ tends to zero) from this formulation both for Signorini and Tresca laws [17]. The limit problem has not a very clear structure. A second kind variational inequality using div-curl decomposition allows us to recover the actual velocity, then pressure and stresses are obtained in a second step. In the one-dimensional case and for Neuman boundary conditions, it is possible to state the problem in terms of stress only, so arising the upper bound for the tangential stresses in a natural way. Let us mention that an important ingredient in the proof of convergence in Section 2, namely the Poincare inequality, cannot be always applied if a no-slip boundary condition is not used at the top or the bottom of the fluid-solid interface. In that case, a specific inequality has to be introduced to cope with this difficulty [55]. Various generalizations of these works can be found in [54, 51, 53]. In some of them, classical H^1-L^2 regularity of the solution

of Stokes system is not enough and supplementary regularity is needed.

Slippage effects are not the only phenomena which can occur at the fluid-solid interface. At a few nanometers scale, chemical reactions between the elements of the solid and those of the the fluid may induce a (relatively) thin layer of a mixture which can modify the overall behaviour of the device. Basically, two modelling arguments have been proposed to cope with this situation. In the first one [158], various layers of fluid with different viscosities are introduced. In the second one [159], the layer close to the surface has been considered as a porous media. Related mathematical analysis can be found in [154] for the first case, while in [15] the second situation has been studied as a two small parameters problem: the gap and the period of the microstructure of the porous media. In some sense, this is the same situation described in Section 7.5, the difference being that the porous part is now thin. A critical ratio between these two parameters has been found for which the influence of both media are balanced. This rigorous analysis evidences the fact that boundary conditions between the thin porous media and the thin film assumed in practice are not recovered, so that the obtained Reynolds equation is not exactly the same as the one in [159].

8 The inverse problem

8.1 Basic problem

So far, all previously presented mathematical studies deal with imposed geometry in the associated Reynolds equation, i.e. the gap function h is a given data and the main unknown is the pressure. Looking at engineering applications papers, it seems that most interesting real problems are mathematically completely different: the gap h is partially unknown and the data is a function of the pressure. So, we are led to consider Reynolds equation as a state-like equation with some unknown parameters in the gap as a control. The simplest problem (one degree of freedom in the control) can be posed as follows: let h_0 be a given function (the shape of a rigid gap); then find a (control) parameter a such that the pressure p is a solution of the Reynolds equation with a gap function $h = h_0 + a > 0$ that balances a given load $\vec{W} = (0, 0, -W)$, i.e. such that p verifies the nonlocal constraint

$$W = \int_{\Omega} p.$$

That is, for a given constant W and a given function h_0 , the problem can be posed as follows:

Find a and p such that:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{h^3}{\nu} \frac{\partial p}{\partial y} \right) &= 6s \frac{\partial h}{\partial x}, \\ h &= h_0 + a > 0, \\ \int_{\Omega} p &= W. \end{aligned}$$

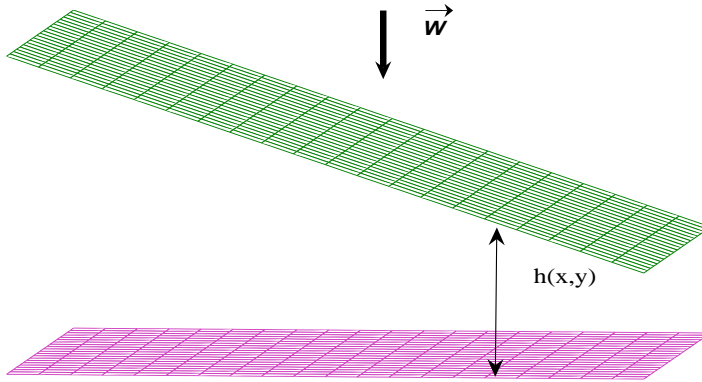


Figure 12: Example of a lubricated slider bearing under imposed load \vec{W} .

One can think about a slider bearing (or a ball bearing) and a vertically applied load to its upper surface, as it is shown in Fig. 12. As the load increases, it seems natural that the control parameter a decreases, until the corresponding increasing of the pressure allows its integral value to reach the given load modulus W .

Notice that even for this elementary case, the answer is not obvious. In fact, it depends on the shape of h_0 around its minimum. It can be proved that either there exists a (critical) value of a that is able to balance any load or there is a limit load W_{max} such that the device cannot support any greater load. The proof is mainly based on the study of the degenerate Reynolds equation as one coefficient tends to zero [110].

One has to have in mind why this problem is crucial in applications. The lubricated device is submitted to external forces and one has to guarantee that it can support these forces without danger. The criteria of safety is that the lubricant is able to maintain the elements of the device without contact between them. So, there is a need to know which is the minimal gap and to be sure that it is not too small.

8.2 Some generalizations and related problems

Of course, the previous basic problem can be easily complicated by introducing cavitation, more degrees of freedom in the gap function or other geometries. In journal bearings, for example, the unknown is the position of the center of the shaft inside the bearing and the data are both components of the applied load; see [104]. Additional elastic effects for thin bearings can be added by means of a Koiter [10] or a biharmonic plate model [91] in the load imposed problems.

Point contacts in ball bearing devices, taking elastic effects by means of Hertz model into account, is perhaps one of the most widely studied problems in tribological laboratories. In this setting, in the definition of h provided by equation (12), a supplementary unknown parameter a is added so that $h = h_0 + a$ and the equilibrium condition (17) is introduced. From a numerical viewpoint, various strategies have been proposed that are mainly based upon a fixed point approach. For example, in [91] the load imposed problem for local contacts is solved by using some monotonicity properties. In general, the approaches differ in how to update the various unknowns related to elastic effects (Hertz) and hydrodynamics effects (Reynolds) (see [126], for example). From a theoretical viewpoint, by using the properties of the line contact operator kernel in one spatial dimension, an existence proof of a semi implicit method is given in [39]. In a purely hydrodynamic setting corresponding to the case of two parallel plans, recently some interesting results concerning inverse problems related to both incompressible and compressible Reynolds equations are considered in [84], the results being qualitatively different in compressible and incompressible cases.

As it is obvious, near all the preceding Reynolds models described in Sections 4 and 5 can be used as state equations and the corresponding inverse problems can be considered and seem to be open. Moreover, two new families of problems emerge:

One deals with the local behaviour of two solids near a pointwise contact situation. In [136], the behaviour of a 3-D Stokes flow in such a situation is studied and a Reynolds equation is obtained as the first term of the asymptotic process. However, people working about small particles motion inside a fluid use a model named *lubrication approximation* to describe the relative influence of close particles which appear to be completely different [131]. A link between these two approaches could be useful.

More generally, following the idea of considering lubrication problems as asymptotic models from Stokes problems, one can think about using the recent results in [99] and related references to cope with existence results for dynamic inverse Reynolds problems from the same results using Stokes equations.

9 Optimization-identification problems

In some sense, this section could be joined with the preceding one as inverse problems are often treated with optimization techniques.

As in various technological areas, one of the most usual problems in real applications is the uncertain knowledge of the parameter values to insert in the basic equations. So, a common procedure is to try to identify these not well known parameters from some experiments [100]. For example, such parameters can be lubricant viscosity, journal bearing eccentricity or even the overall gap function h . The last case is considered for instance in some numerical procedures for solving an elasto-hydrodynamic problem [102]. In some cases, the proposed fixed point algorithm roughly does not converge, thus justifying the interest to study an identification procedure.

In one dimension, neglecting cavitation, an analytical computation shows in [132] that the knowing of p may not be sufficient to recover a gap h . In fact, there can be non uniqueness situations. On the other hand, by considering the identification problem as a minimization question and using the variational inequality model for cavitation, it has been proved in [38] that, for a given pressure, there exists an optimal gap in the appropriate L^∞ admissible set. The proof is mainly based on the techniques of Barbu in [13], so that a penalization of the positivity constraint is applied and an optimal system is gained. However, it can be proved that uniqueness does not always hold, since it can be possible to modify the shape of h in the cavitation area without changing the pressure. Further results in this direction but using the Elrod-Adams cavitation model can be found in [97]. In this work, an interesting improvement is that the convex set of admissible gaps is now

$$U_{ad} = \{h \in L^\infty(\Omega) \cap BV(\Omega) : 0 < a \leq h \leq b, \int_{\Omega} |\nabla h| \leq c\}.$$

Since the solution is a function of c , this allows to consider not only an identification but also an optimization problem, which can be posed as follows: find the gap h such that the load W is the greatest possible. In the 1-D problem without cavitation, the solution is the Rayleigh step bearing in which h is discontinuous (see also Fig. 3 in Section 2). The proof uses a constraint technique introduced in [47].

On the other hand, concerning the generalized compressible Reynolds equation, in [73] various optimization problems are solved. Notice that not only the load can be optimized but also the drag forces and related optimality conditions are gained. Interestingly, the optimal gap is no longer a Rayleigh step bearing as in the incompressible case, but sections with constant nonzero slopes are obtained by numerical computations.

At last some words about micro-roughness optimization. Due to the existence of industrial process allowing very small dimples on the surfaces, there is an increasing number of papers in the tribological literature about the problem of optimizing the performance of lubricated devices by means of artificial texturing [162, 146]. So far, they are mostly numerical computations

using sensibility analysis, genetic algorithms or optimization packages [60]. The results seem mostly controversial and are not clear in terms of efficiency for a wide range of parameters. It is important to point out that there are few rigorous mathematical results in this field. However, one of them gives some original view as it proves that, disregarding cavitation effects, for vanishing period and amplitude, a periodic roughness pattern cannot improve load or drag [63].

10 Conclusions and some challenges

Several attempts have been made to predict some of the likely challenges and opportunities for the fundamental research in tribology for the twenty-first century. One of these attempts is summarized by H. Spikes in [151], which identifies five main areas of likely major activity in the first twelve years: modelling and simulation, lubricant thin films, energy efficient technologies, scientifically designed surfaces and smart systems.

For a mathematician, at first glance, the previous perspectives are somewhat general. However, some of them can be translated in terms of mathematical problems. The first one can be related with the validity of the models currently used, the introduction of new models, their mathematical analysis and the existence of robust numerical methods for dealing with coupled problems. Let us recall that some of the ones which have been mentioned through the preceding sections:

Modelling of the cavitation by taking into account the physics at the air-lubricant interface

Validity of Reynolds equation for piezoviscous fluids

Existence of a singularity or not for the EHD problem

Existence of solutions for the inverse problems

How to cope with thin film model at high Reynolds number?

Let us now mention another new problem which appeared in the mixed lubrication situation: for a strong given load, especially when the initial gap can be modified by elasticity or plasticity effects, it is a common opinion that there is contact in some (unknown) locations of the surfaces and the load is partly supported by the fluid and partly by the normal dry contact. This is what happens as you press a solid on a sliding surface (sliding to induce a hydrodynamic normal force) covered by a fluid. What is wet ? What is dry?

Nanotechnology has already been mentioned in the preceeding sections, specially for the boundary conditions to be imposed at the fluid-solid interface. This kind of approach is still guided by the classical averaging micro-phenomena so that they can be included in a Reynolds like model. However, one can think about including more physics, like wetting or usual molecular dynamic simulation, to know what happens at the interfaces. If this last aspect is perhaps

far from mathematical treatment, the first one could be treated with present mathematical tools.

Scientifically designed surfaces are obviously linked to micro and macro geometrical optimization problems. Some recent results have been described in Section 9 which are mostly related to academic situations. Their validity in real applications as the roughness is a nonhomogeneous one or as cavitation takes place is still an open problem.

At last, speaking of smart systems can be related with bio-tribology. Notice that some bio-systems work in a lubricated state, as for example articulations. It can be found a lot of features which have been already described in such system [85]. Sound occurring as we crack the fingers is due to the explosion of bubbles of cavitation, the synovial fluid is a non Newtonian one and the cartilage can be viewed has a porous medium [134]. However the rheology of the synovial fluids is very complex, changing between a man in good health or not, and this fluid strongly interacts with the porous medium, which is elastic and can suffer relatively great deformations. Moreover, the level at which these phenomena occur fall in the scope of micro-tribology. So, there is here a huge field of interest for extension of present works and future mathematical modelling.

Acknowledgements: The authors thank M. Jai for his interesting remarks concerning some parts of this paper.

References

- [1] S. Alvarez, *Free boundary problems in lubrication theory*. Ph.D. Thesis, UCM, Madrid (1986).
- [2] S. Alvarez and J. Carrillo, A free boundary in the theory of lubrication, *Comm. Partial Differential Equations*, bf 19, (1994), 1743–1761.
- [3] S. Alvarez, J. Carrillo, J.I. Díaz, Cavitation in lubrication: an evolution Model, *Proceedings of XI C.E.D.Y.A.*, University of Málaga, (1989), 131–135.
- [4] S. Alvarez, R. Oujja, On the uniqueness of the solution of an evolution free boundary in the theory of lubrication, *Nonlinear analysis: TMA*, bf 54, (2003), 845–872.
- [5] M. Arenaz, R. Doallo, J. Touriõ and C. Vázquez, Efficient parallel numerical solver for the elastohydrodynamic Reynolds-Hertz problem, *Parallel Computing*, **27**, (2001), 1743–1765.
- [6] M. Arglui, N. Roucou, M. Helene and J. Frene, Theoretical analysis of the incompressible laminar flow in a micro roughness cell, *Proced. 2002-AMS/STEL Joint Int. Tribol. Conf.*, Cancun (Mexico), 2002.

- [7] I. Arregui, J.J. Cendán, C. Parés and C. Vázquez, Numerical solution of a 1-d elastohydrodynamic problem in magnetic storage devices, (*Submitted for publication*)
- [8] I. Arregui, J.J. Cendán and C. Vázquez, Mathematical analysis and numerical simulation of a Reynolds-Koiter model for the elastohydrodynamic journal-bearing device, *Math. Mod. Num. Anal.*, **36**, (2002), 325–343.
- [9] I. Arregui, J. J. Cendán, C. Vázquez, Numerical simulation of head tape magnetic reading devices by a two dimensional model, (*Submitted for publication*)
- [10] I. Arregui, C. Vázquez, Finite element solution of a Reynolds–Koiter coupled problem for the elastic journal bearing, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 190 (2001) 2051-2062.
- [11] A. Assemien, G. Bayada and M. Chambat, Inertial effects in the asymptotic behaviour of a thin film flow, *Asymptotic Analysis* **9**, (1994), 177–208.
- [12] S. Bair, The pressure viscosity coefficient of a polyether over a wide temperature range. *J. of tribology*, **123**, (2001), 50–53.
- [13] V. Barbu, Necessary conditions for distributed control problems governed by elliptic variational inequalities, *J. Math. Anal. Appl.*, **80**, (1981), 566–598.
- [14] G. Bayada and H. Bellout, An unconditional result for the quasi-variational elastohydrodynamic free boundary problem, *J. of Differ. Eq.*, **216**, (2005), 134–152.
- [15] G. Bayada, N. Benhaboucha and M. Chambat, Modelling a thin film passing a thin porous medium, *Asymptot. Anal.*, **37**, (2004), 227–256.
- [16] G. Bayada, N. Benhaboucha and M. Chambat, New models in micropolar fluid and their application to lubrication, *Math. Mod. Methods Appl. Sci.*, **15**, (2005), 343–374.
- [17] G. Bayada, and M. Boukrouche, On a free boundary problem for the Reynolds equation derived from the Stokes system with Tresca boundary conditions, *J. Math. Anal. Appl.*, **282**, (2003), 212–231.
- [18] G. Bayada, M. Boukrouche and M. El Alaoui, The transient lubrication problem as a generalized Hele-Shaw problem, *Z. Anal. Anwendungen*, **14**,(1995), 59–87.
- [19] G. Bayada, M. Chambat, Nonlinear variational formulation for a cavitation problem in lubrication, *J. of Math. An. and Appl.* **90**, (1982), 286–298.
- [20] G. Bayada, M. Chambat, Analysis of a free boundary in partial lubrication, *Quat. Appl. Math* **40**, (1983), 369–375.

- [21] G. Bayada, M. Chambat, Existence and uniqueness for a lubrication problem with nonregular conditions on the free boundary, *Boll. U.M.I.* **6**, (1984), 543–557.
- [22] G. Bayada and M. Chambat, The transition between the Stokes equation and the Reynolds equation: a mathematical proof, *Appl. Math. Opt.*, **14**, (1986), 73–93.
- [23] G. Bayada, M. Chambat, Sur quelques modélisations de la zone de cavitation en lubrification hydrodynamique, *J. of Theor. and Appl. Mech.*, bf 5, (1986), 703–729.
- [24] G. Bayada, M. Chambat, Homogenization of the Stokes system in a thin film flow with rapidly varying thickness, *RAIRO Math. Model. Num. Anal.* **23**, (1989), 205–234.
- [25] G. Bayada and M. Chambat, Modélisation de la jonction d’un écoulement tridimensionnel et d’un filme mince bidimensionnel, *C.R.A.S. Sér. I* **309**, (1989), 81–84.
- [26] G. Bayada and M. Chambat, Gap geometry effects in the asymptotic Reynolds equation, *Mathematical modelling in lubrication*, Publicacions da Universidade de Vigo, (1991), 8–13.
- [27] G. Bayada and M. Chambat, On interface conditions for a thin film flow past a porous medium, *SIAM J. Math. Anal.*, **26**, (1995), 1113–1129.
- [28] G. Bayada and M. Chambat, A finite element algorithm for cavitation in hydrodynamic lubrication, *Revue Européenne d’éléments finis*, **10**, (2001), 653–678.
- [29] G. Bayada, M. Chambat, B. Cid and C. Vázquez, On the existence of solution for a nonhomogeneous Stokes-rod coupled problem, *Nonlinear Anal. TMA*, **59**, (2004), 1–19.
- [30] G. Bayada, M. Chambat and I. Ciuperca, Asymptotic Navier-Stokes equations in a thin moving boundary domain, *Asymptotic Analysis* **21**, (1999), 17–132.
- [31] G. Bayada, M. Chambat and M. Gamouana, Micropolar effects in the coupling of a thin film past a porous medium, *Asymp. Anal.*, **30**, (2002), 187–216.
- [32] G. Bayada, M. Chambat and C. Vázquez, Characteristics method for the formulation and computation of a free boundary cavitation model, *J. Comput. Appl. Math.*, **98**, (1998), 191–212.
- [33] G. Bayada, I. Chupin and S. Martin, Viscoelastic fluids in a thin domain, to appear, *Quart. Appl. Math* (2007).

- [34] G. Bayada, B. Cid and C. Vázquez, Mathematical analysis of some new Reynolds-rod elastohydrodynamic models, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **24**, (2001), 1169–1187.
- [35] G. Bayada, B. Cid, C. Vázquez, Two-scale homogenization study of a Reynolds-rod elastohydrodynamic model, *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.* **13**, (2003), 259–293.
- [36] G. Bayada, S. Ciuperca, M. Jai, Homogénéisation d' équations et inéquations a paramètres oscillants, *C.R.A.S. Série II*, **328**, (2000), 819–824.
- [37] G. Bayada J. Durany and C. Vázquez, Existence of solution for a lubrication problem in elastic journal bearing devices with thin bearing, *Math. Meth. Appl. Sci.*, **18**, (1995), 255–266.
- [38] G. Bayada and M. El Alaoui, An application fo the control by the coefficients in a variational inequality for hydrodynamic lubrication, *Nonlinear Anal. real World Appl.*, **1**, (2000), 315–328.
- [39] G. Bayada and M. El Alaoui, Existence theory for an elastohydrodynamic problem with non local load constraint, *Preprint*, (2006).
- [40] G. Bayada, M. El Alaoui and C. Vázquez, Existence of solutions for elastohydrodynamic piezoviscous lubrication problems with a new model of cavitation, *Euro. J. Appl. Math.*, **7**, (1996), 63–73.
- [41] G. Bayada and G. Lukaszewicz, On micropolar fluids in the theory of lubrication, *Internat. J. Engrg. Sci.*, **34**, (1996), 1477–1490.
- [42] G. Bayada, S. Martin, C. Vázquez, Two-scale homogenization of Elrod-Adams model, *Asymp. Anal.* **44**, (2005), 75–110.
- [43] G. Bayada, S. Martin, C. Vázquez, Homogenization of a nonlocal elastohydrodynamic lubrication problem: a new free boundary model, *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.* **15**, (2005), 1923–1956.
- [44] G. Bayada, S. Martin, C. Vázquez, About a generalized Buckley-Leverett equation and lubrication multifluid flow, *Euro. J. Appl. Math.* (to appear).
- [45] Bellout, H., Existence of solution to a line contact problem of elastohydrodynamic lubrication, *Euro. J. of Appl. Math.*, **14**, (2003), 279–290.
- [46] N. Benhaboucha, M. Chambat and I. Ciuperca, Asymptotic behaviour fo pressure and stresses in a thin film flow with rough boundary, *Quat. Appl. Math.*, **63**, (2005), 369–400.
- [47] M. Bergounioux, Optimal control of problems governed by abstract elliptic variational inequalities with state constraints, *SIAM J. Control Optim.*, **36**, (1998), 273–289.

- [48] A. Bermúdez, J. Durany, Numerical solution of cavitation problems in lubrication, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **75**, (1989), 457–466.
- [49] N.M. Bessonov, A new generalization of the Reynolds condition for a micropolar fluid and its application, *Tribology International*, **27**, (1994), 105–108.
- [50] B. Bhushan. *Tribology and mechanics of magnetic storage devices*, Springer, New York, 1996.
- [51] F. Boughanim, M. Boukrouche and H. Smaoui, Asymptotic behaviour of a non-Newtonian flow with slip-stick condition, *Proceed. 2004-Fez Conf. Diff. Eq. and Mech., Electron. J. Differ. Equ. Conf.*, **11**, Texas State University, San Marcos, Texas, 2004.
- [52] F. Boughanin, and R. Tapiero, Derivation of the two-dimensional Carreau law for a quasi-Newtonian fluid flow through a thin slab, *Appl. Anal.*, **57**, (1995), 243–269.
- [53] M. Boukrouche and R. El Mir, Asymptotic analysis in non newtonian flyuid in a thin film with Tresca law, *Nonlinear Anal.*, **59**, (2004), 85–105.
- [54] M. Boukrouche and R. El Mir, On the Navier-Stokes system in a thin flow with a Tresca free boundary condition and its asymptotic analysis, *Bull. Math. Soc. Sci, Math. Roumaine (New Series)*, **48(96)**, (2005), 139–163.
- [55] M. Boukrouche and G. Lukaszewicz, On a lubrication problem with Fourier and Tresca boundary conditions, *Math. Models Methods Appl. Sci.*, **14**, (2004), 913–941.
- [56] A. Bourgeat, A. Mikelic and R. Tapiero, Dérivation des équations moyennées décrivant un écoulement non newtonien dans un domaine de faible épaisseur, *C.R.A.S. Sér. I*, **316**, (1993), 965–970.
- [57] P. Bourgin, Second order effects in non newtonian lubrication theory. A general perturbation approach, *ASME J. of Lubrication Technol.*, **104**, (1982), 547–552.
- [58] H. Brezis, D. Kinderlehrer and G. Stampacchia, Sur une nouvelle formulation du problème de l' écoulement à travers une digue, *C.R.A.S. Sér. I*, **287**,(1978), 711–714.
- [59] R. Bunoiu and J. Saint-Jean Paulin, Fluide à viscosité non linéaire dans un domaine de faible épaisseur dans le cas de lubrification, *C.R.A.S. Sér. I*, **323**, (1996), 1097–1102.
- [60] G. Buscaglia, R.F. Aussas and M. Jai, Optimization tools in the analysis of micro textured lubricated devices, *Proced. Inverse problems, Design and Optimisation Symposium*, Rio Janeiro, 2004.

- [61] G. Buscaglia, I. Ciuperca, and M. Jai, On nano-scale hydrodynamic lubrication models, *C.R. Mecanique*, **333**, (2005), 453-458.
- [62] G. Buscaglia, I. Ciuperca and M. Jai, Existence and uniqueness for several nonlinear elliptic problems arising in lubrication theory, *J. Differ. Eq.* **1** (2005) 187-215.
- [63] G. Buscaglia, L. Ciuperca and M. Jai, The effect of periodic textures on the static characteristics of thrust bearings, *J. of Tribology*, **127**, (2005), 899–902.
- [64] J. Carrillo, M. Chipot, Sur l'unicité du problème de l'écoulement à travers une digue". *C.R.A.S. Sér. A-B*, **292**, (1981), pp. 191–194.
- [65] J. Carrillo and J.A. Infante, Numerical approach of a lubrication problem with cavitation, *Mathematical modelling in lubrication*, Publicacions da Universidade de Vigo, (1991), 19–24.
- [66] G. Capriz, G. Cimatti, On some singular perturbation problems in the theory of lubrication, *Appl. Math. Optim.*, **4**, (1977), 285-297.
- [67] J.J. Cendán, *Estudio matemático y numérico del modelo de Reynolds-Koiter y de los modelos tribológicos en lectura magnética*, Ph.D. Thesis, University of Vigo, 2005.
- [68] G. Cimatti, On a problem of the theory of lubrication governed by a variational inequality, *Appl. Math. Optim.*, **3**, (1977), 227-242.
- [69] G. Cimatti, A free boundary problem in the theory of lubrication, *Internat. J. Engrg. Sci.*, **18**, (1980), 703-711.
- [70] G. Cimatti, How Reynolds equation is related to the Stokes equation, *Appl. Math. Opt.*, **10**, (1983), 223–248.
- [71] G. Cimatti, On certain nonlinear problems arising in the theory of lubrication, *Appl. Math. Optim.*, **3**, (1984), 227-245.
- [72] G. Cimatti, Existence and uniqueness for nonlinear Reynolds equations, *Internat. J. Engrg. Sci.*, **24**, (1986), 827-834.
- [73] L. Ciuperca, M. El Alaoui and M. Jai, On the optimal control in elliptic problems. Application to the optimization of the head slider, *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, **11**, (2005), 102–121.
- [74] I. Ciuperca and M. Jai, Existence, uniqueness and homogenization of the second order slip Reynolds equation, *J. Math. Anal. Appl.*, **286**, (2003), 89–106.
- [75] J.P. Chaomleffel, *Influence des forces d'inertie en lubrification hybride*, Thèse Mécanique, INSA Lyon, 1983.

- [76] M. Chipot, On the Reynolds lubrication equation, *Nonlinear Analysis TMA*, **12**, (1988), 699–718.
- [77] M. Chipot and M. Luskin, Existence and uniqueness of solutions to the compressible Reynolds lubrication equation, *SIAM J. Math. Anal.*, **17**, (1986), 1390–1399.
- [78] D.G. Christopherson, A new mathematical method for the solution of film lubrication problems, *Inst. Mech. Eng. J. Proc.* **146**, (1941), 126–135.
- [79] C. Conca, F. Murat and O. Pironneau, The Stokes et de Navier-Stokes equations with boundary conditions involving the pressure, *Jap J. Math.*, **20**, (1994), 297–318.
- [80] L. Consiglieri, Stationary solutions for a Bingham fluid with nonlocal friction, *Mathematical topics in fluid mechanics*, Pitman Res. Notes Math. Ser., **274**, Logman Sci. Tech., Harlow, 1992.
- [81] J.C. Coyne and H.G. Elrod, Conditions for the rupture of a lubricating film, Part 1: Theoretical model, *ASME J. Lub. Technol.*, **92**, (1970), 451–456.
- [82] C.W. Cryer, The method of Christopherson for solving free boundary problem for infinite journal bearings by means of finite differences, *Math. Comp.* **25**, (1971), 435–443.
- [83] R.C. Di Prima, High Order approximations in the asymptotic Solution of the Reynolds Equation for slider bearings at high bearing numbers, *ASME J. Lub. Technol.*, (1968).
- [84] J.I. Díaz and J.I. Tello, A note on some inverse problems arising in lubrication theory, *Differential Integral Equations*, **17**, (2004), 583–591.
- [85] D. Dowson, Bio tribology of natural and replacement synovial joint, *Biomechanics of Diarthrodial joints*, **2**, Springer Verlag, Berlin, 1990.
- [86] J. Dowson, C.M. Taylor, Cavitation in bearings, *Ann. Rev. Fluid Mech.* (1979) pp. 35–66.
- [87] A. Dunvjak and E. Maruvsic-Paloka, Derivation of the Reynolds equation for lubrication of a rotating shaft, *Arch. Math. (Brno)* **36**, (2000), 239–253.
- [88] J. Durany, G. García and C. Vázquez, A mixed Dirichlet-Neumann problem for a nonlinear Reynolds equation in elastohydrodynamic piezoviscous lubrication, *Proc. Edinburgh Mathematical Society*, **39**, (1996), 151–162.
- [89] J. Durany, G. García and C. Vázquez, Numerical computation of free-boundary problems in elastohydrodynamic lubrication, *Appl. Math. Model.*, **20**, (1996), 104–113.

- [90] J. Durany G. García and C. Vázquez, An elastohydrodynamic coupled problem between a piezoviscous Reynolds equation and a hinged plate model, *Math. Mod. Num. Anal.*, **31**, (1997), 495–516.
- [91] J. Durany G. García and C. Vázquez, Numerical simulation of a lubricated Hertzian contact problem under imposed load, *Fin. Elem. Anal. Des.*, **38**, (2002), 645–658.
- [92] J. Durany, C. Vázquez, Numerical approach of lubrication problems in journal bearing devices with axial supply, *Numerical Methods in Engineering 92*, Hirsch, Zienkiewicz and Onate Eds., Elsevier, (1992), 839–844.
- [93] J. Durany and C. Vázquez, Analysis and numerical solution of cavitating piezoviscous flows in hydrodynamic lubrication, (In Spanish) *Rev. Internac. Métod. Numér. Cálculo Dis. Ingr.*, **9**, (1993), 141–160.
- [94] P. Ehret, D. Dowson and C.M. Taylor, Transient elastohydrodynamic solutions with interfacial slip, *ASME J. of Tribol.* **121**, (1999), 1–8.
- [95] H.G. Elrod, A derivation for the basic equations for hydrodynamic lubrication, *Quat. Appl. Math.*, **17**, (1960), 349–359.
- [96] M. El Alaoui, G. Bayada, Une méthode du type caractéristique pour la résolution d'un problème de lubrification hydrodynamique en régime transitoire, *Math. Modell. and Num. Ann.*, **25**, (1991), 395–423.
- [97] M. El Alaoui and A. EL Kacimi, Numerical simulation of the hydrodynamic film thickness, *Numerical algorithms*, **33**, (2003), 241–250.
- [98] H.G. Elrod and M.L. Adams, A computer program for cavitation, *Cavitation and related phenomena in lubrication Proceed.*, Mech. Engineer. Pub., (1975), 37–42.
- [99] M. Hillairet and D. Serre, Chute stationnaire d'un solide dans un fluide visqueux incompressible le long d'un plan incliné, *Ann. Inst. H. Poincaré*, **20**, (2003), 779–803.
- [100] A.A. El Sharkawy and L.H. Guedouar, An inverse analysis for steady state elasto hydrodynamic lubrication of one layered journal bearings, *ASME J Tribology*, **122**, (2000), 524–533.
- [101] A.C. Eringen, Theory for micropolar fluid, *J. Math. Mech.*, **16**, (1966), 1–16.
- [102] H.P. Evans and R.W. Snidle, Inverse solution of Reynolds equation of lubrication under point contact elastohydrodynamic conditions, *J. Lubrication Technol.*, **103**, (1991), 539–546.
- [103] L. Floberg, Lubrication of two rotating cylinders at variable lubricant supply with reference to the tensile strength of the liquid lubricant, *ASME J. Lub. Technol.*, **95**, (1973), 155–165.

- [104] J. Frene, D. Nicolas, B. Degueurce, D. Berthe and M. Godet, *Hydrodynamic lubrication: bearings and thrust bearings*, Elsevier Science, 1997.
- [105] A. Friedman, B. Hu, Head-media interaction in magnetic recording, *Arch. Rational Mech. Anal.* 140 (1997) 79–101.
- [106] A. Friedman and J. I. Tello, Head-media interaction in magnetic recording, *J. Differ. Eq.* 171 (2001) 443–461.
- [107] S. Fukui and R. Kaneko, Analysis of ultra-thin gas film lubrication based on linearized Boltzmann equation: First report-derivation of a generalized lubrication equation including thermal creep flow, *ASME J. of Tribology*, **110**, (1988), 253–262.
- [108] F. Gazzola, A note on the evolution Navier-Stokes equations with a pressure-dependent viscosity, *Z. A. M. Phys.*, **48**, (1997), 760–773.
- [109] R. Glowinsky, J.L. Lions and R. Trémolières, *Analyse numérique des inéquations variationnelles*, Ed. Dunod, Paris, 1976.
- [110] I. Hafidi, *Sur l'existence en position d'équilibre dans des mécanismes lubrifiés*, Ph. D. Thesis, I.N.S.A. de Lyon, 2005.
- [111] P. Huang Zhi Heng Li, Y. G Meng and S. Z W Wen, *ASME J. of Tribology*, **124**, (2002), 547–552.
- [112] M. Jai, Homogenization and two-scale convergence of the compressible Reynolds lubrication equation modelling the flying characteristics of a rough magnetic head over a rough rigid-disk surface, *Math. Modelling Numer. Anal.* 29 (1995) 199-233.
- [113] M. Jai, Existence and uniqueness of the parabolic compressible Reynolds equation, *Nonlinear Anal.*, **43**, (2001), 655–682.
- [114] B.D. Jakobsson and B.J. Hamrock, Non newtonian fluid models incorporated into elastohydrodynamic lubrication of rectangular contacts, *ASME J. Tribology*, **106**, (1984), 275-284.
- [115] P. Jost, *Lubrication(tribology)- a report on the present position and industry's needs*, UK Department of Education and Science, HMSO, London (1966).
- [116] P. Jost, Economic impact of tribology, *Proc. Mechanical Failures Prevention Group* , Special Pub. 423, NBS, Gaithersburg, Maryland (1976).
- [117] P. Jost, The tasks of tribology societies in a changing world, *Proc. Second World Tribology Congress*, Viena, 2001.
- [118] D. Kinderlehrer, G. Stampacchia, *An Introduction to Variational Inequalities and their Applications*, Academic Press, New York, 1980.

- [119] L. Lande and K. Tonder, Pressure and shear flow in a rough hydrodynamic bearing, flow factor calculation, *ASME J. Tribol.*, **119**, (1997), 549–555.
- [120] K. Lemrabet, Le probleme aux limites de Ventcel pour le systeme de l' élasticité dans un domaine de R^3 , *C.R.A.S. Sér. I*, **304**,(1987), 151–154.
- [121] T. Levy, Filtrations in a porous fissured rock, influence of the fissures connexity, *Eur. Journ. Mech. B*, **9**,(1990), 309–327.
- [122] P.L. Lions, *Mathematical topics in fluid Mechanics, Vol. 2: Compressible fluids*, Oxford Science Publications, New York, 1998.
- [123] G. Liu, Dual variational principel for the free boundary problem of cavitated journal bearing, *Compl. Duality and Sym. in Nonlin. Mech.*, **6**, Boston Kluwer Acad., 2004.
- [124] S.W. Lo, On the effect of roughness orientation. A mapping and double scale analysis of flow factors, *ASME J. Tribol.*, **114**, (1992), 747–754.
- [125] H. Lu, M. Berzins, C.E. Goodyer and P.K. Jimack, High order discontinuous Galerkin method for EHL line contact problems, *Comm. Numer. Methods Engrg.*, **21**, (2005), 643–650.
- [126] A.A. Lubrecht and C.H. Venner, *Multilevel methods in lubrication*, Elsevier, 2000.
- [127] S.V. Lupulyak, B.S. Grigor'ev and Y.K. Shinder, Solvability of the Reynolds equation of gas lubrication, *Journal of Mathematical Sciences*, **106**, (2001), 2925–2928.
- [128] G. Lundholm, The circumferental groove journal bearing considering cavitation and dynamic stabylity, *Acta Polyt. Scand. ME Series*, **45**, Stockholm (Sweedn), 1969.
- [129] L.D. Marini and P. Pietra, Fixed point algorithms for stationary flow in porous media, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engr.*, **56**, (1986), 16–45.
- [130] E. Marusic-Paloka and M. Starcevic, Rigorous justification of the Reynolds equation for gas lubrication, *CRAS Mécanique*, **333**, (2005), 534–541.
- [131] B. Maury and R. Glowinsky, Fluid-particle flow: a symmetric formulation, *C.R.A.S. Sér. I*, **324**, (1997), 1079–1084.
- [132] M.H. Meurisse, Solution of the inverse problem in hydrodynamic lubrication, *Proced. X Leeds-Lyon Internat. Symp.*, Butterworths Ed., (1983), 104–107.
- [133] A. Mikelic and R. Tapiero, Mathematical derivation of the power law describing polymer flow through a thin slab, *RAIRO, Modél. Math. Anal. Numér.*, **29**, (1995), 3–21.

- [134] V. V. Mow and X. E. Guo, Mechano electrochemical properties of articular cartilage, *Annu. Rev. Biomed. Eng.* **4**, (2002), 175-209.
- [135] S. A. Nazarov, Asymptotic solution of Navier-Stokes problem on the flow of a thin layer of a fluid, *Sibirsk. Mat. Zh.*, **31**, (1986), 131-144.
- [136] S.A. Nazarov, Asymptotics of the Stokes system solutions at surfaces contact point, *C.R.A.S. Sér. I*, **312**, (1991), 207-211.
- [137] J. T. Oden and S. R. Wu, Existence of solutions to the Reynolds equation of elastohydrodynamic lubrication, *Int. Jour. Eng. Sci.*, **25**, (1985), 207-215.
- [138] L. Paoli, Asymptotic behaviour of a two fluid flow in a thin domain: from Stokes equation to Buckley-Leverett equation and Reynolds law, *Asymp. Anal.*, **34**, (2003), 93-120.
- [139] N. Patir and H.S. Cheng, Application of average flow model to lubrication between rough sliding surfaces, *ASME J. Lub. Technol.*, **101**, (1979), 220-230.
- [140] F. Plouraboué, M. Prat, and N. Letalleur, Sliding lubricated anisotropic rough surfaces, *Phys. Rev.*, **21**, (2005), 643-650.
- [141] Prakash and P. Sinha, Lubrication theory for micropolar fluid and its application to a journal bearing, *Int. J. Eng. Science*, **13**, (1975), 217-232.
- [142] K.R. Rajagopal and A.Z. Szeri, On an inconsistency in the derivation of the equations of elastohydrodynamic lubrication, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **459**, (2003), 2771-2786.
- [143] O. Reynolds, On the theory of lubrication and its application to Mr. Beauchamp tower's experiment, including the determination of the viscosity of olive oil, *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **Paper 52**, (1886).
- [144] O. Ricou and M. Bercovier, *Comput. Model. Eng. Sci.*, **3**, (2002), 87-99.
- [145] J. F. Rodrigues, Some remarks on the Reynolds problem in elastohydrodynamic lubrication, *European J. Appl. Math.*, **1**, (1993), 83-96.
- [146] G. Ryk, Y. Kligerman, I. Etsion, Experimental investigation of laser surface texturing for reciprocating automotive components, *Tribology Trans.*, **45**, (2002), 444-449.
- [147] W G. Sawyer and J A Tichy , Non Newtonian lubrication with the second order fluid, *ASME J. Tribology*, **120**, (1998), 622-628.
- [148] S. Seregin, Navier-Stokes equations with lower bounds on the pressure, *Arch. Rat. Mech.*, **163**, (2002), 65-86.
- [149] F. Shi and R.F. Salant, A mixed soft elastohydrodynamic lubrication model with interasperity cavitation and surface shear deformation, *ASME J. Lub. Technol.*, **122**, (2000), 308-316.

- [150] A. Sommerfeld Zur hydrodynamischen theory der schmiermittelreibung *Z. Math. Phys.*, **40**, (1904), 97–155.
- [151] H. Spikes, Tribology research in the twenty-first century, *Tribology international*, **34**, (2001).
- [152] Strozzi, Formulation of three lubrication problems in terms of complementarity, *Wear*, **104**, (1985), 103–119.
- [153] A.Z. Szeri, *Fluid Film Lubrication: Theory and Design*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [154] K. Taous *Comportement asymptotique de milieux hétérogenes en thermique et mécanique*, Ph.D. Thesis, University of Metz, 1990.
- [155] K. Taous, Equations de Reynolds pour une large classe de fluides non newtoniens, *C.R.A.S. Sér. I*, **323**, (1998), 1213–1218.
- [156] J.I. Tello, Regularity of solutions to a lubrication problem with discontinuous data, *Nonlinear Anal.*, **53**, (2003), 1167–1177.
- [157] J.I. Tello, On a nonlinear nonlocal ODE arising in magnetic recording, *Appl. Math. Lett.* **18** (2005) 445–450.
- [158] J. A. Tichy, A surface layer model for thin film lubrication, *Tribology Transactions*, **38**, (1995), 577–583.
- [159] J. A. Tichy, A porous model for thin film lubrication, *ASME J. Tribology*, **117**, (1995), 16-21.
- [160] J. A. Tichy, Non newtonian lubrication with the convected Maxwell model, *ASME J. Tribology*, **118**, (1996), 344–349.
- [161] J. A. Tichy and C.P. Ku, A thin film flow rupture model for non newtonian and viscoelastic fluids, *ASME J. Tribology*, **120**, (1998), 712–717.
- [162] K. Tonder, Hydrodynamic effects of tailored inlet roughness: extended theory, *Tribology International*, **37**, (2004), 137-142.
- [163] S. Timoshenko and J.N.Goodier, *Theory of Elasticity*, McGraw-Hill, London, 1951.
- [164] J.H. Tripp, Surface roughness effects in hydrodynamic lubrication: the flow factor method, *ASME J. Lub. Technol.*, **105**, (1983), 458–465.
- [165] C. Vázquez, Existence and uniqueness of solution for a lubrication problem with cavitation in a journal bearing with axial supply, *Adv. in Math. Sci. and Appl.*, **4**, (1994), 313–331.
- [166] S. Whitaker, *The method of volume averaging*, Kluwer Academic Publishers, 1999.

- [167] L. Wu and D.B. Bogy. Use of an upwind finite volume method to solve the air bearing problem of hard disk drives, *Computational Mechanics*, **26**, (2000), 592–600.
- [168] R. Zhang and X. Kai Li, Non newtonian effects on lubricant thin film flow, *J. Eng. Math.*, **51**, (2005), 1–13.

MODELADO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA HIDRODINÁMICA MARINA EN ZONAS COSTERAS

JORDI BLASCO

Departamento de Matemática Aplicada I, Universidad Politécnica de Cataluña

jorge.blasco@upc.edu

Resumen

En este artículo se consideran modelos y técnicas numéricas para la simulación de la hidrodinámica del océano en zonas costeras cuyas aplicaciones pueden abarcar diferentes problemas de ingeniería marítima, de costas o de puertos. Se presenta con detalle, en particular, HELIKE, un modelo tridimensional no hidrostático en elementos finitos que incorpora, entre otros, los efectos de la rotación terrestre, la tensión superficial debida al viento y la fricción con el fondo. Algunos resultados numéricos obtenidos con este modelo en situaciones realistas confirman su validez.

Palabras clave: *Hidrodinámica marina, Modelos numéricos, Elementos Finitos, Flujo incompresible, Estabilización*

Clasificación por materias AMS: 35Q10 65N30 76D05

1 Introducción

Se entiende por *modelización costera* el desarrollo de métodos numéricos para la simulación de la dinámica de las aguas marinas en zonas de costa, que pueden abarcar toda la plataforma continental e incluso parte del océano profundo adyacente. Dichos modelos difieren de los llamados *modelos oceánicos de circulación general* (OGCM), cuyo objetivo es el estudio de la hidrodinámica del océano a una escala temporal y espacial mucho mayor, pudiendo ser ésta última incluso la escala planetaria.

Resulta indudable la importancia del desarrollo de modelos costeros operacionales que proporcionen resultados fiables en tiempos de cálculo admisibles; en la actualidad, estos resultados son necesarios para la elaboración de predicciones y constituyen una ayuda indispensable en la toma de decisiones. El desarrollo económico, la explotación y la protección de las zonas costeras, el

Fecha de recepción: 13/11/2006

El trabajo del autor ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia y Tecnología a través de los Proyectos BFM2003-06446-C02-02 y MTM2005-07660-C02-01

diseño y la gestión de puertos y la evaluación de la dispersión de contaminantes en el mar son sólo algunas de las muchas aplicaciones prácticas actuales de los modelos costeros, cuyo análisis es además un incentivo a la investigación científica aplicada.

No es de extrañar, por tanto, que exista en la actualidad una gran cantidad y diversidad de modelos costeros operacionales adecuados a situaciones muy diversas ([34]). La amplia variabilidad de los regímenes del flujo oceánico a lo largo del planeta así lo requiere, con presencia de flujos mareales o no, con aguas altamente salinas o más influenciadas por el aporte de agua dulce, con rangos de temperatura muy diferentes, con influencia o no de la actividad humana, etc.

En este artículo se describe un modelo costero que ha sido desarrollado en los últimos años como fruto de una colaboración entre el autor e investigadores del Laboratorio de Ingeniería Marítima (LIM) en la Universidad Politécnica de Cataluña, entre los cuales cabe destacar a Manuel Espino y Augusto Maidana. Se resaltarán las similitudes y diferencias de este modelo con otros modelos preexistentes. En la Sección 2 se introduce el problema matemático que se ha considerado para la modelización de la hidrodinámica marina costera. En la Sección 3 se presenta el método adoptado para su resolución numérica. En la Sección 4 se proporcionan algunos resultados numéricos obtenidos con este modelo en problemas realistas. Finalmente, se extraen algunas conclusiones y se indican las líneas futuras de trabajo previstas.

2 Hidrodinámica costera

En esta Sección se establece el problema matemático que se ha considerado para el modelado de los fenómenos físicos más relevantes que intervienen en la dinámica de las aguas costeras.

2.1 Ecuaciones de gobierno

Se pretende estudiar la hidrodinámica del océano en una región tridimensional Ω definida por

$$\Omega = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : (x, y) \in S, -\mathcal{H}(x, y) < z < 0\},$$

en referencia a coordenadas cartesianas x, y (horizontales) y z (vertical), siendo $S \subset \mathbb{R}^2$ un conjunto abierto, acotado y poligonal (la superficie) y $\mathcal{H}: \bar{S} \rightarrow \mathbb{R}$ una función no negativa y suficientemente regular (la batimetría o profundidad del fondo). El dominio Ω se supone ocupado por un fluido Newtoniano e incompresible en régimen de flujo turbulento. La ecuación de gobierno del movimiento del fluido, deducida a partir del principio de conservación del momento lineal, expresada en un sistema de referencia en rotación solidario a la superficie terrestre, promediada en la escala temporal turbulenta (promedio de Reynolds) y simplificada mediante la aproximación de Boussinesq (que establece que las variaciones de densidad son relevantes sólo para los efectos de flotabilidad debidos a la gravedad), resulta ser ([50]):

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + f \mathbf{k} \times \mathbf{u} + \nabla p - \frac{\partial}{\partial x} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z} (\nu_V \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z}) = -\frac{\rho}{\rho_0} \mathbf{g} \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \quad (1)$$

conocida como ecuación de Navier-Stokes para fluidos geofísicos. En (1), las incógnitas son la velocidad tridimensional del fluido $\mathbf{u}(x, y, z, t) = (u, v, w)(x, y, z, t)$ en cada punto $(x, y, z) \in \Omega$ y en cada instante de tiempo $t \in (0, T)$ (siendo $T > 0$ un tiempo final de simulación) y la presión cinemática $p(x, y, z, t)$ o presión dividida por una densidad de referencia ρ_0 . La densidad del fluido ρ , no necesariamente constante, se supondrá aquí conocida.

El primer término de (1) representa las fuerzas de inercia; el segundo las aceleraciones convectivas, debidas al transporte de la velocidad por el propio movimiento del fluido; el tercer término, llamado de Coriolis, es debido a la rotación del sistema de referencia y en él $f = 2\omega \sin(\phi)$ es el parámetro de Coriolis (ω es la velocidad angular de rotación terrestre y ϕ es la latitud de la zona de estudio) y $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$ es el vector unitario en la dirección vertical ascendente; el cuarto término es el gradiente de presión; los tres términos siguientes son debidos a la difusión turbulenta y dependen de las viscosidades turbulentas ν_H (horizontal) y ν_V (vertical), respectivamente; finalmente, $\rho(x, y, z, t)$ es la densidad del fluido y $\mathbf{g} = (0, 0, g)$ es la aceleración de la gravedad, a la que se han incorporado las aceleraciones centrífugas (debidas también a la rotación terrestre), resultando la llamada *gravedad efectiva* que sigue la vertical del lugar.

La ecuación (1) requiere de algún modelo de cierre turbulento que permita calcular las difusividades turbulentas ν_H y ν_V en términos de algunos parámetros del flujo. Es frecuente en este contexto tomar valores constantes para estas variables, que se ajustan para obtener resultados satisfactorios en cada situación concreta. Nosotros consideramos, además de esta posibilidad, el modelo de Smagorinski para la difusividad turbulenta horizontal, según el cual ν_H se calcula mediante la expresión:

$$\nu_H = C_S h_x h_y \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (2)$$

siendo h_x y h_y los parámetros de la discretización respectivamente en las direcciones x e y y C_S un coeficiente del modelo. A pesar de que existen formulaciones mucho más elaboradas para el modelado de la turbulencia, como puedan ser modelos de 1 ó 2 ecuaciones diferenciales tales como el conocido modelo $k - \epsilon$, el modelo algebraico de turbulencia considerado aquí es suficiente para las aplicaciones que se pretenden abordar.

La superficie del mar evoluciona con la dinámica del flujo. Dicha evolución suele modelarse mediante una función $\eta(x, y, t)$, definida en $S \times (0, T)$, que representa la altura de la superficie libre respecto a un nivel medio de referencia, que corresponde a $z = 0$. La altura de superficie libre η verifica entonces la siguiente ecuación cinemática:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} = w \quad \text{en } S \times (0, T). \quad (3)$$

En numerosas aplicaciones de nuestro modelo, sin embargo, hemos considerado la hipótesis de techo rígido, según la cual la altura de superficie libre η es siempre nula. Esta hipótesis restringe ciertamente la aplicabilidad del modelo en algunas situaciones, como puede ser el caso de algunos flujos altamente mareales que se pretenden estudiar próximamente, aunque resulta suficiente en multitud de problemas.

Resulta conveniente, en este contexto, descomponer la presión del fluido en varios términos debidos a diferentes causas físicas. Así pues, se escribe:

$$p(x, y, z, t) = g \cdot (\eta - z) + g \cdot \int_z^\eta \frac{\rho(x, y, s, t) - \rho_0}{\rho_0} ds + q(x, y, z, t) \quad (4)$$

Los dos primeros términos en esta descomposición representan respectivamente las contribuciones barotrópica y baroclínica a la presión hidrostática, debida al peso de la columna de agua que soporta cada punto (se ha supuesto que la presión atmosférica es nula); el tercer término representa la presión no hidrostática y es la parte de la presión no debida a ninguno de los dos factores anteriores. Sustituyendo (4) en (1), llamando $\nabla_H := (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, 0)$ al gradiente horizontal y tomando $\eta \equiv 0$ (hipótesis de techo rígido), se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + f \mathbf{k} \times \mathbf{u} + \nabla q + \frac{g}{\rho_0} \int_z^0 (\nabla_H \rho) ds \\ - \frac{\partial}{\partial x} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z} (\nu_V \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z}), \\ = \mathbf{0} \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \end{aligned} \quad (5)$$

Finalmente, la condición de incompresibilidad del fluido se refleja en la llamada ecuación de continuidad, que garantiza el principio de conservación de la masa, exigiendo pues que el campo de velocidades sea solenoidal (de divergencia nula):

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \quad (6)$$

2.2 Otros modelos existentes

Numerosos modelos costeros existentes, principalmente aquéllos cuyo objetivo es el estudio de la propagación de ondas, consideran ecuaciones muy simplificadas, válidas en situaciones muy concretas, como pueden ser las ecuaciones de la hidráulica ([37], [38]), la ecuación de Boussinesq ([1], [10], [49]) o la ecuación de Korteweg-De Vries ([32], [33]).

Muchos otros modelos se basan en formulaciones deducidas a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes (1) bajo ciertas simplificaciones, principalmente la llamada *aproximación hidrostática*:

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\frac{\rho}{\rho_0} g. \quad (7)$$

Esta hipótesis se deduce de la tercera componente de la ecuación de momentos despreciando las aceleraciones verticales. Para un fluido con densidad constante, esta hipótesis implica que la presión varía linealmente con la profundidad. En [2] se proporciona una justificación matemática de la aproximación hidrostática (7) tomando el límite de la ecuación de Navier-Stokes (1) cuando la proporción entre las escalas vertical y horizontal tiende a zero.

Numerosos modelos costeros hidrostáticos se basan en las llamadas ecuaciones de aguas someras o aguas poco profundas (*shallow water*), también llamadas ecuaciones de Saint-Venant. Estas ecuaciones se deducen de la ecuación de Navier-Stokes (1) para flujos en los que la profundidad sea mucho menor que la escala horizontal, despreciando entonces las velocidades y aceleraciones verticales. Tras integrar en vertical las componentes horizontales de la ecuación de momentos, y despreciando los efectos viscosos, se deduce el siguiente problema para las velocidades horizontales promediadas (\bar{u}, \bar{v}) y la altura de superficie libre η :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} - f \bar{v} &= -g \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + f \bar{u} &= -g \frac{\partial \eta}{\partial y} \\ \frac{\partial(\eta - \mathcal{H})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\bar{u}(\eta - \mathcal{H})) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{v}(\eta - \mathcal{H})) &= 0. \end{aligned}$$

Estas ecuaciones y sus múltiples variantes han sido extensamente estudiadas y utilizadas (ver, por ejemplo, [24], [26], [39], [42], [46] y [55] entre muchos otros).

Por otra parte, muchos otros modelos oceanográficos hidrostáticos están basados en las llamadas ecuaciones primitivas del océano (ver, por ejemplo, [4], [17], [23], [29], [31]). Las ecuaciones primitivas se deducen también de la ecuación de Navier-Stokes (1) bajo las hipótesis de techo rígido, presión hidrostática y densidad constante, suponiendo además que la velocidad vertical se anula en el fondo. Integrando la aproximación hidrostática (7) (con $\rho = \rho_0$) a lo largo de la vertical, se deduce trivialmente que $p(x, y, z, t) = p_S(x, y, t) - gz$, donde p_S representa la presión superficial. Se obtiene entonces un problema reducido para las incógnitas velocidad horizontal (tridimensional) $\mathbf{u}_H = (u, v)$ y presión superficial (bidimensional) p_S (ver [41]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}_H + f \mathbf{k} \times \mathbf{u} + \nabla_{2D} p_S - \frac{\partial}{\partial x} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial y}) \\ - \frac{\partial}{\partial z} (\nu_V \frac{\partial \mathbf{u}_H}{\partial z}) = - \frac{\rho}{\rho_0} \mathbf{g} \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \\ \nabla_{2D} \cdot \langle \mathbf{u}_H \rangle = 0 \quad \text{en } \Omega \times (0, T), \end{aligned}$$

siendo ahora $\nabla_{2D} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$ el gradiente horizontal bidimensional y $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_H, w)$. La velocidad vertical se calcula *a posteriori* a partir de las velocidades horizontales integrando en vertical la ecuación de continuidad:

$$w(x, y, z, t) = \int_z^0 \nabla_{2D} \cdot \mathbf{u}_H(x, y, s, t) ds.$$

En el sistema precedente, $\langle \mathbf{u}_H \rangle$ denota el promedio vertical de la velocidad horizontal \mathbf{u}_H , definido por:

$$\langle \mathbf{u}_H \rangle (x, y, t) := \int_{-\mathcal{H}(x,y)}^0 \mathbf{u}_H(x, y, z, t) dz$$

Los modelos basados en ecuaciones primitivas, sin embargo, resultan más adecuados a regiones de gran escala que a escala regional. Además, a pesar de que la aproximación hidrostática resulta ser aceptable en numerosas situaciones, las formulaciones basadas en ella desprecian efectos como las aceleraciones verticales que son importantes en algunas situaciones y que pueden dar lugar a resultados incorrectos en determinados casos, como pueden ser los flujos en regiones en las que la profundidad del océano varía rápidamente ([15]). Ello ha dado lugar a una reciente proliferación de modelos costeros no-hidrostáticos ([15], [35], [36], [40], [47], [51], [52], [53], [54]). Algunos de estos modelos, sin embargo, emplean formulaciones bidimensionales, otros carecen de términos importantes en las ecuaciones (Coriolis, viscosidad,...). Por otra parte, la mayoría de ellos utilizan el método de diferencias finitas para la aproximación espacial del problema, cuya adaptabilidad a la complicada geometría del océano es superada por el método de los elementos finitos.

HELIXE, que ha sido desarrollado recientemente ([8], [30], [43], [44], [45]), es un modelo numérico no hidrostático, tridimensional y en elementos finitos, que resuelve el sistema de ecuaciones en derivadas parciales (5)-(6) para las incógnitas \mathbf{u} y q en el dominio Ω y en el intervalo temporal $(0, T)$. Es capaz de reproducir por tanto aceleraciones verticales y permite mallas no estructuradas de elementos finitos 3D adaptadas a la complicada geometría del océano.

2.3 Condiciones de contorno e iniciales

El sistema de ecuaciones en derivadas parciales (5)-(6) debe complementarse con condiciones de contorno adecuadas. En este caso, las condiciones deben reflejar, además, los principales fenómenos físicos que afectan a la hidrodinámica marina

a través de la frontera del dominio Ω . Esta frontera puede descomponerse en la forma $\partial\Omega = \Gamma_s \cup \Gamma_b \cup \Gamma_l$, siendo:

$$\begin{aligned}\Gamma_s &= S \times 0 && \text{(la superficie),} \\ \Gamma_b &= \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 / (x, y) \in S, -\mathcal{H}(x, y) = z\} && \text{(el fondo),} \\ \Gamma_l &= \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 / (x, y) \in \partial S, -\mathcal{H}(x, y) \leq z \leq 0\} && \text{(la frontera lateral).}\end{aligned}$$

Sobre la superficie del mar, el arrastre del viento produce una tensión horizontal que fuerza el movimiento del agua. Diferentes parametrizaciones son posibles para la tensión de viento, siendo la más utilizada la que expresa una dependencia cuadrática respecto de la velocidad horizontal del viento (U_{10}, V_{10}) medida a una altura de $10m$:

$$(\tau_s^x, \tau_s^y) := \nu_V \left(\frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \frac{\rho_a}{\rho_0} C_s (U_{10}^2 + V_{10}^2)^{1/2} (U_{10}, V_{10}) \quad \text{sobre } \Gamma_s \times (0, T). \quad (8)$$

En (8), ρ_a es la densidad del aire y C_s una constante conocida como coeficiente de tensión de viento. Además, en congruencia con la hipótesis de techo rígido considerada, se impone la condición de velocidad vertical nula:

$$w = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_s \times (0, T). \quad (9)$$

Por otra parte, sobre el fondo del océano la velocidad normal debe anularse, lo cual impide el flujo de masa a través del mismo:

$$w + u \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} + v \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = 0 \quad \text{sobre } \Gamma_b \times (0, T). \quad (10)$$

No se consideran, por tanto, posibles fenómenos de filtración debidos a la porosidad del fondo.

La rugosidad del fondo introduce una fricción que frena el movimiento y que suele parametrizarse mediante una dependencia lineal respecto a la velocidad horizontal:

$$\begin{aligned}(\tau_b^x, \tau_b^y) &:= \nu_H n_x \left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \nu_H n_y \left(\frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \nu_V n_z \left(\frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ &= C_b(u, v) \quad \text{sobre } \Gamma_b \times (0, T),\end{aligned} \quad (11)$$

siendo $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ el vector normal exterior unitario a Γ y C_b un coeficiente de fricción lineal con el fondo (nótese que \mathbf{n} no es necesariamente vertical).

La frontera lateral Γ_l se descompone a su vez en $\Gamma_l = \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{out}}$ con $\Gamma_{\text{in}} \cap \Gamma_{\text{out}} = \emptyset$. Sobre Γ_{in} , que puede representar zonas de entrada de fluido o bien la línea de costa u otros contornos rígidos, se impone una condición de contorno de tipo Dirichlet:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_I \text{ sobre } \Gamma_{\text{in}} \times (0, T), \quad (12)$$

siendo \mathbf{u}_I una velocidad de entrada conocida. Sobre Γ_{out} , la frontera de salida de flujo, se impone una condición de Neumann homogénea que implica tensión nula:

$$\nu_H n_x \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \nu_H n_y \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} = \mathbf{0} \text{ sobre } \Gamma_{\text{out}} \times (0, T). \quad (13)$$

Debe especificarse, finalmente, una condición inicial para la velocidad:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^0 \text{ en } \Omega \times \{0\}, \quad (14)$$

siendo $\mathbf{u}^0(x, y, z)$ un campo de velocidades inicial de divergencia nula.

El problema a resolver, por tanto, está constituido por el sistema de ecuaciones en derivadas parciales (5)–(6), las condiciones de contorno (8)–(13) y la condición inicial (14).

2.4 Forma débil

Los métodos variacionales (en particular el método de los elementos finitos) consideran la forma débil de las ecuaciones diferenciales a resolver. De cara a introducir dicha forma débil en este caso y por simplicidad de exposición, se supondrá a partir de ahora que $\Gamma_l = \Gamma_{\text{in}}$ (o, equivalentemente, que $\Gamma_{\text{out}} = \emptyset$) y que $\mathbf{u}_I = \mathbf{0}$, es decir, que sobre toda la frontera lateral se impone condición de contorno de Dirichlet homogénea. En este caso, para cada $t \in (0, T)$, la velocidad $\mathbf{u}(\cdot, t)$ y la presión $p(\cdot, t)$ del fluido en el tiempo t pertenecen, respectivamente, a los espacios siguientes:

$$\begin{aligned} V &:= \left\{ \tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}) \in \mathbf{H}^1(\Omega) : \tilde{w} = 0 \text{ sobre } \Gamma_s, \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \text{ sobre } \Gamma_{\text{in}}, \right. \\ &\quad \left. \tilde{w} + \tilde{u} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} + \tilde{v} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial y} = 0 \text{ sobre } \Gamma_b \right\}, \\ Q &:= L^2(\Omega). \end{aligned}$$

La forma débil de la ecuación de momentos (5) se obtiene multiplicando ésta por una función $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}) \in V$ arbitraria, integrando en Ω y usando la fórmula de Green para los términos difusivos y las condiciones de contorno (8)

y (11). Todo ello conduce a:

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{u} \tilde{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \tilde{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} f(\mathbf{k} \times \mathbf{u}) \tilde{\mathbf{u}} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla q \tilde{\mathbf{u}} d\Omega \\
 & + \int_{\Omega} \left(\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial x} + \nu_H \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} + \nu_V \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial z} \right) d\Omega \\
 & = \int_{\Gamma_s} (\tau_s^x \tilde{u} + \tau_s^y \tilde{v}) d\Gamma + \int_{\Gamma_b} (\tau_b^x \tilde{u} + \tau_b^y \tilde{v}) d\Gamma + \int_{\Gamma_b} \mathbf{n}_\nu \cdot \nabla w \tilde{w} d\Gamma \\
 & - \frac{g}{\rho_0} \int_{\Omega} \left(\int_z^0 (\nabla_H \rho) ds \right) \tilde{\mathbf{u}} d\Omega,
 \end{aligned}$$

donde (τ_s^x, τ_s^y) y (τ_b^x, τ_b^y) se han definido respectivamente en (8) y (11) y se ha usado la notación $\mathbf{n}_\nu = (\nu_H n_x, \nu_H n_y, \nu_V n_z)$. La forma débil de la ecuación de continuidad (6), por otra parte, se obtiene multiplicando ésta por una función escalar $\tilde{q} \in Q$ arbitraria e integrando en Ω , dando lugar a:

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \tilde{q} d\Omega = 0.$$

3 Aproximación numérica

En esta Sección se describe el método numérico que hemos utilizado para la resolución del problema planteado en la Sección anterior. Se introducirá en primer lugar el esquema de integración temporal considerado y, a continuación, el método de aproximación espacial.

3.1 Integración temporal

Para la aproximación temporal del problema a resolver, se ha optado por el método de Euler retrógrado. Se trata de un esquema implícito e incondicionalmente estable. Otros modelos no hidrostáticos utilizan habitualmente métodos de tipo paso fraccionado (ver [6], [7]) para la integración temporal de las ecuaciones ([15], [36], [40]). Así pues, supongamos dado un tamaño del paso de tiempo $\Delta t > 0$ y pongamos $t_n = n\Delta t$ para $n = 0, \dots, [T/\Delta t]$; conocida una aproximación de la velocidad \mathbf{u}^n en t_n , se calculan aproximaciones \mathbf{u}^{n+1} y q^{n+1} de la velocidad y la presión en t_{n+1} evaluando todos los términos de las ecuaciones en t_{n+1} (excepto el término convectivo que se linealiza en \mathbf{u}^n), es decir, resolviendo las ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) & + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} + f \mathbf{k} \times \mathbf{u}^{n+1} + \nabla q^{n+1} \\
 & - \frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_V \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial z} \right) \\
 & = - \frac{g}{\rho_0} \int_z^0 (\nabla_H \rho^{n+1}) ds \quad \text{en } \Omega, \tag{15}
 \end{aligned}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{en } \Omega. \tag{16}$$

La velocidad \mathbf{u}^{n+1} debe cumplir, además, las condiciones de contorno (8)–(13).

La forma débil de este esquema semidiscreto consiste en hallar $\mathbf{u}^{n+1} = (u^{n+1}, v^{n+1}, w^{n+1}) \in V$ y $q^{n+1} \in Q$ tales que, para todas las funciones $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}) \in V$ y $\tilde{q} \in Q$, se tiene:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n) \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n+1} \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} f(\mathbf{k} \times \mathbf{u}^{n+1}) \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla q^{n+1} \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega \\
& + \int_{\Omega} \left(\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial x} + \nu_H \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial y} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial y} + \nu_V \frac{\partial \mathbf{u}^{n+1}}{\partial z} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial z} \right) d\Omega \\
& = \int_{\Gamma_s} (\tau_s^x \tilde{u} + \tau_s^y \tilde{v}) \, d\Gamma + \int_{\Gamma_b} (\tau_b^x (u^{n+1}) \tilde{u} + \tau_b^y (v^{n+1}) \tilde{v}) \, d\Gamma \\
& + \int_{\Gamma_b} \mathbf{n}_\nu \cdot \nabla w^{n+1} \tilde{w} \, d\Gamma - \frac{g}{\rho_0} \int_{\Omega} \left(\int_z^0 (\nabla_H \rho^{n+1}) \, ds \right) \tilde{\mathbf{u}} \, d\Omega, \\
& \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1}) \tilde{q} \, d\Omega = 0.
\end{aligned}$$

3.2 Discretización espacial en elementos finitos

El esquema semidiscreto (15)–(16) debe aproximarse en espacio con algún método numérico adecuado. La mayoría de modelos costeros existentes utilizan el clásico método de diferencias finitas para la aproximación espacial ([15], [36], [40], [52]). El método de los elementos finitos, en cambio, proporciona una mayor flexibilidad a la hora de representar la complicada geometría del océano, pues permite adaptar la malla a las irregulares líneas de costa y batimetrías del fondo. Se considerarán aquí, por lo tanto, elementos finitos tridimensionales (tetraédricos o hexaédricos) para la discretización del dominio espacial Ω .

Sea Ω_h una partición de Ω en elementos finitos, de tamaño $h > 0$. Supondremos que todos los elementos $K \in \Omega_h$ son imágenes de un elemento de referencia \hat{K} mediante las transformaciones afines $F_K: \hat{K} \rightarrow K$. Las incógnitas del problema, velocidad y presión, se aproximan entonces por funciones que son continuas en Ω y polinomiales en cada elemento K (expresadas en las variables de referencia en \hat{K}); nos centraremos en el caso de igual interpolación para la velocidad y la presión, en el cual ambas variables se aproximan por interpolación en los nodos de la misma malla mediante polinomios del mismo grado. La solución aproximada se halla, entonces, en los siguientes espacios de funciones:

$$\begin{aligned}
V_h & := \{ \tilde{\mathbf{u}}_h \in V : \forall K \in \Omega_h, \tilde{\mathbf{u}}_h|_K = \hat{\mathbf{u}}_K \circ F_K^{-1}, \hat{\mathbf{u}}_K \in (R_k)^3 \}, \\
Q_h & := \{ q_h \in C^0(\Omega) : \forall K \in \Omega_h, q_h|_K = \hat{q}_K \circ F_K^{-1}, \hat{q}_K \in R_k \}.
\end{aligned}$$

Aquí, $R_k = P_k$ es el espacio de polinomios de grado menor o igual que k para elementos tetraédricos y $R_k = Q_k$ el espacio de polinomios de grado menor

o igual que k en cada variable para elementos hexaédricos. La aproximación standard del problema (15)-(16) mediante el método de los elementos finitos consiste en hallar $\mathbf{u}_h^{n+1} = (u_h^{n+1}, v_h^{n+1}, w_h^{n+1}) \in V_h$ y $q_h^{n+1} \in Q_h$ tales que, para todas las funciones $\tilde{\mathbf{u}}_h = (\tilde{u}_h, \tilde{v}_h, \tilde{w}_h) \in V_h$ y $\tilde{q}_h \in Q_h$, se tiene:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \frac{\mathbf{u}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^n}{\Delta t} \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u}_h^n \cdot \nabla) \mathbf{u}_h^{n+1} \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega \\
 & + \int_{\Omega} f(\mathbf{k} \times \mathbf{u}_h^{n+1}) \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega + \int_{\Omega} \nabla q_h^{n+1} \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega \\
 & + \int_{\Omega} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}_h^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_h}{\partial x} + \nu_H \frac{\partial \mathbf{u}_h^{n+1}}{\partial y} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_h}{\partial y} + \nu_V \frac{\partial \mathbf{u}_h^{n+1}}{\partial z} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_h}{\partial z}) d\Omega \\
 & = \int_{\Gamma_s} (\tau_s^x \tilde{u}_h + \tau_s^y \tilde{v}_h) d\Gamma + \int_{\Gamma_b} (\tau_b^x (u_h^{n+1}) \tilde{u}_h + \tau_b^y (v_h^{n+1}) \tilde{v}_h) d\Gamma \\
 & + \int_{\Gamma_b} \mathbf{n}_\nu \cdot \nabla w_h^{n+1} \tilde{w}_h d\Gamma - \frac{g}{\rho_0} \int_{\Omega} \left(\int_z^0 (\nabla_H \rho^{n+1}) ds \right) \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega, \quad (17)
 \end{aligned}$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1}) \tilde{q}_h d\Omega = 0. \quad (18)$$

3.3 Estabilización

Es conocido que el esquema (17)-(18) puede dar lugar a inestabilidades de diferente tipo en la solución numérica. Por una parte, la ecuación de momentos (1) hereda las dificultades numéricas de los problemas de convección-difusión en los problemas con convección dominante ([14]); por otra parte, la presencia del término de Coriolis puede dar lugar también a inestabilidades en problemas con rotación alta ([22]). Sin embargo, para el rango de valores de los diferentes parámetros que se utilizan en las situaciones a las que se pretende aplicar el modelo, estas dificultades no suelen aparecer y resulta innecesario el uso de técnicas específicas de estabilización de la convección y la rotación.

La condición de incompresibilidad (6), en cambio, impone ciertas restricciones a la elección de los espacios de aproximación de la velocidad y la presión que impiden, en particular, el empleo de igual interpolación para ambas variables. Estas restricciones son debidas al carácter mixto de los problemas de flujo incompresible ([13]): para obtener una solución numérica estable y convergente dichos espacios deben verificar la condición inf-sup o LBB (ver [13]). Se han desarrollado combinaciones de elementos velocidad-presión que cumplen dicha condición ([12]), pero se ha observado que las formulaciones estabilizadas, como las de [3], [9], [11], [16], [25], [27] ó [28], entre muchas otras, resultan más eficientes que los pares de elementos estables (ver [48]). En estas formulaciones estabilizadas se introducen términos adicionales en el problema discreto, deducidos de maneras muy diversas, que aumentan la estabilidad de la solución numérica.

La técnica de estabilización de la presión que se usa aquí está basada en una proyección del gradiente de la presión. Dicha técnica fue estudiada previamente

en el contexto del problema de Stokes ([18]) y de la ecuación de Navier-Stokes incompresible estacionaria ([19], [21]) y no estacionaria ([5], [20]). La idea principal consiste en introducir, como nueva variable del problema, la proyección ortogonal del gradiente de la presión discreta en el espacio (de dimensión finita) de aproximación; se modifica entonces la ecuación de continuidad discreta (18) de manera consistente, añadiéndole la divergencia de la diferencia entre el gradiente de la presión y su proyección, ponderada en cada elemento con parámetros α_K adecuados. Se ha demostrado que este método permite el empleo de igual interpolación en elementos finitos para la velocidad y la presión en la resolución de problemas de flujo incompresible.

El espacio donde se determinará la proyección del gradiente de la presión \mathbf{r}_h^{n+1} , definido sobre la misma malla de elementos finitos que la velocidad y la presión, es el siguiente:

$$R_h = \{\mathbf{s}_h \in (\mathcal{C}^0(\Omega))^3 : \forall K \in \Omega_h, \mathbf{s}_h|_K = \hat{\mathbf{s}}_K \circ F_K^{-1}, \hat{\mathbf{s}}_K \in (R_k)^3\}.$$

El problema discreto estabilizado consiste por tanto en hallar $\mathbf{u}_h^{n+1} = (u_h^{n+1}, v_h^{n+1}, w_h^{n+1}) \in V_h$, $q_h^{n+1} \in Q_h$ y $\mathbf{r}_h^{n+1} \in R_h$ tales que, para todo $\tilde{\mathbf{u}}_h = (\tilde{u}_h, \tilde{v}_h, \tilde{w}_h) \in V_h$, $\tilde{q}_h \in Q_h$ y $\mathbf{s}_h \in R_h$:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{u}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^n) \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega + \int_{\Omega} (\mathbf{u}_h^n \cdot \nabla) \mathbf{u}_h^{n+1} \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega \\ & + \int_{\Omega} f(\mathbf{k} \times \mathbf{u}_h^{n+1}) \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega + \int_{\Omega} \nabla q_h^{n+1} \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega \\ & + \int_{\Omega} (\nu_H \frac{\partial \mathbf{u}_h^{n+1}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_h}{\partial x} + \nu_H \frac{\partial \mathbf{u}_h^{n+1}}{\partial y} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_h}{\partial y} + \nu_V \frac{\partial \mathbf{u}_h^{n+1}}{\partial z} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}_h}{\partial z}) d\Omega \\ & = \int_{\Gamma_s} (\tau_s^x \tilde{u}_h + \tau_s^y \tilde{v}_h) d\Gamma + \int_{\Gamma_b} (\tau_b^x (u_h^{n+1}) \tilde{u}_h + \tau_b^y (v_h^{n+1}) \tilde{v}_h) d\Gamma \\ & + \int_{\Gamma_b} \mathbf{n}_\nu \cdot \nabla w_h^{n+1} \tilde{w}_h d\Gamma - \frac{g}{\rho_0} \int_{\Omega} \left(\int_z^0 (\nabla_H \rho^{n+1}) ds \right) \tilde{\mathbf{u}}_h d\Omega, \quad (19) \\ & \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1}) \tilde{q}_h d\Omega + \sum_{K \in \Omega_h} \int_K \alpha_K \nabla q_h^{n+1} \nabla \tilde{q}_h d\Omega \\ & - \sum_{K \in \Omega_h} \int_K \sqrt{\alpha_K} \mathbf{r}_h^{n+1} \nabla \tilde{q}_h d\Omega = 0, \quad (20) \end{aligned}$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{r}_h^{n+1} \mathbf{s}_h d\Omega - \sum_{K \in \Omega_h} \int_K \sqrt{\alpha_K} \nabla q_h^{n+1} \mathbf{s}_h d\Omega = 0. \quad (21)$$

Resulta evidente a partir de (21) que \mathbf{r}_h^{n+1} es la proyección ortogonal sobre R_h del gradiente de la presión discreta ∇q_h^{n+1} , ponderado en cada elemento K por $\sqrt{\alpha_K}$.

Los coeficientes α_K se determinan mediante las fórmulas habituales de otros métodos de estabilización ([28]); en nuestro caso, es suficiente calcularlos mediante la siguiente expresión:



Figura 1: Imágenes de satélite para la localización del puerto de Barcelona (cortesía de Grifoll et al, [30]).

$$\alpha_K = \left(c_1 \frac{\nu}{h_K^2} + c_2 \frac{V_K}{h_K} + \frac{1}{\Delta t} \right)^{-1} \quad \forall K \in \Omega_h,$$

donde h_K es el tamaño del elemento K , V_K es una velocidad característica en K y c_1 y c_2 son constantes cuyos valores óptimos para elementos lineales y bilineales son $c_1 = 12$ y $c_2 = 2$ ([28]).

4 Algunos resultados numéricos

Se presentan en esta Sección algunos resultados numéricos que se han obtenido mediante el esquema (19)–(21) descrito en la Sección anterior. Se han considerado, en este caso, dos aplicaciones prácticas del modelo a sendos problemas costeros en el litoral catalán: el estudio de la circulación marina interior en el puerto de Barcelona y el estudio de las corrientes inducidas por el viento en la zona del Delta del río Ebro. Dichos ejemplos servirán, además, de validación del modelo propuesto.

4.1 El puerto de Barcelona

En este primer ejemplo se pretende estudiar la hidrodinámica en el interior del puerto de Barcelona como apoyo a su gestión medioambiental y como validación del modelo desarrollado.

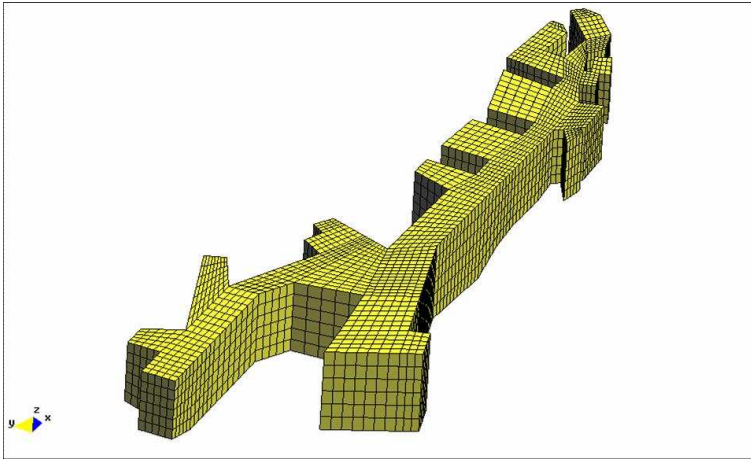


Figura 2: Malla computacional 3D del puerto de Barcelona (cortesía de Grifoll et al, [30]).

Se dispone en este caso de una serie de observaciones realizadas en una campaña de medidas llevada a cabo durante el período 18/11/2003 al 18/12/2003. Las mediciones efectuadas fueron, entre otras, las velocidades de la corriente en tres correntímetros situados en la bocana Norte (la zona natural de entrada de flujo al puerto en una situación meteorológica de invierno), en un punto a lo largo del canal y en la bocana Sur (la zona natural de salida de flujo del puerto), respectivamente. A partir del análisis de estos datos, se diseñó una situación promedio de estudio con un viento constante de $5m/s$ en dirección NW e imponiendo la velocidad de entrada medida en la bocana Norte, con el objetivo de reproducir las corrientes medidas en las otras dos estaciones.

En la Figura 1 se muestran unas imágenes de satélite de la zona de estudio. Tras la digitalización de la geometría del puerto, se generó una malla estructurada tridimensional de elementos hexaédricos que se muestra en la Figura 2 y que consta de 8,364 elementos y 11,284 nodos. Los parámetros físicos utilizados en este problema fueron un valor constante para la difusividad turbulenta vertical $\nu_V = 0,014$, el modelo de Smagorinski (2) con $C_S = 0,2$ para la difusividad turbulenta horizontal y un coeficiente de arrastre del viento de $C_s = 0,0014$. En el fondo del puerto se impuso una condición de no deslizamiento (velocidad nula).

Se muestran a continuación algunos resultados obtenidos tras alcanzar el estado estacionario, partiendo del fluido en reposo y bajo la acción del viento. En la Figura 3 se presentan las velocidades superficiales y en la Figura 4 las velocidades en una sección intermedia, a media profundidad.

De cara a comparar los resultados numéricos obtenidos con las mediciones de que se dispone, se muestran en las Figuras 5 y 6 los datos correspondientes a la zona central y a la bocana Sur, respectivamente. Puede observarse que el

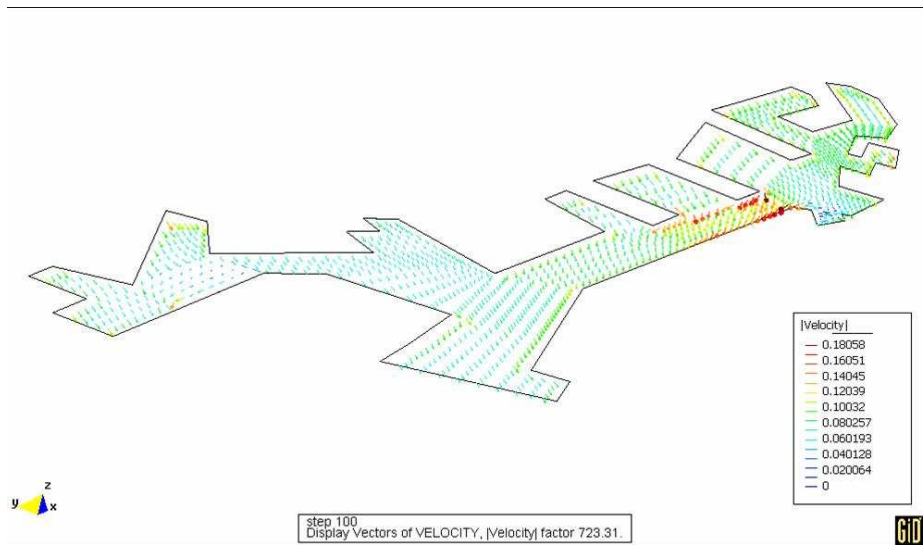


Figura 3: Velocidades calculadas en la capa superficial (cortesía de Grifoll et al, [30]).

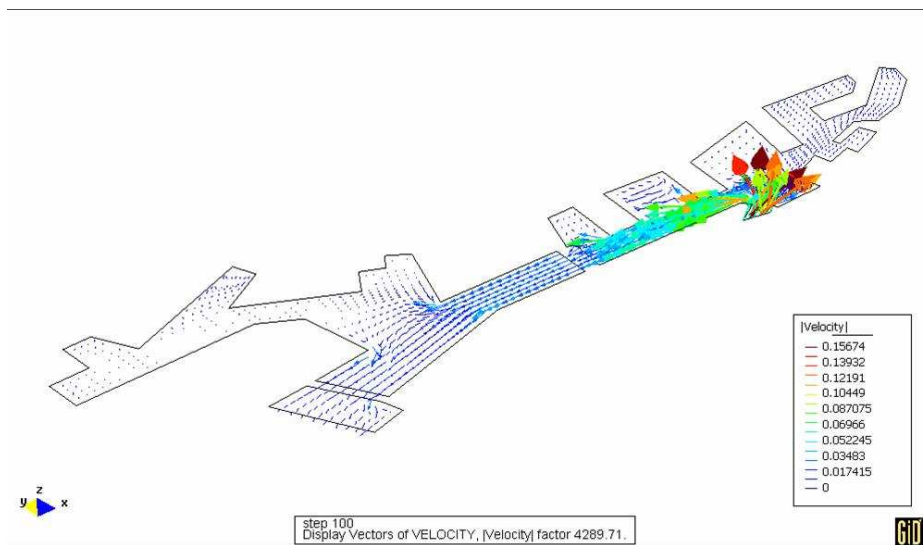


Figura 4: Velocidades calculadas en la capa intermedia (cortesía de Grifoll et al, [30]).

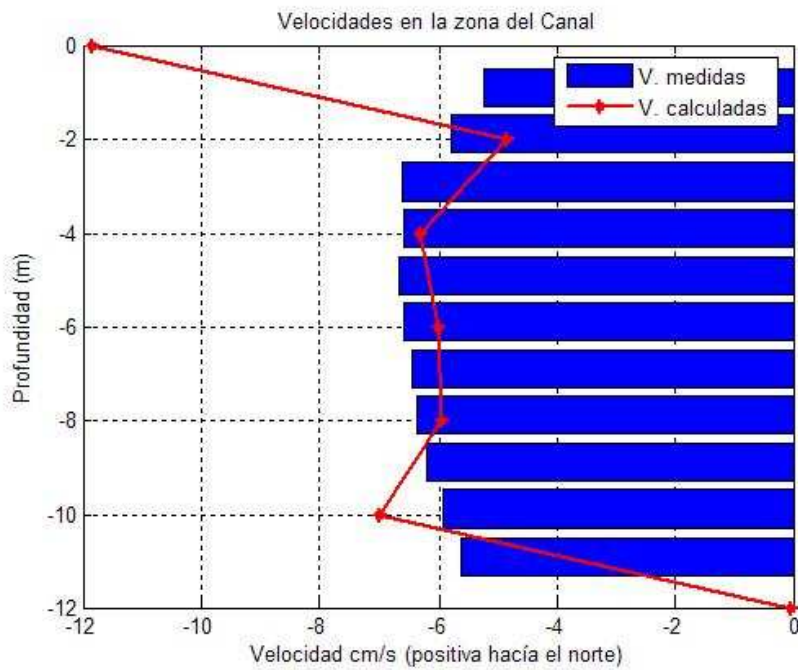


Figura 5: Velocidades normales en una sección en la zona central (cortesía de Grifoll et al, [30]).

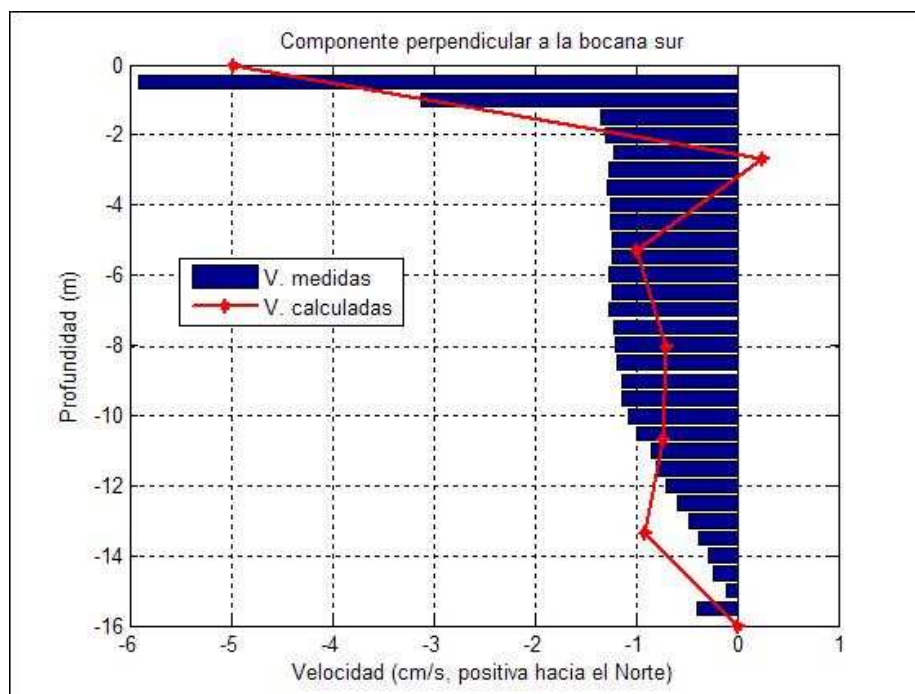


Figura 6: Velocidades normales en una sección en la bocana Sur (cortesía de Grifoll et al, [30]).

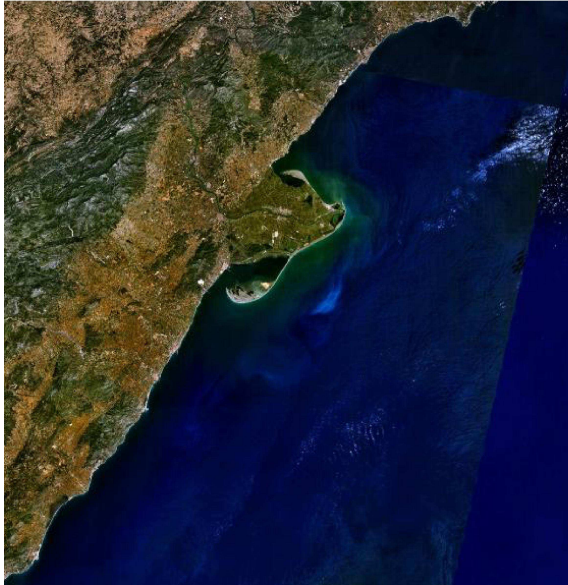


Figura 7: Imagen de satélite de la zona del delta del río Ebro .

modelo reproduce el fuerte gradiente vertical de la velocidad observado en las medidas en la bocana Sur. Las discrepancias observadas en la zona superficial de la zona central pueden deberse a la hipótesis de techo rígido empleada en el modelo numérico actual, que impide la sobreelevación del agua modificando así la corriente superficial. Otras causas posibles son la pobre resolución de la malla utilizada (el tamaño promedio de los elementos es de unos 3m) y el promediado temporal de la serie de observaciones efectuado, que supone que las medidas no representen una situación concreta. En todo caso, pretendemos repetir la resolución de este problema cuando el modelo incorpore superficie libre.

4.2 El Delta del río Ebro

En este segundo ejemplo se pretende calcular la circulación marina inducida por el viento en una región cercana al delta del río Ebro. En la Figura 7 se muestra

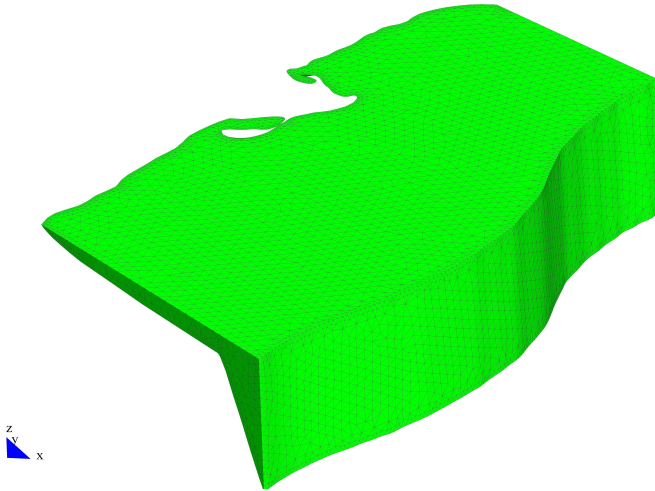


Figura 8: Malla computacional 3D para el delta del Ebro (cortesía de Maidana et al, [44]).

una imagen de satélite de la zona de estudio.

El dominio computacional está delimitado por la línea de costa, dos transectos (rectas perpendiculares a la costa) al Norte y al Sur del delta, respectivamente, y la isobata 600m (curva de nivel de la profundidad). La malla tridimensional no estructurada que se ha utilizado se muestra en la Figura 8; consta de 79,763 elementos tetraédricos y 20,978 nodos.

Para la resolución de este problema se han tomado valores constantes para las difusividades turbulentas $\nu_H = 10^3$ y $\nu_V = 10^{-2}$, un viento del Este de $8m/s$ y unos coeficientes de tensión de viento $C_s = 0,0014$ y de fricción con fondo $C_b = 0,001$. En la línea de costa se impuso velocidad nula, mientras que en el resto de contornos se impuso una condición de frontera abierta.

Fueron necesarios 163 pasos de tiempo de tamaño $\Delta t = 1$ hora para alcanzar el estado estacionario partiendo del reposo, con una tolerancia de 10^{-5} en el error relativo entre pasos de tiempo. En las Figuras 9, 10 y 11 se muestran las velocidades obtenidas en secciones horizontales a profundidades 0, 50 y 100 metros, respectivamente.

Por otra parte, en la Figura 12 se representan las isosuperficies del módulo de la velocidad, mientras que la Figura 13 muestra las isosuperficies de la presión calculada, que representa la componente no hidrostática de la presión. Puede observarse que en este ejemplo la rápida variación de la profundidad del fondo hace aparecer presiones no hidrostáticas no despreciables.

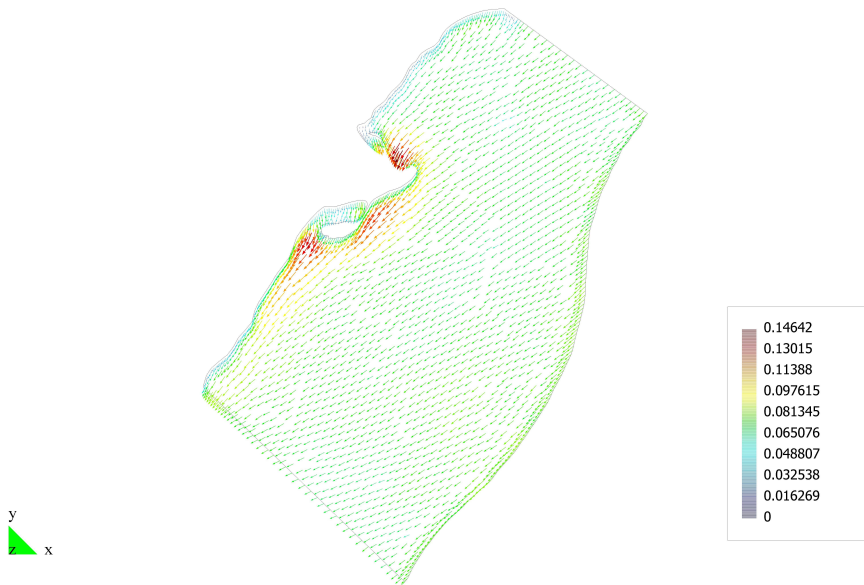


Figura 9: Velocidades superficiales (cortesía de Maidana et al, [44]).

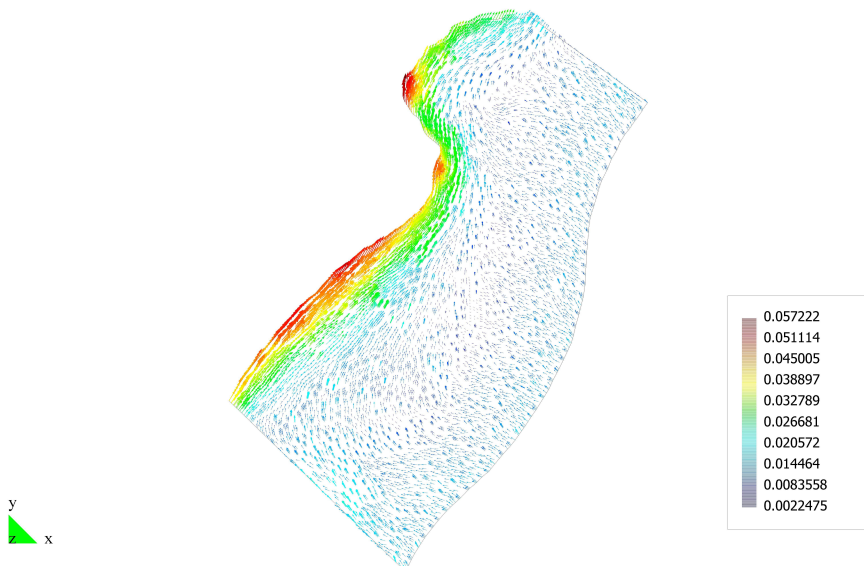


Figura 10: Velocidades en la sección $z = -50$ (cortesía de Maidana et al, [44]).

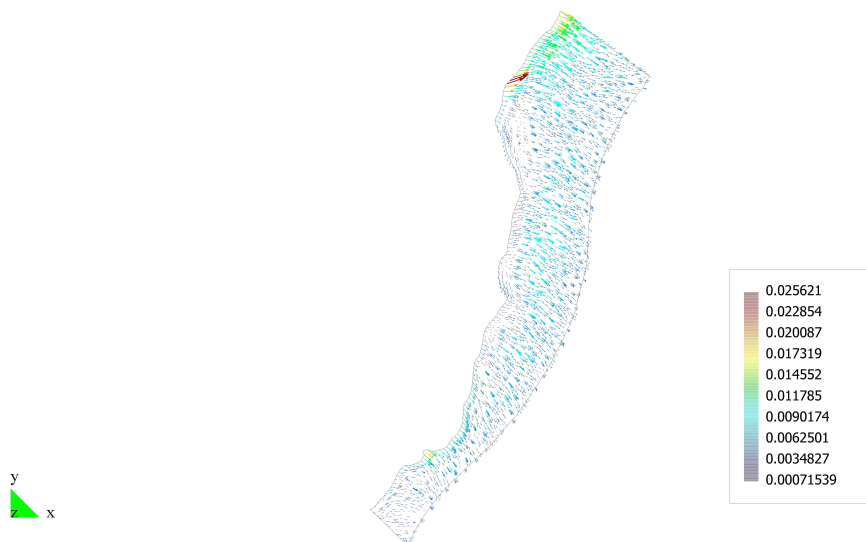


Figura 11: Velocidades en la sección $z = -100$ (cortesía de Maidana et al, [44]).

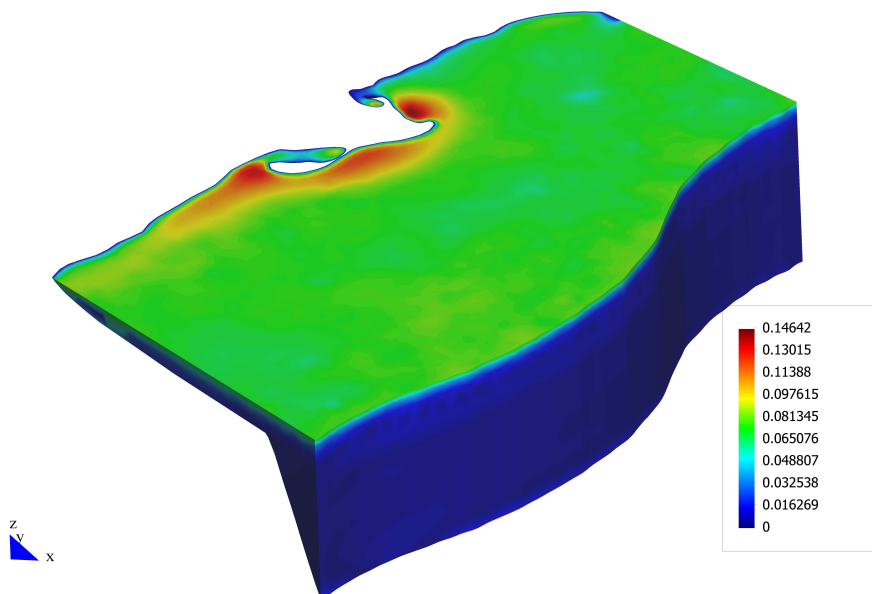


Figura 12: Isosuperficies del módulo de la velocidad (cortesía de Maidana et al, [44]).

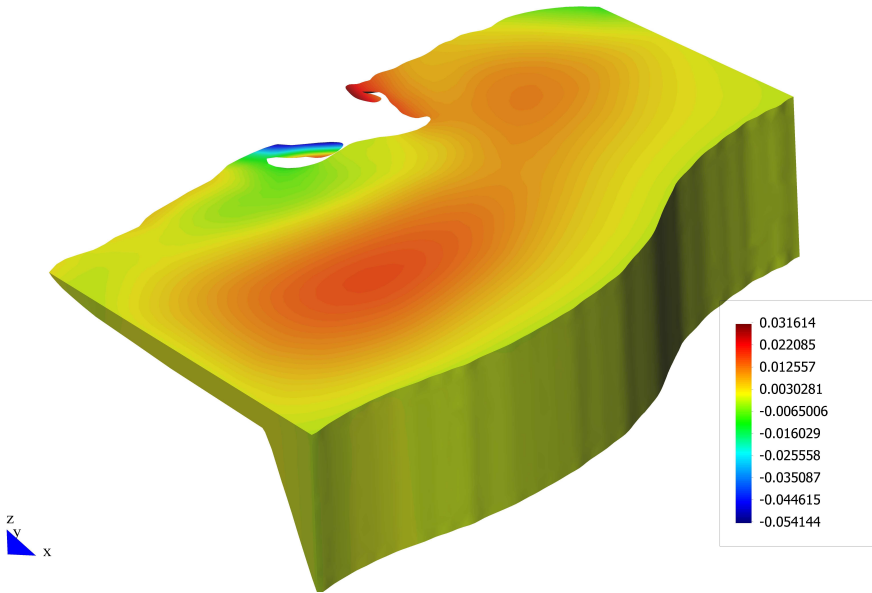


Figura 13: Isosuperficies de la presión no hidrostática (cortesía de Maidana et al, [44]).

4.3 Conclusiones

El modelado de la hidrodinámica marina en zonas costeras, de indudable interés práctico en la sociedad actual, representa un complejo problema matemático y numérico que admite enfoques muy diversos. Los modelos simplificados (y en particular los modelos hidrostáticos) son una buena herramienta, aunque en ellos, dependiendo de la situación considerada, se desprecian fenómenos que por sí mismos poseen relevancia. El modelo no hidrostático, tridimensional y en elementos finitos que se ha presentado proporciona resultados satisfactorios incluso en regiones cuya batimetría varíe rápidamente, reproduciendo efectos no hidrostáticos.

Algunas mejoras son posibles en el modelo actual, como por ejemplo la incorporación de una ecuación para la evolución de la altura de superficie libre o el acoplamiento de las ecuaciones de flujo con ecuaciones de evolución de la temperatura y la salinidad, variables que afectan al flujo a través de variaciones de la densidad. Ello permitirá el estudio de la hidrodinámica en zonas como la ría de Huelva o el Golfo de Vizcaya, de gran interés industrial y medioambiental.

Referencias

- [1] Y. Agnon, P.A. Madsen, H.A. Shaffer. A new approach to high-order Boussinesq models. *Jour. Fluid Mech.* 1999; **399**: 319–333.

- [2] P. Azérad, F. Guillén. Mathematical justification of the hydrostatic approximation in the primitive equations of geophysical fluid dynamics. *SIAM Jour. Math. Anal.* 2001; **33**: 847–859.
- [3] G. Barrenechea, F. Valentin. An unusual stabilized finite element method for a generalized Stokes problem. *Numer. Math.* 2002; **92**: 635–677.
- [4] A.F. Blumberg, G.L. Mellor. A description of a three-dimensional coastal ocean circulation model. *Three-dimensional coastal ocean models (Coastal and Estuarine Sciences Series)* Washington DC, American Geophysical Union 1987; **4**: 1–16.
- [5] J. Blasco, R. Codina. Space and time error estimates for a first order, pressure stabilized finite element method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Appl. Numer. Math.* 2001; **38**: 475–497.
- [6] J. Blasco, R. Codina. Error estimates for an operator-splitting method for incompressible flows. *Appl. Numer. Math.* 2004; **51**: 1–17.
- [7] J. Blasco, R. Codina, A. Huerta. A fractional-step method for the incompressible Navier–Stokes equations related to a predictor-multicorrector algorithm. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 1998; **28**: 1391–1419.
- [8] J. Blasco, A. Maidana, M. Espino. Un modelo implícito en elementos finitos estabilizados 3D para flujos oceánicos no hidrostáticos. *XIX Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones - IX Congreso de Matemática Aplicada*. Leganés, Madrid 2005. <http://cedya2005.uc3m.es>
- [9] P. Bochev, Z. Cai, T.A. Manteuffel, S.F. McCormick. Analysis of velocity-flux first-order system least-square principles for the Navier-Stokes equations. I. *SIAM Jour. Numer. Anal.* 1998; **35**: 990–1009.
- [10] P. Brandt, W. Alpers, J.O. Backhaus. Study of the generation and propagation of internal waves in the Strait of Gibraltar using a numerical model and synthetic aperture radar images of the European ERS1 satellite. *Jour. Geophysical Research* 1996; **101**: 14,237–14,252.
- [11] F. Brezzi, J. Douglas. Stabilized mixed methods for the Stokes problem. *Numer. Math.* 1988; **53**: 225–235.
- [12] F. Brezzi, R.S. Falk. Stability of higher-order Hood–Taylor methods. *SIAM Jour. Numer. Anal.* 1991; **28**: 581–590.
- [13] F. Brezzi, M. Fortin. *Mixed and Hybrid finite element methods*. Springer Series in Computational Mathematics, 15. Springer–Verlag, 1991.
- [14] A.N. Brooks, T.J.R. Hughes. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 1982; **32**: 199–259.

- [15] V. Casulli, P. Zanolli. Semi-implicit numerical modelling of nonhydrostatic free-surface flows for environmental problems. *Mathematical and Computer Modelling* 2002; **36**: 1131–1149.
- [16] T. Chacón. A term-by-term stabilization algorithm for the finite element solution of incompressible flow problems. *Numer. Math.* 1998; **79**: 283–319.
- [17] T. Chacón, D. Rodríguez. A stabilized space-time discretization for the primitive equations in oceanography. *Numer. Math.* 2004; **98**: 427–475.
- [18] R. Codina, J. Blasco. A finite element formulation for the Stokes problem allowing equal velocity-pressure interpolation. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 1997; **143**: 373–391.
- [19] R. Codina, J. Blasco. Analysis of a pressure-stabilized finite element approximation of the stationary Navier-Stokes equations. *Numer. Math.* 2000; **87**: 59–81.
- [20] R. Codina, J. Blasco. Stabilized finite element method for the transient Navier-Stokes equations based on a pressure gradient projection. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 2000; **182**, **3-4**: 277-300.
- [21] R. Codina, J. Blasco, G.C. Buscaglia, A. Huerta. Implementation of a stabilized finite element formulation for the incompressible Navier-Stokes equations based on a pressure gradient projection. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 2001; **37**: 419–444.
- [22] R. Codina, O. Soto. Finite element solution of the Stokes problem with dominating Coriolis force. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 1997; **142**: 215–234.
- [23] S. Danilov, G. Kivman, J. Schröter. A finite-element ocean model: principles and evaluation. *Ocean Modelling* 2004; **6**: 125–150.
- [24] C. Dawson, J. Proft. Coupled discontinuous and continuous Galerkin finite element methods for the depth-integrated shallow water equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 2004; **193**: 289–318.
- [25] J. Douglas, J. Wang. An absolutely stabilized finite element method for the Stokes problem. *Math. Comp.* 1989; **52**: 495–508.
- [26] M. Espino, A. Sánchez-Arcilla, M.A. García. Wind-induced mesoscale circulation off the Ebro delta, NW Mediterranean: a numerical study. *Jour. of Marine Systems* 1998; **16**: 235–251.
- [27] L.P. Franca, S.L. Frey. Stabilized finite element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 1992; **99**: 209–233.

- [28] L.P. Franca, T.J.R. Hughes. Convergence analyses of Galerkin least-squares methods for symmetric advective-diffusive forms of the Stokes and incompressible Navier-Stokes equations. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 1993; **105**: 285-298.
- [29] P. Galán, R. Bermejo. Un modelo Semilagrangiano de Elementos Finitos de alto orden para resolver las Ecuaciones Primitivas del océano. *XIX Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones - IX Congreso de Matemática Aplicada*. Leganés, Madrid 2005. <http://cedya2005.uc3m.es>
- [30] M. Grifoll, M. Espino, A. Maidana, J. Blasco, A. Sanchez-Arcilla. Estudio numérico tridimensional de la hidrodinámica del puerto de Barcelona como apoyo a su gestión medioambiental. *Congreso Métodos Numéricos en Ingeniería 2005*. Granada 2005. Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería y Associação Portuguesa de Mecânica Teórica. ISBN: 84-95999-74-9.
- [31] F. Guillén-González, D. Rodríguez-Gómez. Bubble finite elements for the primitive equations of the ocean. *Numer. Math.* 2005; **101**: 689-728.
- [32] P.E. Holloway, E. Pelinovsky, T. Talipova, B. Barnes. A generalized Korteweg-de Vries model for internal tide transformation in the coastal zone. *Jour. Geophysical Research* 1999; **104**: 18,333-18,350.
- [33] V.A.S. Ivanov, E. Pelinovsky, T. Talipova, Y. Troitskaya. Static estimation of the non-linear long internal wave parameters in the Black Sea test area off the South Crimea. *Marine Hydrophysical Jour.* 1994; **4**: 9-17.
- [34] J.E. Jones. Coastal and shelf-sea modelling in the European context. *Oceanography and Marine Biology: an Annual Review* 2002; **40**: 37-141.
- [35] J. Kampf, J.O. Backhaus. Shallow, brine-driven free convection in polar oceans. Nonhydrostatic numerical process studies. *Jour. Geophysical Research* 1998; **103**: 5577-5593.
- [36] M.B. Koçyigit, R. A. Falconer, B. Lin. Three-dimensional numerical modelling of free surface flows with non-hydrostatic pressure. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 2002; **40**: 1145-1162.
- [37] J. Laanearu, U. Lips, P. Lundberg. On the application of hydraulic theory to the deep-water flow through the Irbe Strait. *Jour. of Marine Systems* 2000; **25**: 323-332.
- [38] J.G. Lafuente, J.M. Vargas, F. Plaza, T. Sarhan, J. Candela, B. Bascheck. Tide at the Eastern Section of the Strait of Gibraltar. *Jour. of Geophysical Research* 2000; **105**: 14,197-14,213.
- [39] D.Y. Le Roux, G.F. Carey. Dispersion analysis of the least-squares finite-element shallow-water system. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 2003; **42**: 607-622.

- [40] P. Lin, C.W. Li. A σ -coordinate three-dimensional numerical model for surface wave propagation. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 2002; **38**: 1045–1068.
- [41] J.L. Lions, R. Temam, S. Wang. On the equations of large scale ocean. *Nonlinearity* 1992; **5**: 1007–1053.
- [42] J. Macías, C. Parés, M.J. Castro. Improvement and generalization of a finite element shallow-water solver to multi-layer systems. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 1999; **31**: 1037–1059.
- [43] M.A. Maidana, J. Blasco, M. Espino. Un método estabilizado en elementos finitos 3D para el estudio de las corrientes oceánicas. *VI Congreso de Metodos Computacionais em Engenharia*. Lisboa, Portugal 2004. Associação Portuguesa de Mecânica Teórica y Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería. ISBN: 972-49-2008-9.
- [44] M.A. Maidana, J. Blasco, M. Espino. An implicit three-dimensional finite element model for non-hydrostatic coastal flows. *Inter. Jour. Num. Meth. for Heat and Fluid Flow*, enviado. También disponible en <http://www.ma1.upc.edu/recerca/preprints/0405/040502blasco.pdf>
- [45] M.A. Maidana, J. Blasco, M. Espino, A. Sanchez-Arcilla. Un modelo 3D en elementos finitos para el estudio de flujos geofísicos. Aplicaciones oceanográficas. *V Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*. Madrid 2002. Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería. ISBN: 84-95999-03-X.
- [46] M.A. Maidana, J.J. Naudin, M. Espino, M.A. García, A. Sánchez-Arcilla. Feasibility and usefulness of diagnostic calculations of the mean circulation in the vicinity of the Ebro mouth. Model tests against field data. *Continental Shelf Research* 2002; **22**: 229–245.
- [47] J. Marshall, H. Jones, C. Hill. Efficient ocean modelling using non-hydrostatic algorithms. *Jour. of Marine Systems* 1998; **18**: 115–134.
- [48] S. Norburn, D. Silvester. Stabilized vs. stable mixed methods for incompressible flows. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 1998; **166**: 131–141.
- [49] F. Ozanne, A.J. Chadwick, D.A. Huntley, D.J. Simmonds, J. Lawrence. Velocity predictions for shoaling and breaking waves with a Boussinesq-type model. *Coastal Engineering* 2000; **41**: 361–397.
- [50] J. Pedlowski. *Geophysical Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, New York. 2nd. Edition, 1987..
- [51] C.Y. Shen, T.E. Evans. A free-surface hydrodynamic model for density-stratified flow in the weakly to strongly non-hydrostatic regime. *Jour. of Computational Physics* 2004; **200**: 695–717.

- [52] G. Stelling, M. Zijlema. An accurate and efficient finite-difference algorithm for non-hydrostatic free-surface flow with application to wave propagation. *Int. Jour. Num. Meth. Fluids* 2003; **43**: 1–23.
- [53] H.J. Vested, P. Berg, T. Hurenholdt. Dense water formation in the Northern Adriatic. *Jour. of Marine Systems* 1998; **18**: 135–160.
- [54] H. Yuan, C.H. Wu. A two-dimensional vertical non-hydrostatic σ model with an implicit method for free-surface flows. *Inter. Jour. Num. Meth. Fluids* 2004; **44**: 811–835.
- [55] O.C. Zienkiewicz, P. Ortíz. A split-characteristic based finite element model for the shallow water equations. *Inter. Jour. Num. Meth. Fluids* 1995; **20**: 1061–1080.

NUMERICAL MICROMAGNETICS: A REVIEW

CARLOS J. GARCÍA-CERVERA

Mathematics Department, University of California, Santa Barbara, CA 93106, USA

cgarcia@math.ucsb.edu

Abstract

Numerical simulation has become an important tool in the study of both static and dynamic issues in ferromagnetic materials. We present a review of some of the recent advances in numerical Micromagnetics.

Key words: *Micromagnetics, Landau-Lifshitz equation*

AMS subject classifications: *65M06 65Z05 35Q60*

1 Introduction

A ferromagnetic material is one that possesses spontaneous magnetization. The magnetization in ferromagnetic materials can exhibit intricate domain structures, characterized by areas where the magnetization varies slowly, separated by sharp transition layers, where the orientation of the magnetization changes on a much shorter lengthscale [76, 60]. A first attempt to explain these domain structures was carried out by Weiss [108], who introduced the idea of a molecular field responsible for the orientation of the magnetization. The quantum mechanical origin of this molecular field was discovered by Heisenberg [52], who explained it as an exchange field that tends to align the spins.

Ferromagnetic materials are typically bistable, and one can switch between different configurations using a magnetic field. For this reason, the main application of ferromagnetic materials has been in the magnetic recording industry. With the discovery of giant magneto resistance (GMR) and interlayer exchange coupling, new applications of layered magnetic structures are being considered [92, 114, 54]. Multilayers have good permanent magnet properties, and in particular, a high coercive field and approximately rectangular hysteresis loop [94]. For that reason multilayers are an integral part of magnetic memories (MRAMs), and have been one of the most important applications of ferromagnetic thin films in the past few years.

In Micromagnetics, the quantity of interest is the *magnetization* (\mathbf{M}); mathematically, it is a vector field of constant length M_s . In this article we will use physical units in the international system (S.I.). The fundamental

dimensions used will be that of mass (M), length (L), time (T), and current (A). With this convention, the magnetization has units of A/m , and dimensions $[\mathbf{M}] = [M_s] = AL^{-1}$. The S.I. unit for force is the *Newton* (N), and for magnetic induction the *Tesla* (T).

The domain structures observed in ferromagnetic materials are understood as either local, or global minimizers of the Landau-Lifshitz energy [76], which is the sum of several contributions:

$$F_{LL}[\mathbf{M}] = F_a[\mathbf{M}] + F_e[\mathbf{M}] + F_s[\mathbf{M}] + F_Z[\mathbf{M}]. \quad (1)$$

For a magnetic sample occupying a domain $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, the different contributions to the energy in (1) are:

1. **Anisotropy energy:** The electronic structure of the underlying crystalline lattice induces a preferred orientation for the spins. This is described by a term of the form

$$F_a[\mathbf{M}] = \int_{\Omega} \Phi \left(\frac{\mathbf{M}}{M_s} \right) d\mathbf{x},$$

where $\Phi : S^2 \rightarrow \mathbb{R}^+$ is a smooth (C^∞) function. In the case of a uniaxial material, there is a preferred axis, say OX , in which case the anisotropy energy takes the form

$$F_a[\mathbf{M}] = \frac{K_u}{M_s^2} \int_{\Omega} (M_2^2 + M_3^2) d\mathbf{x},$$

where K_u is a material parameter (in units of J/m^3 , and dimensions $[K_u] = ML^{-1}T^{-2}$).

Although only uniaxial materials will be considered in this review, materials can present other types of crystalline anisotropy, such as cubic.

2. **Exchange Energy:** The fundamental property of ferromagnetic materials is that the spins experience the presence of an exchange field that favors alignment along a common direction. This is described by an energy term of the form

$$F_e[\mathbf{M}] = \frac{C_{ex}}{M_s^2} \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{M}|^2 d\mathbf{x}.$$

The exchange constant C_{ex} has units of J/m , and dimensions $[C_{ex}] = MLT^{-2}$.

3. **Stray Field Energy:** A magnetized sample generates a magnetic field, which can be obtained by solving the Maxwell equations [57]. We refer to this magnetic field as *stray field*, or *self-induced field*. In the absence of electrical currents and charges, the Maxwell equations for the stray field, \mathbf{H}_s , and the magnetic induction, \mathbf{B} , reduce to

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H}_s &= 0. \end{aligned}$$

The magnetic field, magnetic induction, and magnetization are related by

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H}_s + \mathbf{M}). \quad (2)$$

In (2), μ_0 is the magnetic permeability of vacuum, which has a fixed value of $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} N/A^2$, and dimensions $[\mu_0] = MLT^{-2}A^{-2}$.

From the second equation in (2) it follows that $\mathbf{H}_s = -\nabla U$ for some scalar function U , usually referred to as magnetostatic potential. The first equation in (2) may therefore be rewritten as

$$\operatorname{div} (-\nabla U + \mathbf{M}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (3)$$

understood in the sense of distributions, i.e., $U \in H^1(\mathbb{R}^3)$ satisfies

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nabla U \cdot \nabla v = \int_{\Omega} \mathbf{M} \cdot \nabla v, \quad \forall v \in H^1(\mathbb{R}^3). \quad (4)$$

The stray field (or self-induced) energy is

$$F_s = \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla U|^2 d\mathbf{x}.$$

From (4) with $v = U$, it follows that

$$F_s[\mathbf{M}] = \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla U|^2 d\mathbf{x} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \mathbf{M} \cdot \nabla U d\mathbf{x} = -\frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \mathbf{H}_s \cdot \mathbf{M}.$$

Equation (4) can be rewritten as

$$\Delta U = \begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{M} & \text{in } \Omega, \\ 0 & \text{outside } \Omega, \end{cases} \quad (5)$$

together with the jump conditions

$$[U]_{|\partial\Omega} = 0, \quad (6)$$

$$\left[\frac{\partial U}{\partial \nu} \right]_{|\partial\Omega} = -\mathbf{M} \cdot \nu. \quad (7)$$

Here $[v]_{|\partial\Omega}$ represents the jump of v at the boundary of Ω :

$$[v]_{|\partial\Omega}(x) = \lim_{\substack{y \rightarrow x \\ y \in \Omega^c}} v(y) - \lim_{\substack{y \rightarrow x \\ y \in \Omega}} v(y),$$

and ν is the unit outward normal on $\partial\Omega$. The equation can be solved explicitly [57], and the solution is given by

$$U(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (8)$$

Here $N(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x}|}$ is the Newtonian potential.

Using Plancherel's Identity [111] the stray field energy can be written in Fourier space as

$$F_s[\mathbf{M}] = \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \widehat{\mathbf{M}})^2}{|\boldsymbol{\xi}|^2} d\boldsymbol{\xi}. \quad (9)$$

From equation (5)-(7) or (9), we can see that the stray field energy can be thought of as a soft penalization of both the divergence of \mathbf{M} in the bulk, and the normal component of \mathbf{M} on the boundary of the domain.

4. **Zeeman Energy:** In the presence of an external magnetic field \mathbf{H}_e , the magnetization tends to align with it. This translates into an energy term of the form

$$F_Z[\mathbf{M}] = -\mu_0 \int_{\Omega} \mathbf{H}_e \cdot \mathbf{M} dx. \quad (10)$$

Remark 1 *Changes in the magnetization may produce deformations in the crystalline lattice; and vice-versa. A deformation in a ferromagnetic material can induce changes in the magnetization distribution, a phenomenon known as Magnetostriction [62, 58, 25, 26]. This ability to transform magnetic energy into kinetic energy makes ferromagnetic materials good candidates for sensors and actuators. These elastic effects, however, will not be considered here.*

In what follows, we consider the Landau-Lifshitz energy

$$F_{LL}[\mathbf{M}] = \frac{K_u}{M_s^2} \int_{\Omega} (M_2^2 + M_3^2) + \frac{C_{ex}}{M_s^2} \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{M}|^2 + \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla U|^2 - \mu_0 \int_{\Omega} \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_e. \quad (11)$$

The energy landscape of (11) is quite rich, and by now the structure of minimizers is fairly well understood [76, 93, 55, 33, 20, 35, 27, 89, 102, 24]. Examples of minimizers of (11) are shown in figures 1 and 2.

The relaxation process of the magnetization distribution in a ferromagnetic material is described by the Landau-Lifshitz equation [76],

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{\mu_0 \gamma}{1 + \alpha^2} \mathbf{M} \times \mathcal{H} - \frac{\mu_0 \gamma \alpha}{M_s(1 + \alpha^2)} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathcal{H}), \quad (12)$$

where $|\mathbf{M}| = M_s$ is the saturation magnetization, and is usually set to be a constant far from the Curie temperature; γ is the gyromagnetic ratio, and the first term on the right hand side is the gyromagnetic term; α is the dimensionless damping coefficient, and the second term on the right hand side is the damping term; \mathcal{H} is the local or effective field, computed from the Landau-Lifshitz free energy functional:

$$\mathcal{H} = -\frac{\delta F_{LL}}{\delta \mathbf{M}}.$$

Using the expression (11) for the free energy functional, we get

$$\mathcal{H} = -\frac{2K_u}{M_s^2} (M_2 \mathbf{e}_2 + M_3 \mathbf{e}_3) + \frac{2C_{ex}}{M_s^2} \Delta \mathbf{M} - \mu_0 \nabla U + \mu_0 \mathbf{H}_e. \quad (13)$$

Physical Parameters for Permalloy	
K_u	100 J/m^3
C_{ex}	$1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$
M_s	$8 \times 10^5 \text{ A/m}$
γ	$1.76 \times 10^{11} (\text{Ts})^{-1}$
α	0.01

Table 1: Typical values of the physical parameters in the Landau-Lifshitz equation (12) for Permalloy. Permalloy is an alloy of Nickel (80%) and Iron (20%), frequently used in magnetic storage devices.

Here the notation $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0)$, and $\mathbf{e}_3 = (0, 0, 1)$ was used. Typical values for the physical parameters in (11) are included in Table 1.

The Landau-Lifshitz equation (12) can be written equivalently as

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\mu_0 \gamma \mathbf{M} \times \mathcal{H} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t}, \quad (14)$$

known as the Landau-Lifshitz-Gilbert equation [42]. Equations (12) and (14) must be supplemented with an initial condition ($\mathbf{M}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{M}_0(\mathbf{x})$), and with natural boundary conditions:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \nu} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega,$$

where ν denotes the outward unit normal on $\partial\Omega$.

The gyromagnetic term in the Landau-Lifshitz equation (12) is a conservative term, whereas the damping term is dissipative. In the absence of damping ($\alpha = 0$), equation (12) is related to the symplectic flow of harmonic maps [104]. This equation is also known as Schrödinger map equation because of its connection to the nonlinear Schrödinger equation found by Lakshmanan and Nakamura [74]. As a result, some of the work in that area has been connected to micromagnetics [65, 66, 48, 19, 17, 81, 46, 47].

In the high damping limit ($\alpha \rightarrow \infty$), the equation is related to the heat flow for harmonic maps [103, 16, 84]. In recent years there has been a lot of work regarding the existence and regularity of solutions to the Landau-Lifshitz equation (12) [106, 1, 8, 113, 109, 45, 14, 11, 12, 13, 18, 83, 40].

Equation (12) describes the dynamics of the magnetization at $O^\circ\text{K}$. At nonzero temperature, the effective field is customarily added a stochastic term [61, 41, 91]. The Langevin dynamical equations are

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\frac{\mu_0 \gamma}{1 + \alpha^2} \mathbf{M} \times \left(\mathcal{H} + \sqrt{\sigma} \dot{W} \right) - \frac{\mu_0 \gamma \alpha}{M_s (1 + \alpha^2)} \mathbf{M} \times \left(\mathbf{M} \times \left(\mathcal{H} + \sqrt{\sigma} \dot{W} \right) \right), \quad (15)$$

where σ is determined by the fluctuation-dissipation theorem [73, 61, 41]:

$$\sigma = \frac{2\alpha k_B T}{\mu_0^2 \gamma M_s}.$$

In (15), $\dot{\mathcal{W}}$ represents the effect of thermal fluctuations, and it is uncorrelated, independent, Gaussian white noise, characterized by the moments

$$\langle \dot{\mathcal{W}}_i(t) \rangle = 0, \text{ and } \langle \dot{\mathcal{W}}_i^j(t) \dot{\mathcal{W}}_k^l(t') \rangle = \delta_{ik} \delta_{jl} \delta(t - t').$$

In (1), $\langle v \rangle$ represents the expected value of the random variable v ; k_B is the Boltzmann constant ($k_B = 1.38054 \times 10^{-23}$ Joules/degree), T is the absolute temperature, and γ is the gyromagnetic ratio. The subindices in $\dot{\mathcal{W}}$ represent different spatial locations, and the superindices represent each vector component of $\dot{\mathcal{W}}$. Equation (15) must be understood in the Stratonovich sense [88, 41]. We show in Appendix A that when the equation is interpreted in the Ito sense, the length of the magnetization is not preserved.

Understanding the long term dynamics of the Landau-Lifshitz system (12) or (15) is of practical interest in the design of effective mechanisms for magnetization reversal in computer memory cells [22]. In the simulation of the magnetization reversal process, it is important to be able to resolve the different small length scales involved, in particular, magnetic domain walls, and magnetic vortices, since these are responsible for the switching anomalies observed in experiments with submicron patterned NiFe arrays [101, 100].

In this article we present a review of the new developments in the numerical simulation of the Landau-Lifshitz equation in the presence and absence of thermal effects.

1.1 Dimensionless variables

For completeness, we present a non-dimensionalization of the Landau-Lifshitz equation, which will be used in what follows. The Landau-Lifshitz energy can be written in dimensionless variables by rescaling $\mathbf{M} = M_s \mathbf{m}$, $\mathbf{H}_s = M_s \mathbf{h}_s$, $U = M_s u$, $\mathbf{H}_e = M_s \mathbf{h}_e$, $\mathbf{x} = L \mathbf{x}'$, and $F_{LL} = (\mu_0 M_s^2) F'_{LL}$:

$$F'_{LL}[\mathbf{m}] = q \int_{\Omega'} (m_2^2 + m_3^2) d\mathbf{x}' + \epsilon \int_{\Omega'} |\nabla \mathbf{m}|^2 + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u|^2 d\mathbf{x}' - \int_{\Omega'} \mathbf{h}_e \cdot \mathbf{m} d\mathbf{x}', \quad (16)$$

where $q = 2K_u/(\mu_0 M_s^2)$ and $\epsilon = 2C_{ex}/(\mu_0 M_s^2 L^2)$ are now dimensionless.

Upon rescaling time, $t = (1 + \alpha^2)(\mu_0 \gamma M_s)^{-1} t'$, we can write the Landau-Lifshitz equation as

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t'} = -\mathbf{m} \times \mathbf{h} - \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{m} \times \mathbf{h}, \quad (17)$$

where

$$\mathbf{h} = -q(m_2 \mathbf{e}_2 + m_3 \mathbf{e}_3) + \epsilon \Delta \mathbf{m} - \nabla u + \mathbf{h}_e. \quad (18)$$

The Landau-Lifshitz-Gilbert equation can be written as

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tilde{t}} = -\mathbf{m} \times \mathbf{h} + \alpha \mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tilde{t}},$$

where we have done a different rescaling of time: $t = (\mu_0 \gamma M_s)^{-1} \tilde{t}$.

The Stochastic Landau-Lifshitz equation can be written in dimensionless variables as

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\mathbf{m} \times (\mathbf{h} + \sqrt{\eta} \dot{\omega}) - \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{m} \times (\mathbf{h} + \sqrt{\eta} \dot{\omega}),$$

where

$$\eta = \frac{2\alpha k_B T}{\mu_0 M_s^2 L^3 (1 + \alpha^2)}, \quad (19)$$

and $\dot{\omega}$ is uncorrelated, independent, Gaussian white noise. The parameter η in (19) represents the ratio of thermal energy ($\sim k_B T$), to magnetic energy ($\sim \mu_0 M_s^2 L^3$). It follows that as the dimensions of the magnetic domain are reduced, thermal effects become more important. This has important technological implications, as it may hinder the development of highly dense nano-scale magnetic devices.

2 Time-stepping Schemes for the Landau-Lifshitz Equation

The dynamics of the magnetization distribution in a ferromagnetic thin film is an interesting and important problem from both a scientific and a technological point of view. Customarily, the main interest in these films has been their application in the magnetic recording industry. More recently, interest on using them as magnetic memory devices (MRAM) has given a greater incentive to study this subject.

2.1 Method of Lines

A traditional method for the numerical simulation of a partial differential equation is the Method of Lines. The right hand side of equation (17) is discretized in space. To fix ideas, we will only consider finite difference approximations, although spectral methods or finite elements can be used as well. Let us denote by $\mathbf{M} = \{\mathbf{m}_i\}_{i \in I}$ the discrete set of unknowns, which represent the value of the magnetization at the grid points. Let us denote the discretization of the right hand side of equation (17) by $\mathbf{F}_h(\mathbf{M}, t)$:

$$(\mathbf{F}_h(\mathbf{M}, t))_i = -\mathbf{m}_i \times \mathbf{h}_i - \alpha \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_i \times \mathbf{h}_i), \quad (20)$$

where

$$\mathbf{h}_i = -q(m_{i,2} \mathbf{e}_2 + m_{i,3} \mathbf{e}_3) + \epsilon \Delta_h \mathbf{m}_i - \nabla u_i + \mathbf{h}_e. \quad (21)$$

In (21), we consider the standard approximation to the Laplacian using centered finite differences, and ∇u_i is the value of the stray field evaluated at gridpoint \mathbf{x}_i . This can be computed using finite differences, or directly from the integral representation (8).

Upon spatial discretization, the resulting system of ordinary differential equations is

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \mathbf{F}_h(\mathbf{M}, t). \quad (22)$$

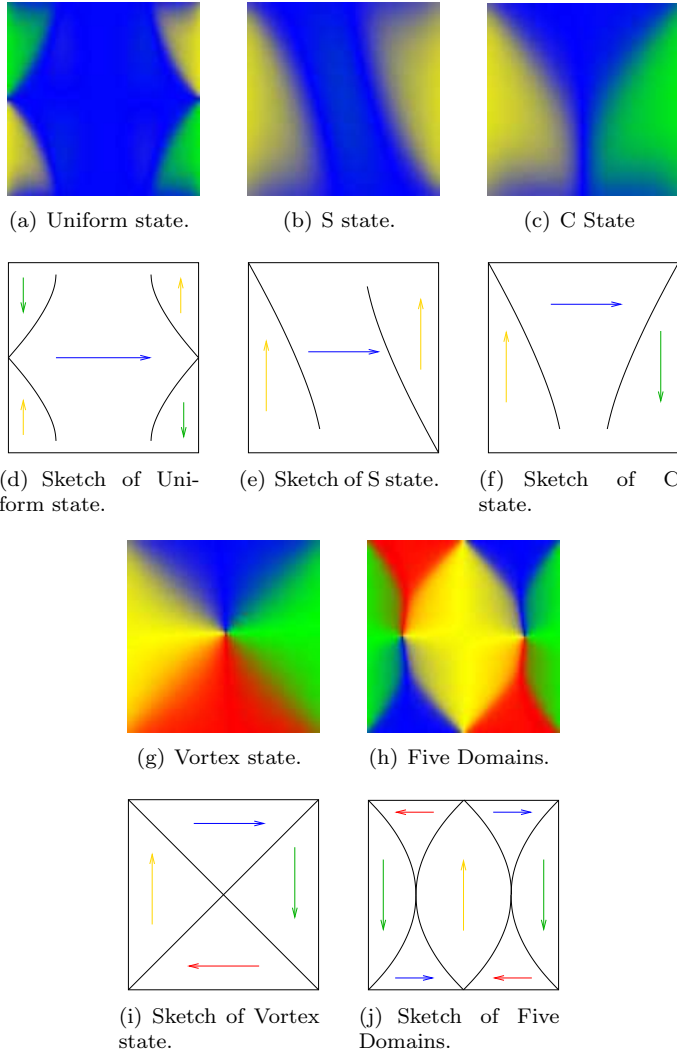


Figure 1: Different steady states of the magnetization. All the configurations have been obtained both by dynamic simulation of the Landau-Lifshitz equation, and by minimization of the Landau-Lifshitz energy using the Truncated Newton Method described in section 4. Under each configuration, we present a sketch depicting the average orientation of the magnetization in each domain.

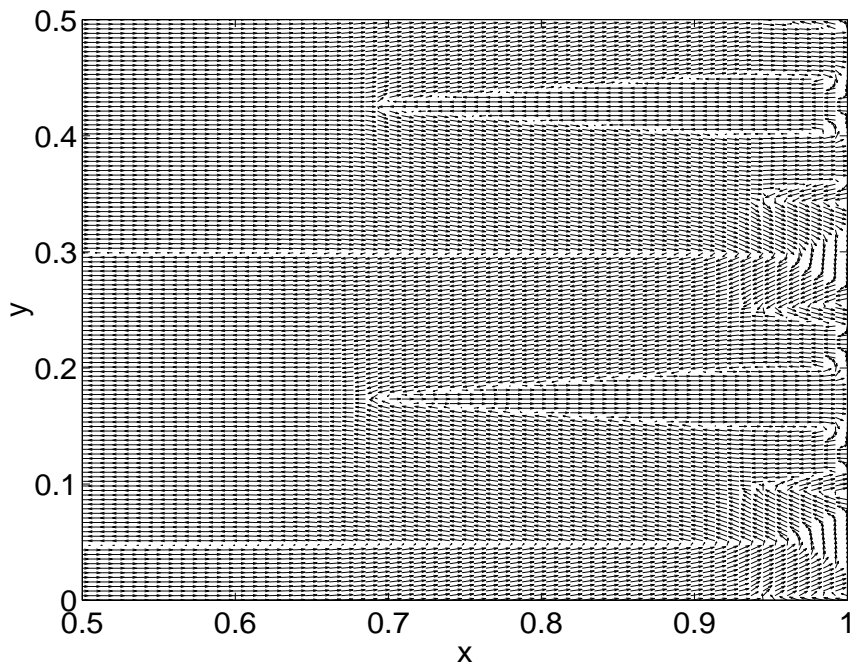


Figure 2: Branching structure near the boundary of a ferromagnet [20, 33].

The system (22) can now be integrated numerically. Explicit numerical schemes, such as fourth order Runge-Kutta, or predictor-corrector schemes, with some kind of adaptive time stepping procedure, are among the most commonly used methods for the simulation of the Landau-Lifshitz equation. The numerical integration of equation (22) using the fourth order Runge-Kutta method proceeds as follows: Give the approximation \mathbf{M}_n at time t_n , define

$$\begin{aligned}\mathbf{K}_1 &= \mathbf{F}(\mathbf{M}_n, t_n), \\ \mathbf{K}_2 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{M}_n + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{K}_1, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ \mathbf{K}_3 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{M}_n + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{K}_2, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ \mathbf{K}_4 &= \mathbf{F}\left(\mathbf{M}_n + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{K}_3, t_n + \Delta t\right).\end{aligned}$$

The magnetization at time t_{n+1} is approximated by

$$\mathbf{M}^* = \mathbf{M}_n + \frac{\Delta t}{6}(\mathbf{K}_1 + 2\mathbf{K}_2 + 2\mathbf{K}_3 + \mathbf{K}_4), \quad (23)$$

$$\mathbf{M}_{n+1} = \frac{\mathbf{M}^*}{|\mathbf{M}^*|}. \quad (24)$$

The normalization step (24) is necessary to preserve the length of the magnetization vector at each grid point. If this step is omitted, the length constraint is satisfied only to within the temporal accuracy of the numerical method.

Although explicit schemes may achieve high order of accuracy both in space and time, the time step size is severely constrained by the stability of the numerical scheme. For physical constants characteristic of Permalloy, with a cell size $\Delta x = 0.004 \mu\text{m}$ (256 grid points in a $1 \mu\text{m}$ long sample), and using fourth order Runge-Kutta, a time step roughly of the order $\Delta t \approx .25$ picoseconds is needed for numerical stability. If the cell size is decreased by a factor of 10, the time step Δt must be reduced by a factor of 100.

In order to overcome the stability constraint of explicit schemes, one usually resorts to implicit schemes, such as the Backward Euler method described in [85]. However, due to the strong nonlinearities present in both the gyromagnetic and damping terms in the Landau-Lifshitz equation (12), a direct implicit discretization of the system is not efficient and is difficult to implement. To illustrate the procedure, consider only the Laplacian term in the Landau-Lifshitz equation (12):

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\mathbf{m} \times \Delta \mathbf{m} - \mathbf{m} \times \mathbf{m} \times \Delta \mathbf{m}. \quad (25)$$

The Backward Euler method is

$$\frac{\mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^n}{\Delta t} = -\mathbf{m}^{n+1} \times \Delta_h \mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^{n+1} \times \mathbf{m}^{n+1} \times \Delta_h \mathbf{m}^{n+1}. \quad (26)$$

In order to advance the magnetization in the Backward Euler method, the nonlinear system of equations (26) must be solved at each time step. This difficulty can be ameliorated by a semi-implicit discretization such as

$$\frac{\mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^n}{\Delta t} = -\mathbf{m}^n \times \Delta_h \mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^n \times \mathbf{m}^n \times \Delta_h \mathbf{m}^{n+1}. \quad (27)$$

In (27), the system of equations that has to be solved at each time-step is linear, but the coefficients change between time-steps.

Both (26) and (27) are first order discretizations in time. A second order approximation can be obtained using a Crank-Nicolson discretization. For simplicity, we consider only the case when damping is absent:

$$\frac{\mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} (\mathbf{m}^{n+1} \times \Delta_h \mathbf{m}^{n+1} + \mathbf{m}^n \times \Delta_h \mathbf{m}^n). \quad (28)$$

An alternative second order approximation of this type is [34]:

$$\frac{\mathbf{m}^{n+1} - \mathbf{m}^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} (\mathbf{m}^n \times \Delta_h \mathbf{m}^{n+1} + \mathbf{m}^{n+1} \times \Delta_h \mathbf{m}^n). \quad (29)$$

The time stepping (29) only requires the solution of linear systems of equations, and not nonlinear systems, as in (28).

Higher order approximations can be achieved using Backward Differentiation Formulae [75].

2.2 Semi-Analytic integration

In all the numerical methods described above, the unit length constraint on the magnetization vector must be imposed by performing a projection of the intermediate values, as in (24). Given that the length of the magnetization is preserved by the Landau-Lifshitz equations, it may be desirable that the numerical method employed also preserve it. In [59], this was achieved by using semi-analytical integration of equation (22), which can be written as

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = -\mathbf{m}_i \times \mathbf{h}_i^n - \alpha \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_i \times \mathbf{h}_i^n), \quad (30)$$

$$\mathbf{m}_i(t_n) = \mathbf{m}_i^n. \quad (31)$$

In (30), the effective field, \mathbf{h}^n , is kept constant in the interval $[t_n, t_{n+1}]$, which allows explicit integration of equation (30) between t_n and t_{n+1} . The explicit expression for $\mathbf{m}(t_{n+1})$ follows from the two following observations:

1. Given two vectors $\mathbf{m}, \mathbf{h} \in \mathbb{R}^3$, we have the following vector identity:

$$\mathbf{m} = \frac{1}{|\mathbf{h}|^2} ((\mathbf{m}, \mathbf{h})\mathbf{h} + \mathbf{h} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h})),$$

i.e., \mathbf{m} is completely determined by (\mathbf{m}, \mathbf{h}) , and $\mathbf{m} \times \mathbf{h}$.

2. The scalar (\mathbf{m}, \mathbf{h}) and the vector $\mathbf{m} \times \mathbf{h}$ satisfy simple ordinary differential equations that can be solved explicitly.

Therefore we only need to obtain an expression for (\mathbf{m}, \mathbf{h}) and $\mathbf{m} \times \mathbf{h}$, which are:

$$(\mathbf{m}^{n+1}, \mathbf{h}^n) = |\mathbf{h}^n| \frac{(\mathbf{m}^n, \mathbf{h}^n) \cosh(\alpha |\mathbf{h}^n| (\Delta t)) + |\mathbf{h}^n| \sinh(\alpha |\mathbf{h}^n| (\Delta t))}{(\mathbf{m}^n, \mathbf{h}^n) \sinh(\alpha |\mathbf{h}^n| (\Delta t)) + |\mathbf{h}^n| \cosh(\alpha |\mathbf{h}^n| (\Delta t))},$$

and

$$\mathbf{m}^{n+1} \times \mathbf{h}^n = \varphi(\Delta t) \mathbf{R}^T \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(|\mathbf{h}^n| \Delta t) & -\sin(|\mathbf{h}^n| \Delta t) \\ 0 & \sin(|\mathbf{h}^n| \Delta t) & \cos(|\mathbf{h}^n| \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{m}^n \times \mathbf{h}^n, \quad (32)$$

where we have defined

$$\varphi(\Delta t) = e^{-\alpha \int_{t_n}^{t_n+\Delta t} (\mathbf{m}, \mathbf{h})(t) dt} = \frac{1}{\frac{(\mathbf{m}^n, \mathbf{h}^n)}{|\mathbf{h}^n|} \sinh(\alpha |\mathbf{h}^n| \Delta t) + \cosh(\alpha |\mathbf{h}^n| \Delta t)}.$$

The matrix \mathbf{R} in (32) is an orthonormal matrix which preserves the orientation, and such that $\mathbf{R} \cdot \mathbf{h} = |\mathbf{h}| \mathbf{e}_1$:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{|\mathbf{h}|} \begin{pmatrix} h_1 & h_2 & h_3 \\ 0 & \frac{h_3}{\sqrt{h_2^2+h_3^2}} & -\frac{h_2}{\sqrt{h_2^2+h_3^2}} \\ -\sqrt{h_2^2+h_3^2} & \frac{h_1 h_2}{\sqrt{h_2^2+h_3^2}} & \frac{h_1 h_3}{\sqrt{h_2^2+h_3^2}} \end{pmatrix},$$

or $\mathbf{R} = \frac{\mathbf{h}}{|\mathbf{h}|} \mathbf{I}$, if $h_2 = h_3 = 0$.

Given \mathbf{m}^n , \mathbf{h}^n is computed from (18), and \mathbf{m}^{n+1} is given by

$$\mathbf{m}^{n+1} = \frac{1}{|\mathbf{h}^n|^2} ((\mathbf{m}^n, \mathbf{h}^n) \mathbf{h}^n + \mathbf{h}^n \times (\mathbf{m}^n \times \mathbf{h}^n)). \quad (33)$$

The method is first order accurate in time, and explicit. Therefore, it suffers from the same time step constraints as the Runge-Kutta method described earlier. However, the shape of the time step (33) allows for a natural form of time step control [59]. This method can also be seen as an example of more general geometric integrators to be discussed in section 2.3.

2.3 Geometric Integration

Geometric integrators are methods specially designed to preserve one or more of the geometric properties of the system under consideration [56]. An example of geometric integrators are symplectic methods [64, 98], which are designed to preserve the symplectic structure of the equation.

The use of geometric integrators for the Landau-Lifshitz equation has been explored in [77, 72]. To illustrate the method, we rewrite the Landau-Lifshitz equation as

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = \mathbf{S}(\mathbf{p}_i) \cdot \mathbf{m}_i, \quad (34)$$

where

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{h}_i + \alpha \mathbf{m}_i \times \mathbf{h}_i,$$

and

$$\mathbf{S}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} 0 & -p_3 & p_2 \\ p_3 & 0 & -p_1 \\ -p_2 & p_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3.$$

If we fix \mathbf{p} at time t_n , and solve equation (34) between t_n and t_{n+1} , we get

$$\mathbf{m}_i^{n+1} = \exp(\mathbf{S}(\mathbf{p}_i)\Delta t) \cdot \mathbf{m}_i^n,$$

which is exactly (33). Since $\mathbf{S}\mathbf{p}_i$ is skew-symmetric, the exponential $\exp\{\mathbf{S}\mathbf{p}_i t\}$ is an orthonormal matrix, and therefore the length of the magnetization is automatically preserved by the method.

The exponential matrix can be computed using the *Rodrigues formula* [80]:

$$\exp\{\mathbf{S}(\mathbf{p})\} = \mathbf{I} + \frac{\sin(\|\mathbf{p}\|)}{\|\mathbf{p}\|} \mathbf{S}(\mathbf{p}) + \frac{1 - \cos(\|\mathbf{p}\|)}{\|\mathbf{p}\|^2} \mathbf{S}(\mathbf{p})^2,$$

which follows from the fact that $\mathbf{S}(\mathbf{p})^3 = -\|\mathbf{p}\|^2 \mathbf{S}(\mathbf{p})$. In [77], geometric methods of first, second, and fourth order accuracy were constructed for the Landau-Lifshitz equation.

2.4 Gauss-Seidel Projection Method

The two main difficulties in the time-stepping of the Landau-Lifshitz equation are the stiffness of the equation, and the nonlinearity. The stiffness of the equation can be handled by using an implicit time stepping procedure, and the nonlinearity is what makes this procedure difficult or impractical. Both issues were addressed in [110], where the Gauss-Seidel Projection Method (GSPM) was developed.

Because of the nature of the equation, the gyromagnetic term and the damping term require different treatment. To illustrate the method, we again consider only the Laplacian term in the Landau-Lifshitz equation (25).

When only the damping term is present, equation (25) becomes

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \Delta \mathbf{m}) = \Delta \mathbf{m} + |\nabla \mathbf{m}|^2 \mathbf{m}. \quad (35)$$

This equation describes the heat flow for harmonic maps. In [31], a simple projection scheme was introduced for this equation. This scheme was shown to be unconditionally stable and more efficient than other schemes used for the simulation of equation (35).

In order to motivate the GSPM, consider equation

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\mathbf{m} \times \Delta \mathbf{m}. \quad (36)$$

To overcome the nonlinearity of the equation, consider a simple fractional step scheme:

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{m}^* - \mathbf{m}^n}{\Delta t} &= \Delta_h \mathbf{m}^* \\ \mathbf{m}^{n+1} &= \mathbf{m}^n - \mathbf{m}^n \times \mathbf{m}^*\end{aligned}\quad (37)$$

or

$$\mathbf{m}^{n+1} = \mathbf{m}^n - \mathbf{m}^n \times (I - \Delta t \Delta_h)^{-1} \mathbf{m}^n.$$

Here I is the identity matrix, and Δ_h represents an approximation to the Laplacian.

The advantage of the scheme (2.4) is that the implicit step is now linear, comparable to solving heat equations implicitly, and is easy to implement. It is easy to check that the scheme (2.4) is consistent with (36) and is first order accurate in time. However, direct numerical implementation of (2.4) shows that the scheme is unstable.

The key to the GSPM is the observation that, due to the vectorial product structure of the equation, a Gauss-Seidel type of technique significantly improves the stability property of explicit schemes for the Landau-Lifshitz equation [110, 10].

Consider again the Landau-Lifshitz equation:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\mathbf{m} \times \mathbf{h} - \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{m} \times \mathbf{h}, \quad (38)$$

where

$$\mathbf{h} = -q(m_2 \mathbf{e}_2 + m_3 \mathbf{e}_3) + \epsilon \Delta \mathbf{m} + \mathbf{h}_s + \mathbf{h}_e.$$

For the splitting procedure, define the vector field:

$$\mathbf{f} = -q(m_2 \mathbf{e}_2 + m_3 \mathbf{e}_3) + \mathbf{h}_s + \mathbf{h}_e$$

Equation

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\mathbf{m} \times (\epsilon \Delta \mathbf{m} + \mathbf{f}) - \alpha \mathbf{m} \times \mathbf{m} \times (\epsilon \Delta \mathbf{m} + \mathbf{f})$$

is solved in three steps:

Step 1: Implicit Gauss-Seidel.

$$\begin{aligned}g_i^n &= (I - \epsilon \Delta t \Delta_h)^{-1} (m_i^n + \Delta t f_i^n), \\ g_i^* &= (I - \epsilon \Delta t \Delta_h)^{-1} (m_i^* + \Delta t f_i^*), \quad i = 1, 2, 3\end{aligned}\quad (39)$$

$$\begin{pmatrix} m_1^* \\ m_2^* \\ m_3^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1^n + (g_2^n m_3^n - g_3^n m_2^n) \\ m_2^n + (g_3^n m_1^* - g_1^* m_3^n) \\ m_3^n + (g_1^* m_2^* - g_2^* m_1^*) \end{pmatrix}\quad (40)$$

Step 2: Heat flow without constraints.

$$\mathbf{f}^* = -Q(m_2^* \mathbf{e}_2 + m_3^* \mathbf{e}_3) + \mathbf{h}_s^* + \mathbf{h}_e \quad (41)$$

$$\begin{pmatrix} m_1^{**} \\ m_2^{**} \\ m_3^{**} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1^* + \alpha \Delta t (\epsilon \Delta_h m_1^{**} + f_1^*) \\ m_2^* + \alpha \Delta t (\epsilon \Delta_h m_2^{**} + f_2^*) \\ m_3^* + \alpha \Delta t (\epsilon \Delta_h m_3^{**} + f_3^*) \end{pmatrix} \quad (42)$$

Step 3: Projection onto S^2 .

$$\begin{pmatrix} m_1^{n+1} \\ m_2^{n+1} \\ m_3^{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{|m^{**}|} \begin{pmatrix} m_1^{**} \\ m_2^{**} \\ m_3^{**} \end{pmatrix} \quad (43)$$

3 Computation of the Stray Field

In broad terms, the numerical methods currently used for the simulation of the Landau-Lifshitz equation can be divided into two categories, according to how the nonlocal stray field is evaluated. In the first class of methods, or PDE methods, equation (5)-(7) is solved using an appropriate discretization. The second class of methods is based on using some kind of fast summation technique to evaluate (8).

3.1 The PDE approach

The difficulty with this approach is the lack of an effective boundary condition for U . The differential equation (5) is formulated in the entire space, which has to be truncated in simulations [105, 2]. Alternatively, a boundary integral equation can be used to represent the correct boundary condition at ∂V [68, 4]. In this approach, the magnetostatic potential is decomposed into two parts: $U = U_1 + U_2$. The first part satisfies the equation

$$\begin{aligned} \Delta U_1 &= \operatorname{div} \mathbf{M}, \quad \mathbf{x} \in \Omega \\ \frac{\partial U_1}{\partial \nu} &= 0, \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega, \end{aligned} \quad (44)$$

and is extended as zero outside. Then, U_2 solves equation

$$\begin{aligned} \Delta U_2 &= 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ [U_2] &= U_1, \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega, \\ \left[\frac{\partial U_2}{\partial \nu} \right] &= 0, \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega. \end{aligned} \quad (45)$$

The solution to (45) is given by the double layer potential

$$U_2(\mathbf{x}) = \int_{\partial \Omega} U_1(\mathbf{y}) \frac{\partial N}{\partial \nu}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}), \quad (46)$$

where N is the Newtonian potential in free space.

A different approach has been presented in [39], where U_1 is chosen to satisfy the equation

$$\begin{aligned} \Delta U_1 &= \operatorname{div} \mathbf{M}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ U_1 &= 0, \quad x \in \partial \Omega, \end{aligned} \quad (47)$$

and it contains the bulk contribution of $\operatorname{div} \mathbf{M}$ to the stray field. The function U_1 is extended to be equal to zero outside Ω .

The boundary contributions are included in U_2 , which satisfies the equation

$$\begin{aligned} \Delta U_2 &= 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \cup \overline{\Omega}^c, \\ [U_2] &= 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \\ \left[\frac{\partial U_2}{\partial \nu} \right] &= -\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\nu} + \frac{\partial U_1}{\partial \nu}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (48)$$

The solution to (48) is

$$U_2(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}), \quad (49)$$

where $g(\mathbf{y}) = -\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\nu} + \frac{\partial U_1}{\partial \nu}$.

The boundary values of U_2 can be evaluated using the integral representations (46) [68] or (49) [39], and therefore U_2 can be determined inside the domain solving a Poisson equation with Dirichlet boundary conditions.

In [39], the integral (49) is approximated on the boundary of the domain by approximating g using piece-wise polynomial interpolation. The corresponding moments of the Newtonian potential can be evaluated analytically. In two dimensions, the resulting sum can be evaluated in $O(N)$ operations by direct summation, where N is the total number of grid points in the domain, if a uniform grid was used. In three dimensions, however, the evaluation of the boundary values by direct summation is an $O(N^{\frac{4}{3}})$ operation. Solving Poisson's equation with Multigrid [9] is an $O(N)$ operation. Therefore, in two dimensions this procedure has optimal complexity. In three dimensions, the evaluation of the boundary values by direct summation dominates the CPU time. The computational time can be further reduced using a fast summation technique [44, 7, 90].

3.2 Fast Summation Techniques

For the fast summation of the stray field, the convolution integral in (8) is replaced by some numerical quadrature. The evaluation of (8) by direct summation requires $O(N^2)$ operations, where N is the number of grid points in the discretization. This becomes prohibitively expensive even for coarse discretizations. A number of fast summation techniques have appeared in the literature, such as the Tree-Code [3], or the Fast Multipole Method [44, 15], which reduce the computational cost to $O(N \log_2 N)$, or even $O(N)$. However, for rectangular domains, the Fast Fourier Transform (FFT) [21] seems to be the most commonly used approach [112, 49]. It relies on the fact that when the integral (8) is approximated on a uniform grid with a quadrature rule, the resulting sum is a discrete convolution, with a kernel that is invariant under translation. The discrete convolution theorem applies [87], and the sum can be evaluated in $O(N \log_2 N)$ using the FFT.

For more general geometries, a common practice in micromagnetics has been to still use a regular grid, which results in a staircase approximation to the boundary. It was shown in [38] that this approach suffers from serious inaccuracies when the boundary $\partial\Omega$ cuts through numerical cells. The approach presented in [38] consists on decomposing the stray field into two contributions: a far field, and a near field. The near field is treated with direct summation, and it takes into account the geometry of the domain. For the far field, the contribution from the boundary cells is approximated to leading order by a rectangular cell with a properly scaled magnetization, in a way reminiscent of the Tree-Code, or the Fast Multipole Method. The resulting sum is evaluated using the FFT.

It is important to note that a significant speedup can be achieved in the study of thin ferromagnetic films. Due to the potential of thin films in applications, these films have been studied both experimentally, and analytically [50, 51, 5, 43, 27, 102, 82, 33, 10, 35, 78, 69]. For a thin domain of the form $\Omega = V \times [0, \delta]$, with $\delta \ll \text{diam}(V)$, the magnetization is independent of the thickness variable to leading order in δ [43]. Then, the stray field can be written as [33, 35]

$$E_s[\mathbf{m}] = \frac{\delta}{2} \int_V \mathbf{m}' \nabla (\nabla K_\delta * \mathbf{m}') + \frac{\delta}{2} \int_V m_3 (W_\delta * m_3), \quad (50)$$

where $\mathbf{m}' = (m_1, m_2)$ are the in-plane components of the magnetization, and m_3 is the out-of-plane component. The convolution kernels in (50) are defined as

$$K_\delta(\mathbf{x}) = - \left(\frac{1}{2\pi} \sinh^{-1} \left(\frac{\delta}{|\mathbf{x}|} \right) - \frac{1}{2\pi\delta} \left(\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + \delta^2} - |\mathbf{x}| \right) \right), \quad (51)$$

$$W_\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\delta} \left(\frac{1}{|\mathbf{x}|} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + \delta^2}} \right). \quad (52)$$

The energy (50) can be written in Fourier space as

$$E_s[\mathbf{m}] = \frac{\delta}{2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{|\widehat{\boldsymbol{\xi}} \cdot \widehat{\mathbf{m}}'|^2}{|\boldsymbol{\xi}|^2} \left(1 - \widehat{\Gamma}_\delta(\boldsymbol{\xi}) \right) d\boldsymbol{\xi} + \frac{\delta}{2} \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{m}_3|^2 \widehat{\Gamma}_\delta(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi},$$

where

$$\widehat{\Gamma}_\delta(\boldsymbol{\eta}) = \frac{1 - e^{-2\pi\delta|\boldsymbol{\eta}|}}{2\pi\delta|\boldsymbol{\eta}|}, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^2.$$

This model was used in [33, 38, 10] for the study of thin ferromagnetic films.

A similar procedure can be carried out for a double layer consisting of two thin ferromagnetic layers of thicknesses D_1 and D_2 , respectively, separated by

a non-magnetic layer of thickness a . In this case the stray field energy becomes

$$\begin{aligned}
2E_s[\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2] &= D_1 \int_{\Omega} \mathbf{m}'_1 \nabla (\nabla K_1 * \mathbf{m}'_1) + D_1 \int_{\Omega} m_{1,3} (W_1 * m_{1,3}) \\
&\quad + D_2 \int_{\Omega} \mathbf{m}'_2 \nabla (\nabla K_2 * \mathbf{m}'_2) + D_2 \int_{\Omega} m_{2,3} (W_2 * m_{2,3}) \\
&\quad + D_1 D_2 \int_{\Omega} \mathbf{m}'_1 \nabla (\nabla \Psi_{D_1, D_2, a} * \mathbf{m}'_2) - D_1 D_2 \int_{\Omega} m_{1,3} \Sigma_{D_1, D_2, a} * m_{2,3} \\
&\quad + D_1 D_2 \int_{\Omega} (m_{2,3} \nabla \Theta_{D_1, D_2, a} * \mathbf{m}'_1 - m_{1,3} \nabla \Theta_{D_1, D_2, a} * \mathbf{m}'_2), \quad (53)
\end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
K_j(\mathbf{x}) &= -\left(\frac{1}{2\pi} \sinh^{-1} \left(\frac{D_j}{|\mathbf{x}|} \right) - \frac{1}{2\pi D_j} \left(\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + D_j^2} - |\mathbf{x}| \right) \right), \\
W_j(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2\pi D_j} \left(\frac{1}{|\mathbf{x}|} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + D_j^2}} \right), \\
\Psi_{D_1, D_2, a}(\mathbf{x}) &= -\frac{1}{2\pi D_1 D_2} \left(2a \sinh^{-1} \left(\frac{2a}{|\mathbf{x}|} \right) \right. \\
&\quad \left. + (2a + D_1 + D_2) \sinh^{-1} \left(\frac{2a + D_1 + D_2}{|\mathbf{x}|} \right) \right. \\
&\quad \left. - (2a + D_1) \sinh^{-1} \left(\frac{2a + D_1}{|\mathbf{x}|} \right) \right. \\
&\quad \left. - (2a + D_2) \sinh^{-1} \left(\frac{2a + D_2}{|\mathbf{x}|} \right) + \sqrt{|\mathbf{x}|^2 + (2a + D_1)^2} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{|\mathbf{x}|^2 + (2a + D_2)^2} - \sqrt{|\mathbf{x}|^2 + 4a^2} \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{|\mathbf{x}|^2 + (2a + D_1 + D_2)^2} \right), \\
\Sigma_{D_1, D_2, a}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2\pi D_1 D_2} \left(\frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + 4a^2}} - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + (2a + D_1)^2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + (2a + D_2)^2}} + \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{x}|^2 + (2a + D_1 + D_2)^2}} \right), \\
\Theta_{D_1, D_2, a}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2\pi D_1 D_2} \left(\sinh^{-1} \left(\frac{2a + D_1}{|\mathbf{x}|} \right) + \sinh^{-1} \left(\frac{2a + D_2}{|\mathbf{x}|} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sinh^{-1} \left(\frac{2a}{|\mathbf{x}|} \right) - \sinh^{-1} \left(\frac{2a + D_1 + D_2}{|\mathbf{x}|} \right) \right).
\end{aligned}$$

Alternatively, in Fourier space

$$\begin{aligned}
 2E_s[\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2] = & D_1 \int_{\mathbb{R}^2} \frac{|\xi \cdot \widehat{\mathbf{m}}_1|^2}{|\xi|^2} \left(1 - \widehat{\Gamma}_1(\xi)\right) d\xi + D_1 \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{m}_{1,3}|^2 \widehat{\Gamma}_1(\xi) d\xi \\
 & + D_2 \int_{\mathbb{R}^2} \frac{|\xi \cdot \widehat{\mathbf{m}}_2|^2}{|\xi|^2} \left(1 - \widehat{\Gamma}_2(\xi)\right) d\xi + D_2 \int_{\mathbb{R}^2} |\widehat{m}_{2,3}|^2 \widehat{\Gamma}_2(\xi) d\xi \\
 & + 2\pi D_1 D_2 \Re \int_{\mathbb{R}^2} (\xi \cdot \widehat{\mathbf{m}}_1) \overline{(\xi \cdot \widehat{\mathbf{m}}_2)} \frac{e^{-4\pi a|\xi|}}{|\xi|} \widehat{\Gamma}_1(\xi) \widehat{\Gamma}_2(\xi) d\xi \\
 & - 2\pi D_1 D_2 \Im \int_{\mathbb{R}^2} \left((\xi \cdot \widehat{\mathbf{m}}_1) \overline{\widehat{m}_{2,3}} + \overline{(\xi \cdot \widehat{\mathbf{m}}_2)} \widehat{m}_{1,3} \right) e^{-4\pi a|\xi|} \widehat{\Gamma}_1(\xi) \widehat{\Gamma}_2(\xi) d\xi \\
 & - 2\pi D_1 D_2 \Re \int_{\mathbb{R}^2} \widehat{m}_{1,3} \overline{\widehat{m}_{2,3}} |\xi| e^{-4\pi a|\xi|} \widehat{\Gamma}_1(\xi) \widehat{\Gamma}_2(\xi) d\xi. \quad (54)
 \end{aligned}$$

The model (53) has been used by the author to characterize the Bloch and Néel walls in double layers [36, 37].

4 Energy Minimization Algorithms

When one is interested only in the local minimizers of the Landau-Lifshitz energy (11), an energy minimization algorithm can be used, instead of a dynamic approach. The first such approach in Micromagnetics is due to Brown and Labonte [63]. The method is based on the fixed point iteration

$$\mathbf{m}_i^{n+1} = \frac{\mathbf{h}_i^n}{|\mathbf{h}_i^n|},$$

where the effective field \mathbf{h} is given by (18). The algorithm suffers from a very slow convergence, specially when fine grids are used. Although the method can be accelerated using a Gauss-Seidel, or a SOR approach [71], the convergence is still too slow for practical purposes.

In order to carry out realistic computations, a more efficient method is needed. One of the simplest approaches is the Steepest Descent method, which in this contexts is equivalent to removing the gyromagnetic term in the Landau-Lifshitz equation. As is typical in these cases, linear convergence to a critical point is achieved.

For faster convergence, commonly used methods are the Nonlinear Conjugate Gradient (NCG), which achieves super-linear convergence, and Truncated Newton methods, which can achieve local quadratic convergence [86].

4.1 Nonlinear Conjugate Gradient

In Micromagnetics the NCG has been frequently used, mostly because it only requires the computation of the gradient of the energy, as opposed to the Newton method, where the Hessian of the energy is required. The unit length constraint $|\mathbf{m}| = 1$ is usually imposed by rewriting the energy in polar coordinates [4]. One

of the difficulties in this approach is that the resulting Laplacian term in the gradient does not have constant coefficients.

Define $\mathbf{m} = (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\psi), \cos(\theta))$. The Landau-Lifshitz energy (16) becomes

$$\begin{aligned} F_{LL}[\theta, \psi] &= \frac{q}{2} \int_{\Omega} (1 - \sin^2(\theta) \cos^2(\psi)) \, d\mathbf{x} + \frac{\epsilon}{2} \int_{\Omega} (|\nabla\theta|^2 + |\nabla\psi|^2 \sin^2(\theta)) \, d\mathbf{x} \\ &- \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \mathbf{h}_s + \mathbf{h}_e \right) \cdot (\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\psi), \cos(\theta)) \, d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (55)$$

The energy is discretized using finite differences or finite elements, and the discrete energy is minimized.

The NCG method mimics the method of Conjugate Gradients (CG) for linear, symmetric, positive definite systems designed by Hestenes and Stiefel [53]. As in the CG, in the NCG a sequence of approximations $(\theta^{(k)}, \phi^{(k)})$ is constructed, as well as a sequence of descent directions, $(\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)})$, satisfying

$$\nabla F_{LL}[\theta^{(k)}, \phi^{(k)}] \cdot (\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)}) < 0, \quad (56)$$

where $\nabla F_{LL} = (\nabla_{\theta} F_{LL}, \nabla_{\psi} F_{LL})$. Given an approximation to the minimizer and a descent direction, the function $F_{LL}[\theta^{(k)} + \alpha \mathbf{p}^{(k)}, \psi^{(k)} + \alpha \mathbf{q}^{(k)}]$ is approximately minimized. This procedure is known as *line search*, and it produces α_k . The next approximation is $(\theta^{(k+1)}, \phi^{(k+1)}) = (\theta^{(k)}, \phi^{(k)}) + \alpha_k (\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)})$. The next descent direction is defined, similarly to the CG case, as

$$(\mathbf{p}^{(k+1)}, \mathbf{q}^{(k+1)}) = -\nabla F_{LL}[\theta^{(k+1)}, \psi^{(k+1)}] + \beta_{k+1} (\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)}). \quad (57)$$

There are several choices for the constant β_{k+1} in (57), and each one gives origin to a different variant of the NCG. The most commonly used are

$$\beta_{k+1}^{FR} = \frac{(\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}], \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}])}{(\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}], \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}])},$$

which defines the Fletcher-Reeves method;

$$\beta_{k+1}^{PR} = \frac{(\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}], \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}] - \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}])}{(\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}], \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}])}, \quad (58)$$

which is known as the Polak-Ribière method, and

$$\beta_{k+1}^{HS} = \frac{(\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}], \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}] - \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}])}{(\mathbf{p}^{(k)}, \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}] - \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}])}, \quad (59)$$

which defines the Hestenes-Stiefel method. For simplicity, in (4.1), (58), and (59), we have used the notation $\mathbf{m}^{(k+1)}$ and $\mathbf{m}^{(k)}$ to represent the magnetization obtained with $(\theta^{(k+1)}, \psi^{(k+1)})$ and $(\theta^{(k)}, \psi^{(k)})$, respectively.

In order to ensure that the new direction $(\mathbf{p}^{(k+1)}, \mathbf{q}^{(k+1)})$ is a direction of descent in the Fletcher-Reeves method, the strong Wolfe condition needs to be imposed on α :

$$\begin{aligned} F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}] &\leq F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}] + c_1 \alpha_k \nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}] \cdot (\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)}), \\ |\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k+1)}] \cdot (\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)})| &\leq c_2 |\nabla F_{LL}[\mathbf{m}^{(k)}] \cdot (\mathbf{p}^{(k)}, \mathbf{q}^{(k)})|, \end{aligned} \quad (60)$$

where $0 < c_1 < c_2 < \frac{1}{2}$. Additional conditions must be imposed to ensure that the new $(\mathbf{p}^{(k+1)}, \mathbf{q}^{(k+1)})$ is a direction of descent for the Polak-Ribière and the Hestenes-Stiefel method [86].

4.2 Truncated Newton Method

Newton-based methods have been very successful in large-scale unconstrained minimization problems [23, 86]. We present here a modification of the Truncated-Newton method appropriate for constrained minimization, under the pointwise constraint $|\mathbf{m}(\mathbf{x})| = 1$.

In the Truncated-Newton described here, we again define a sequence of approximations $\{\mathbf{m}^{(k)}\}$, and a sequence of descent directions, $\{\mathbf{p}^{(k)}\}$. In order to obtain a new descent direction, the energy is approximated around $\mathbf{m}^{(k)}$ by a quadratic functional, which is subsequently minimized. The new approximation is $\mathbf{m}^{(k+1)} = \mathbf{m}^{(k)} + \alpha \mathbf{p}^{(k)}$, where α is usually chosen performing a line search.

This algorithm has been implemented in cartesian coordinates, without the need to rewrite the energy in polar coordinates [33, 35, 36, 37]. In order to impose the constraint $|\mathbf{m}(\mathbf{x})| = 1$, the energy is approximated, locally, by a quadratic functional:

$$F_{LL} \left[\begin{array}{c} \mathbf{m} + \mathbf{p} \\ \mathbf{m} + \mathbf{p} \end{array} \right] = F_{LL}[\mathbf{m}] + (G[\mathbf{m}], \mathbf{p})_h + \frac{1}{2} (H[\mathbf{m}] \cdot \mathbf{p}, \mathbf{p})_h + O(|\mathbf{p}|^3). \quad (61)$$

In minimization without constraints, G and H are the gradient and Hessian of the energy, respectively. In the constrained problem, G and H are projected versions of the gradient and Hessian, respectively. The projected gradient is

$$G[\mathbf{m}]_i = \Pi_{\mathbf{m}_i} (\mathcal{H}[\mathbf{m}]_i) = \mathcal{H}[\mathbf{m}]_i - (\mathcal{H}[\mathbf{m}]_i, \mathbf{m}_i) \mathbf{m}_i. \quad (62)$$

In (62) $\Pi_{\mathbf{m}}$ denotes the projection operator defined by $\Pi_m(v) = v - (v \cdot m) \mathbf{m}$. Therefore, $\mathbf{m} \cdot \Pi_m(v) = 0$.

In practice, often we do not need to compute the Hessian explicitly, but rather the action of the Hessian on a vector, which can be obtained from (61):

$$\begin{aligned} (H[\mathbf{m}] \cdot \mathbf{p})_i &= \Pi_{\mathbf{m}_i} \sum_j \frac{\partial^2 F_{LL}}{\partial \mathbf{m}_i \partial \mathbf{m}_j} [\mathbf{m}] \cdot \Pi_{\mathbf{m}_j} (\mathbf{p}_j) - (G[\mathbf{m}]_i, \mathbf{p}_i) \mathbf{m}_i \\ &\quad - (\mathbf{m}_i, \mathbf{p}_i) G[\mathbf{m}]_i - \left(\frac{\partial F_{LL}}{\partial \mathbf{m}_i} [\mathbf{m}], \mathbf{m}_i \right) \Pi_{\mathbf{m}_i} (\mathbf{p}_i). \end{aligned} \quad (63)$$

The Euler-Lagrange equation is $G[\mathbf{m}] = 0$, or

$$\nabla F_{LL}[\mathbf{m}]_i = \left(\frac{\partial F_{LL}}{\partial \mathbf{m}_i}[\mathbf{m}], \mathbf{m}_i \right) \mathbf{m}_i. \quad (64)$$

When we minimize the quadratic part of (61), we obtain that \mathbf{p} satisfies the linear equation

$$H[\mathbf{m}] \cdot \mathbf{p} = -G[\mathbf{m}]. \quad (65)$$

The matrix $H[\mathbf{m}]$ is symmetric, but not necessarily positive definite. We use the Preconditioned Conjugate Gradient (PCG) to solve equation (65). For the preconditioner we use the Laplacian term, which in our discretization can be inverted using the FFT. If $H[\mathbf{m}]$ is not positive definite, the procedure fails by producing a direction of negative curvature. In that case we use the corresponding approximation to the solution of system (65) as our descent direction. Sufficiently near the minimum, $H[\mathbf{m}]$ becomes positive definite, and from (65) we get $\mathbf{p} = -H[\mathbf{m}]^{-1} \cdot G[\mathbf{m}]$, i.e., Newton's method. For details regarding the convergence of this algorithm in the unconstrained case, see [86].

Given an approximation to the minimizer of (11), $\mathbf{m}^{(k)}$, and a descent direction, \mathbf{p} , the next approximation is computed with a line search using

$$f(\epsilon) = F_{LL} \left[\frac{\mathbf{m}^{(k)} + \epsilon \mathbf{p}}{|\mathbf{m}^{(k)} + \epsilon \mathbf{p}|} \right]. \quad (66)$$

In order to ensure sufficient decrease in the energy, the Wolf conditions need to be imposed [86].

5 Thermal Effects

Thermal effects have been shown to be important during the magnetization reversal process in sub-micron sized magnetic samples [67, 6], and have been the subject of much study recently [107, 96, 28, 29, 95, 30, 79, 78, 97]. Noise becomes more important in smaller samples, since the energy barrier heights decrease as the sample volume is reduced. Thermal noise depends only on the temperature, and therefore thermal effects may become dominant in samples with very small grain size. This affects negatively the reliability of magnetic storage devices, such as hard drives, and MRAMs, and represents one of the biggest challenges the magnetic recording industry is facing these days. From the technological point of view, the main difficulty in the design of effective MRAMs is the occurrence of rare events, which can spontaneously trigger the reversal of the magnetization, effectively erasing the information stored.

Traditionally, thermal effects have been studied using Monte Carlo methods, or by direct simulation of the Langevin equation (15). Due to the disparity of the deterministic time-scale, and the time-scale of the rare events, these methods result prohibitively expensive. A number of alternative methods have appeared in the literature in the past few years, the most notable being the Minimum Action Method [29, 30], and the String Method [96, 28, 30]. We will briefly discuss some of these here, and refer to the original articles for a more detail analysis.

5.1 Time-Stepping methods for the stochastic Landau-Lifshitz equation

A common approach for the simulation of the stochastic LLE (15) is the natural extension of the methods described in section 2 for the deterministic equation. The white noise term is replaced by

$$\epsilon \dot{\mathcal{W}} \rightarrow \frac{\epsilon}{\sqrt{\Delta V} \sqrt{\Delta t}} N(0, 1)_{ijk},$$

where $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ is the unit cell volume of the grid, Δt is the time step size, and $N(0, 1)$ is a random variable with a normal distribution with mean zero, and variance one. A value of the random variable is generated at every cell, and at every time step, and the values in different cells are independent of each other. The time stepping proceeds as in the deterministic case.

The stability of the numerical methods suffer a more stringent constraint in the deterministic case. For example, the numerical integration of the stochastic Landau-Lifshitz equation using the Heun method, for a cell size $\Delta x = 0.006 \mu m$, requires a time step size $\Delta t \approx 0.1$ femtoseconds [99]. To alleviate the stability constraints, implicit schemes are desirable. The GSPM has been tested for the stochastic equation, and it was shown to retain the properties described earlier in the deterministic case [10]. With this method it is possible to carry out fully resolved simulations of the stochastic Landau-Lifshitz equations (equation (15) below), with time step size $\Delta t = 1$ picosecond, for a cell size $\Delta x = 0.004 \mu m$, an improvement of approximately four orders of magnitude in the time step size required, compared to explicit time stepping methods.

5.2 Study of Rare Events

A number of numerical procedures for the study of rare events are based on the theory of Wentzell and Freidlin [32] for large deviations. The starting point of this theory is a stochastic ordinary differential equation of the form

$$\begin{aligned} dX_t^\eta &= b(X_t^\eta)dt + \sqrt{\eta}d\mathcal{W}_t, \\ X_0^\eta &= x_0, \end{aligned} \tag{67}$$

where $0 < \eta \ll 1$, and \mathcal{W}_t is a Wiener process in \mathbb{R}^n . As $\eta \rightarrow 0$, the trajectory X_t^η converges in probability to the solution of the deterministic equation, which we denote by $\varphi(t)$. We will assume that $b(X)$ is a Lipschitz continuous function, to ensure uniqueness of the solution to the deterministic ODE.

Define $C([0, T]; \mathbb{R}^n)$, the set of continuous functions on the interval $[0, T]$ with values in \mathbb{R}^n , and in that space, the following metric:

$$d(\phi, \psi) = \sum_{0 \leq t \leq T} \|\phi(t) - \psi(t)\|.$$

The theory of Wentzell and Freidlin gives an estimate on the probability that the stochastic process X_t^η stays inside a cylinder of radius δ around the deterministic solution:

$$P(d(X^\eta, \varphi) < \delta) \approx \exp \left\{ \frac{1}{\eta} S_{0,T}(\varphi) \right\}, \tag{68}$$

where $S_{0,T}(\varphi)$ is called the *action functional*, and is defined by

$$S_{0,T}(\phi) = \frac{1}{2} \int_0^T |\dot{\phi} - b(\phi)|^2 dt. \quad (69)$$

For the precise meaning of (68), we refer the reader to [32]. Note that (69) is only finite if φ is absolutely continuous.

Given two states $X(0) = a$ and $X(T) = b$, expression (68) can be used to determine the most likely path that the stochastic process will follow by minimizing the action:

$$S_{0,T}(\varphi^*) = \min_{\{\varphi \in C([0,T]; \mathbb{R}^n), \varphi(0)=a, \varphi(T)=b\}} S_{0,T}(\varphi).$$

Such a path is called *minimal action path* (MAP). When the system is a gradient system, then the minimal action path becomes a minimal energy path (MEP).

Efficient methods have been developed for computing the *MAP* and the *MEP*, as well as the transition rates between different configurations [96, 28, 29, 30, 78, 70].

Acknowledgments

I would like to thank Weinan E, for introducing me to this area of research during my doctoral dissertation. Throughout the years I have greatly benefited from many discussions with Anthony Arrott, Antonio DeSimone, Eric Vanden-Eijnden, Leslie Greengard, Roger Koch, Robert V. Kohn, Di Liu, Felix Otto, Stefan Müller, Weiqing Ren, and Xiao-Ping Wang, among many others that I omit because of lack of space. I would also like to thank Luis Vega González for inviting me to write this article. This review represents a large portion of my work on micromagnetics. Part of my work described here was done under funding from NSF, grant numbers DMS-0505738 and DMS-0411504, and a Faculty Career Development Award from UCSB.

A Ito vs Stratonovich interpretation of the Landau-Lifshitz-Langevin equation

When the Landau-Lifshitz-Langevin equation (15) is interpreted in the Ito sense, the length of the magnetization is not only not preserved, but it blows up in finite time. To see this, let us consider equation (15), rewritten in the following form:

$$d\mathbf{m}_t = \mathbf{f}(\mathbf{m})dt + \mathbf{G}(\mathbf{m}) \cdot d\mathbf{B}_t, \quad (70)$$

where $\mathbf{f}(\mathbf{m}) = -\mathbf{m} \times \mathbf{h} - \alpha \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{h})$, the matrix $\mathbf{G}(\mathbf{m})$ is defined as

$$\mathbf{G}(\mathbf{m}) = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & m_3 & -m_2 \\ -m_3 & 0 & m_1 \\ m_2 & -m_1 & 0 \end{pmatrix} + \epsilon \alpha (|\mathbf{m}|^2 \mathbf{I} - \mathbf{m} \otimes \mathbf{m}),$$

and \mathbf{B}_t denotes a three-dimensional Wiener process. According to Ito's formula [88],

$$\begin{aligned} d|\mathbf{m}|^2 &= 2\mathbf{m} \cdot d\mathbf{m} + \sum_{i,j} \delta_{i,j} dm_i dm_j = \sum_i (dm_i)^2 = \sum_{i,k} (G_{ik})^2 dt \\ &= 2\epsilon^2 (|\mathbf{m}|^2 + \alpha^2 |\mathbf{m}|^4) dt. \end{aligned} \quad (71)$$

Therefore, $y(t) = |\mathbf{m}|^2(t)$ solves the deterministic equation, with random initial data:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= 2\epsilon^2 (y + \alpha^2 y^2) \\ y(0) &= |\mathbf{m}_0|^2. \end{aligned} \quad (72)$$

The solution is

$$|\mathbf{m}|^2(t) = \frac{C e^{2\epsilon^2 t}}{1 - \alpha C e^{2\epsilon^2 t}},$$

where C is defined in such a way that $y(0) = |\mathbf{m}_0|^2$:

$$C = \frac{|\mathbf{m}_0|^2}{1 + \alpha |\mathbf{m}_0|^2}.$$

Therefore the length of the magnetization becomes infinite at time

$$t^* = \frac{1}{2\epsilon^2} \log \frac{1}{\alpha C} > 0.$$

Consequently, equation (15) must be understood in the sense of Stratonovich.

References

- [1] F. Alouges and A. Soyeur. On global weak solutions for Landau-Lifshitz equations: Existence and nonuniqueness. *Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications*, 18:1071–1084, 1992.
- [2] W. Bao and H. Han. High-order local artificial boundary conditions for problems in unbounded domains. *Comput. Methods Appl. Mech. Engr.*, 188:455–471, 2000.
- [3] J. Barnes and P. Hut. A hierarchical $O(N \log(N))$ force calculation algorithm. *Nature*, 324:446–449, 1986.
- [4] D.V. Berkov, K. Ramstöck, and A. Hubert. Solving micromagnetic problems: Towards an optimal numerical method. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 137:207–225, 1993.
- [5] G. Bertotti and A. Magni. Landau-Lifshitz magnetization dynamics and eddy currents in metallic thin films. *J. Appl. Phys.*, 91(10):7559–7561, 2002.

- [6] M. Bhattacharyya, T. Anthony, J. Nickel, M. Sharma, L. Tran, and R. Walmsley. Thermal Variations in Switching Fields for Sub-Micron MRAM Cells. *IEEE Trans. Mag.*, 37(4):1970–1972, 2001.
- [7] J.L. Blue and M.R. Scheinfein. Using multipoles decreases computation time for magnetic self-energy. *IEEE Trans. Magn.*, 27:4778–4780, 1991.
- [8] G. Boling and S. Fengqiu. Global weak solution for the Landau-Lifshitz-Maxwell equation in three space dimensions. *J. Math. Anal. Appl.*, 211:326, 1987.
- [9] Briggs, W.L. *A Multigrid Tutorial*. SIAM – Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987. Third Edition.
- [10] C.J. García-Cervera and W. E. Improved Gauss-Seidel projection method for micromagnetics simulations. *IEEE Transactions on Magnetics*, 39(3):1766–1770, May 2003.
- [11] G. Carbou and P. Fabrie. Recent results in micromagnetism. In *Colloque d'Analyse Numérique, Arles*, 1998.
- [12] G. Carbou and P. Fabrie. Regular solutions for Landau-Lifschitz equation in a bounded domain. *Differential Integral Equations*, 14:213–229, 2001.
- [13] G. Carbou and P. Fabrie. Regular solutions for Landau-Lifschitz equations in \mathbb{R}^3 . *Comm. Appl. Anal.*, 5:17–30, 2001.
- [14] G. Carbou, P. Fabrie, and O. Gués. On the ferromagnetism equation in the non static case. *Comm. Pure Appl. Anal.*, to appear.
- [15] J. Carrier, L. Greengard, and V. Rokhlin. A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 9(4):669–686, 1988.
- [16] Kung-Ching Chang, Wei Yue Ding, and Rugang Ye. Finite-time blow-up of the heat flow of harmonic maps from surfaces. *J. Differential Geom.*, 36(2):507–515, 1992.
- [17] N. Chang, J. Shatah, and K. Uhlenbeck. Schrödinger maps. *Comm. Pure Appl. Math.*, 53:590–602, 2000.
- [18] Y. Chen. Existence and singularities for the Dirichlet boundary value problems of Landau-Lifshitz equations. *Nonlinear Analysis*, 48:411, 2002.
- [19] H. Chihara. Local existence for semilinear Schrödinger equations. *Math. Japonica*, 42:35–52, 1995.
- [20] Rustum Choksi, Robert V. Kohn, and Felix Otto. Domain branching in uniaxial ferromagnets: a scaling law for the minimum energy. *Comm. Math. Phys.*, 201:61–79, 1999.

- [21] James W. Cooley and John W. Tukey. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Math. Comp.*, 19:297–301, 1965.
- [22] J. Daughton. Magnetoresistive memory technology. *Thin Solid Films*, 216:162–168, 1992.
- [23] R.S. Dembo and T. Steihaug. Truncated-newton algorithms for large-scale unconstrained optimization. *Mathematical Programming*, 26:190–212, 1983.
- [24] A. DeSimone, H. Knöpfer, and F. Otto. 2-d stability of the Néel wall. *Calc. Var. and PDEs*, 27:233, 2006.
- [25] Antonio DeSimone and Georg Dolzmann. Existence of minimizers for a variational problem in two-dimensional nonlinear magnetoelasticity. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 144(2):107–120, 1998.
- [26] Antonio DeSimone and Richard D. James. A constrained theory of magnetoelasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 50(2):283–320, 2002.
- [27] Antonio DeSimone, Robert V. Kohn, Stefan Müller, and Felix Otto. Magnetic microstructures—a paradigm of multiscale problems. In *ICIAM 99 (Edinburgh)*, pages 175–190. Oxford Univ. Press, Oxford, 2000.
- [28] W. E, W. Ren, and E. Vanden-Eijnden. String method for the study of rare events. *Phys. Rev. B*, 66(5):2301, 2002.
- [29] W. E, W. Ren, and E. Vanden-Eijnden. Energy landscape and thermally activated switching of submicron-sized ferromagnetic elements. *J. Appl. Phys.*, 93(4):2275, 2003.
- [30] W. E, W. Ren, and E. Vanden-Eijnden. Minimum action method for the study of rare events. *Comm. Pure Appl. Math.*, to appear, 2004.
- [31] Weinan E and X.P. Wang. Numerical methods for the Landau-Lifshitz equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38(5):1647–1665, 2000.
- [32] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell. *Random perturbations of dynamical systems*, volume 260 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1998. Translated from the 1979 Russian original by Joseph Szücs.
- [33] Carlos J. García-Cervera. *Magnetic Domains and Magnetic Domain Walls*. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, 1999.
- [34] C.J. García-Cervera. *Unpublished*.
- [35] C.J. García-Cervera. One-dimensional magnetic domain walls. *Euro. Jnl. Appl. Math.*, 15:451–486, 2004.

- [36] C.J. García-Cervera. Néel Walls in Low Anisotropy Double Layers. *SIAM J. Appl. Math.*, 65(5):1726–1747, 2005.
- [37] C.J. García-Cervera. Structure of the Bloch Wall in Multilayers. *Proc. R. Soc. A*, 461:1911–1926, 2005.
- [38] C.J. García-Cervera, Z. Gimbutas, and W. E. Accurate numerical methods for micromagnetics simulations with general geometries. *J. Comp. Phys.*, 184(1):37–52, 2003.
- [39] C.J. García-Cervera and A.M. Roma. Adaptive mesh refinement for micromagnetics simulations. *IEEE Trans. Magn. Mag.*, 42:1648–1654, 2006.
- [40] C.J. García-Cervera and X.P. Wang. Spin-Polarized transport: Existence of weak solutions. *Disc. Cont. Dyn. Sys., Series B*, 7(1):87–100, 2005.
- [41] L. Garcia-Palacios and F.J. Lazaro. Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles. *Phys. Rev. B*, 58:14937, 1998.
- [42] T.L. Gilbert. *Phys. Rev.*, 100:1243, 1955. [Abstract only; full report, Armor Research Foundation Project No. A059, Supplementary Report, May 1, 1956 (unpublished)].
- [43] Gustavo Gioia and Richard D. James. Micromagnetics of very thin films. *Proc. R. Soc. Lon. A*, 453:213–223, 1997.
- [44] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *Journal of Computational Physics*, 73:325–348, 1987.
- [45] S. Gustafson and J. Shatah. The stability of localized solutions of Landau-Lifshitz equations. *Comm. Pure Appl. Math.*, 55:1136–1159, 2002.
- [46] Susana Gutiérrez, Judith Rivas, and Luis Vega. Formation of singularities and self-similar vortex motion under the localized induction approximation. *Comm. Partial Differential Equations*, 28(5-6):927–968, 2003.
- [47] Susana Gutierrez and Luis Vega. Self-similar solutions of the localized induction approximation: singularity formation. *Nonlinearity*, 17(6):2091–2136, 2004.
- [48] N. Hayashi and T. Ozawa. Remarks on nonlinear Schrödinger equations in one space dimension. *Diff. Integral Eqs.*, 2:453–461, 1994.
- [49] N. Hayashi, K. Saito, and Y. Nakatani. Calculation of demagnetizing field distribution based on fast fourier transform of convolution. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 35:6065–6073, 1996.

- [50] B. Heinrich and J.A.C. Bland. *Ultrathin Magnetic Structures I*. Springer-Verlag, Berlin-New York, 1994.
- [51] B. Heinrich and J.A.C. Bland. *Ultrathin Magnetic Structures II*. Springer-Verlag, Berlin-New York, 1994.
- [52] W. Heisenberg. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Z. Phys*, 49:619–636, 1928. (*On the theory of ferromagnetism*).
- [53] Magnus R. Hestenes and Eduard Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *J. Research Nat. Bur. Standards*, 49:409–436 (1953), 1952.
- [54] E. Hirota, H. Sakakima, and K. Inomata. *Giant Magneto-Resistance Devices*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.
- [55] Alex Hubert and Rudolf Schäfer. *Magnetic Domains: The Analysis of Magnetic Microstructures*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1998.
- [56] A. Iserles, editor. *Acta numerica. 2000*, volume 9 of *Acta Numerica*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [57] John David Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons Inc., New York, second edition, 1975.
- [58] R. D. James and D. Kinderlehrer. Frustration and microstructure: an example in magnetostriction. In *Progress in partial differential equations: calculus of variations, applications (Pont-à-Mousson, 1991)*, volume 267 of *Pitman Res. Notes Math. Ser.*, pages 59–81. Longman Sci. Tech., Harlow, 1992.
- [59] J.S. Jiang, H.G. Kaper, and G.K. Leaf. Hysteresis in layered spring magnets. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, 1:219–232, 2001.
- [60] W.F. Brown Jr. *Micromagnetics*. Interscience Tracts on Physics and Astronomy. Interscience Publishers (John Wiley and Sons), New York - London, 1963.
- [61] W.F. Brown Jr. Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle. *Physical Review*, 130(5):1677–1686, 1963.
- [62] W.F. Brown Jr. *Magnetoelastic interactions*, volume 9 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer-Verlag, New York, 1966.
- [63] W.F. Brown Jr. and A.E. LaBonte. Structure and energy of one dimensional walls in ferromagnetic thin films. *J. Appl. Phys.*, 36(4):1380–1386, 1965.

- [64] Feng Kang. On difference schemes and symplectic geometry. In Feng Kang, editor, *Proceedings of the 1984 Beijing Symposium on Differential Geometry and Differential Equations*, pages 42–58, Beijing, 1985. Science Press.
- [65] C. Kenig, G. Ponce, and L. Vega. Small solutions to nonlinear Schrödinger equations. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 10:255–288, 1993.
- [66] C. Kenig, G. Ponce, and L. Vega. Smoothing effects and local existence theory for the generalized nonlinear Schrödinger equations. *Invent. Math.*, 134:489–545, 1998.
- [67] R. H. Koch, G. Grinstein, G.A. Keefe, Yu Lu, P.L. Trouilloud, and W.J. Gallagher. Thermally Assisted Magnetization Reversal in Submicron-Sized Magnetic Thin Films. *Phys. Rev. Lett.*, 84(23):5419–5422, 2000.
- [68] T.R. Koehler and D.R. Fredkin. Finite element methods for micromagnetics. *IEEE Transactions on Magnetics*, 28:1239–1244, 1992.
- [69] Robert V. Kohn and V.V. Slastikov. Effective dynamics for ferromagnetic thin films: rigorous justification. *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, to appear, 2004.
- [70] R.V. Kohn, M.G. Reznikoff, and E. Vanden-Eijnden. Magnetic elements at finite temperature and large deviation theory. *J. Nonlinear Sci.*, 15:225–253, 2005.
- [71] K. Kosavisutte and N. Hayashi. A numerical study of LaBonte’s iteration: An approach to acceleration. *IEEE Trans. Magn.*, 32:4243–4245, 1996.
- [72] P.S. Krishnaprasad and X. Tan. Cayley transforms in micromagnetics. *Physica B*, 306:195–199, 2001.
- [73] R. Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Rep. Prog. Phys.*, 29:255–284, 1966.
- [74] M. Lakshmanan and K. Nakamura. Landau-Lifshitz equation of ferromagnetism: Exact treatment of the Gilbert damping. *Physical Review Letters*, 53(26):2497–2499, 1984.
- [75] J. D. Lambert. *Computational methods in ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, London-New York-Sydney, 1973. Introductory Mathematics for Scientists and Engineers.
- [76] L. Landau and E. Lifshitz. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, 8:153–169, 1935.
- [77] D. Lewis and N. Nigam. Geometric integration on spheres and some interesting applications. *J. Comput. Appl. Math.*, 151(1):141–170, 2003.

- [78] D. Liu and C.J. García-Cervera. Magnetic switching of thin films under thermal perturbation. *J. Appl. Phys.*, 98(023903), 2005.
- [79] Di Liu. *Topics in the analysis and computation of stochastic differential equations*. PhD thesis, Program in Applied and Computational Mathematics, Princeton University, 2003.
- [80] Jerrold E. Marsden and Tudor S. Ratiu. *Introduction to mechanics and symmetry*, volume 17 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1999. A basic exposition of classical mechanical systems.
- [81] Helena McGahagan. *Some Existence and Uniqueness Results for Schrödinger Maps and Landau-Lifshitz-Maxwell Equations*. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, 2004.
- [82] C. Melcher. The logarithmic tail of néel walls. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 168, 2003.
- [83] Christof Melcher. Existence of partially regular solutions for Landau-Lifshitz equations in \mathbb{R}^3 . *Comm. Partial Differential Equations*, 30(4):567–587, 2005.
- [84] Roger Moser. *Partial regularity for harmonic maps and related problems*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2005.
- [85] Y. Nakatani, Y. Uesake, and N. Hayashi. Direct solution of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation for micromagnetics. *Japanese Journal of Applied Physics*, 28(12):2485–2507, 1989.
- [86] J. Nocedal and S.J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [87] Henri J. Nussbaumer. *Fast Fourier transform and convolution algorithms*, volume 2 of *Springer Series in Information Sciences*. Springer-Verlag, Berlin, 1981.
- [88] Bernt Øksendal. *Stochastic differential equations: An introduction with applications*. Universitext. Springer-Verlag, Berlin, sixth edition, 2003.
- [89] F. Otto. Cross-over in scaling laws: a simple example from micromagnetics. In *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*, volume 3, pages 829–838, Beijing, 2002. Higher Ed. Press.
- [90] Nikola Popović and Dirk Praetorius. \mathcal{H} -matrix techniques for stray-field computations in computational micromagnetics. In *Large-scale scientific computing*, volume 3743 of *Lecture Notes in Comput. Sci.*, pages 102–110. Springer, Berlin, 2006.

- [91] G. Da Prato and J. Zabczyk. *Stochastic Equations in Infinite Dimensions*. Encyclopedia of Mathematics and Its Applications. Cambridge University Press, 1992.
- [92] G.A. Prinz. Magnetoelectronics. *Science*, 282:1660–1663, 1998.
- [93] I.A. Privorotskii. Thermodynamic theory of domain structures. *Rep. Prog. Phys.*, 35:115–155, 1972.
- [94] I.B. Puchalska and H. Niedoba. Magnetization Process in Permalloy Multilayer Films. *IEEE Trans. Magn.*, 27:3579–3587, 1991.
- [95] W. Ren. Higher order string method for finding minimum energy paths. *Comm. Math. Sci.*, 1(2):2377–384, 2003.
- [96] Weiqing Ren. *Numerical methods for the study of energy landscapes and rare events*. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, 2002.
- [97] Maria G. Reznikoff. *Rare events in finite and infinite dimensions*. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, 2004.
- [98] J.J. Sanz-Serna. Symplectic integrators for hamiltonian problems: an overview. *Acta Numerica*, 1:243–286, 1991.
- [99] T. Schrefl, W. Scholz, D. Süss, and J. Fidler. Langevin micromagnetics of recording media using subgrain discretization. *IEEE Trans. Mag.*, 36:3189–3191, 2000.
- [100] J. Shi and S. Tehrani. Edge pinned states in patterned submicron NiFeCo structures. *Applied Physics Letters*, 77(11):1692–1694, 2000.
- [101] J. Shi, T. Zhu, S. Tehrani, Y.F. Zheng, and J.-G. Zhu. Magnetization vortices and anomalous switching in patterned NiFeCo submicron arrays. *Applied Physics Letters*, 74:2525–2527, 1999.
- [102] A. De Simone, R. V. Kohn, S. Müller, and F. Otto. Repulsive interaction of Néel walls, and the internal length scale of the cross-tie wall. *Multiscale Modeling and Simulation*, 1:57–104, 2003.
- [103] Michael Struwe. On the evolution of harmonic maps in higher dimensions. *Journal of Differential Geometry*, 28:485–502, 1988.
- [104] P. Sulem, C. Sulem, and C. Bardos. On the continuous limit for a system of classical spins. *Comm. Math. Phys.*, 107(3):431–454, 1986.
- [105] Semyon V. Tsynkov. Numerical solution of problems on unbounded domains. A review. *Appl. Num. Math.*, 27:465–532, 1998.

- [106] A. Visintin. On Landau-Lifshitz equations for ferromagnetism. *Japan J. Appl. Math.*, 2:69, 1985.
- [107] X. Wang, H.N. Bertram, and V.L. Safonov. Thermal-dynamic reversal of fine magnetic grains with arbitrary anisotropy axes orientation. *J. Appl. Phys.*, 92(4):2064–2072, 2002.
- [108] P. Weiss. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *J. de Phys. Rad.*, 6:661–690, 1907. (*The hypothesis of the molecular field and the property of ferromagnetism*).
- [109] Xiaoming Wu. *Two dimensional Landau-Lifshitz equations in micromagnetism*. PhD thesis, Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, 2000.
- [110] C. García-Cervera X.-P. Wang and W. E. A Gauss-Seidel projection method for micromagnetics simulations. *J. Comp. Phys.*, 171:357–372, 2001.
- [111] Kōsaku Yosida. *Functional analysis*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 1995. Reprint of the sixth (1980) edition.
- [112] Samuel W. Yuan and Neal Bertram. Fast adaptive algorithms for micromagnetics. *IEEE Transactions on Magnetics*, 28(5):2031–2036, 1992.
- [113] J. Zhai. Existence and behaviour of solutions to the Landau-Lifshitz equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 30:833, 1999.
- [114] M. Ziese and Martin J. Thornton (Eds.). *Spin Electronics*, volume 569 of *Lecture Notes in Physics*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2001.

TOPOLOGÍA MOLECULAR

J.M. AMIGÓ*, A. FALCÓ**, J. GÁLVEZ† Y V. VILLAR‡

*Centro de Investigación Operativa, Universidad Miguel Hernández de Elche

**Dpto. de Ciencias Físicas, Matemáticas y de la Computación, Universidad CEU
Cardenal Herrera

Dpto. de Química Física, Universitat de Valencia

Dpto. de Fisiología, Farmacología y Toxicología, Universidad CEU Cardenal Herrera

jm.amigo@umh.es, afalco@uch.ceu.es, jorge.galvez@uv.es,
vmvillar@uch.ceu.es

Resumen

Este artículo pretende ofrecer una vista panorámica de la topología molecular, que es una aplicación de la teoría de grafos muy utilizada en la industria química y, sobre todo, en la farmacéutica, pero poco conocida por la comunidad matemática. El objetivo de la topología molecular es la caracterización estructural de moléculas mediante unos invariantes sencillos, llamados índices topológicos. Estos índices, una vez procesados estadísticamente, juegan un papel decisivo en el descubrimiento de nuevas aplicaciones de moléculas conocidas y en el diseño de moléculas con propiedades químicas y farmacológicas específicas. En el apartado de aplicaciones nos limitamos, por su importancia, a las farmacológicas.

Palabras clave: *Topología molecular, Teoría de grafos, Análisis discriminante*

Clasificación por materias AMS: *92E10*

1 Introducción

La “irrazonable eficacia de las matemáticas en las ciencias naturales” es una característica de la historia de la ciencia y de la técnica modernas que no ha hecho sino acentuarse aún más, si cabe, desde que el físico matemático Eugene Wigner (1902-1995), introductor de la teoría de grupos en la física atómica, titulara así su famoso artículo [22]. No hace falta decir que la sorpresa de Wigner (y de tantos otros científicos y pensadores) se debe al hecho de que las matemáticas, “la más pura de las ciencias”, es una creación del intelecto que, en principio, no busca aplicación alguna. Nuestro objetivo en este artículo es, precisamente, ilustrar esta eficacia con una aplicación de la teoría de grafos a las ciencias de la salud y, más concretamente, al descubrimiento de nuevos fármacos y al diseño de moléculas para aplicaciones terapéuticas específicas.

Fecha de recepción: 18/05/2007

Esta disciplina, que lleva el nombre de *topología* (o *conectividad*) *molecular*, es todavía joven y a su desarrollo han contribuido significativamente la industria físico-química y, sobre todo, la bioquímica, ya que la posibilidad de predecir las propiedades de una molécula antes de sintetizarla permite ahorrar tiempo y dinero en la investigación farmacéutica, agrícola, ganadera, etc. Aunque el ámbito de aplicación de la topología es amplio, nosotros nos centraremos, por concreción e importancia, en las aplicaciones farmacológicas.

Recordemos, de paso, que la teoría de grafos es un magnífico exponente de matemática pura que ha encontrado con el tiempo un abanico de aplicaciones. Desarrollada en el siglo XIX por los matemáticos ingleses A. Cayley y J.J. Sylvester (aunque fue Leonhard Euler, ¿quién si no?, el que había iniciado su estudio un siglo antes), la teoría de grafos se ha convertido en una herramienta imprescindible en las muchas áreas de la actividad científica y técnica en las que estructura y conectividad juegan un papel relevante. Por citar sólo unos pocos ejemplos: redes de comunicación y transporte, diseño de circuitos eléctricos (por ejemplo, en computadores), optimización de líneas de suministro, epidemiología, etc. Valga, pues, este artículo también como un pequeño tributo de reconocimiento y admiración a Euler (1707-1783) en el tercer centenario de su nacimiento.

Esencialmente, la topología molecular sirve para encontrar correlaciones entre una propiedad física, química o biológica y estructuras moleculares, basándose en la caracterización numérica de éstas mediante unos descriptores topológicos llamados *índices topológicos*. Supongamos, por ejemplo, que buscamos nuevos compuestos con determinada actividad farmacológica. Una vez calculados los índices topológicos de compuestos conocidos con dicha propiedad, se obtienen (por lo común, mediante análisis lineal discriminante) funciones de clasificación que permitan discriminar entre compuestos activos e inactivos. A continuación, las funciones de clasificación se aplican a bases de datos de estructuras químicas, para la selección de sustancias potencialmente activas. Finalmente, se realizan los ensayos experimentales *in vivo* o *in vitro* encaminados a confirmar la actividad predicha. Cuando se proponen nuevos índices topológicos, se estudia si los nuevos índices suponen una mejora en la funciones de clasificación, es decir, si las nuevas funciones demuestran mayor eficacia en la predicción de la actividad farmacológica objeto de estudio.

El origen de la topología molecular hay que buscarlo en los años 1970, cuando Kier y Hall y otros investigadores comenzaron a utilizar 'índices' derivados de las propiedades de conectividad de las moléculas para estudiar algunas propiedades físico-químicas (como el calor de formación y la temperatura de ebullición) de compuestos orgánicos. Además de la topología molecular, hay actualmente tres metodologías en diseño molecular, caracterizadas por la técnica empleada: (i) QSAR (*quantitative structure activity relationship*), basada en descriptores moleculares físico-químicos; (ii) mecánica molecular, basada en la mecánica clásica y en programas modeladores-constructores de representación gráfica tridimensional de moléculas; (iii) mecánica cuántica, que tiene en cuenta las posiciones y energías de los átomos y moléculas. Cuando se trata de diseño *ex novo*, es decir, de cabezas de serie para el diseño de nuevos fármacos, las

técnicas mecanocuánticas y moleculares requieren un conocimiento previo de la estructura del receptor biológico sobre el que la molécula va a interaccionar. Precisamente, la característica que distingue más claramente a la topología molecular de estas dos técnicas, es el hecho de no requerir un conocimiento previo de la estructura del receptor para generar nuevas cabezas de serie. A ello hay que añadir que la topología molecular aventaja también a los métodos QSAR por su mayor simplicidad.

Este artículo está dividido en dos partes. En la primera (Sección 2), introducimos aquellos conceptos básicos de teoría de grafos que necesitamos para nuestra exposición y repasamos algunos de los índices topológicos más importantes, en particular, los de Hosoya, Kier y Hall, y Randić, que cuentan entre los pioneros. En la segunda parte (Sección 3), dedicada a las aplicaciones de la topología molecular en farmacología, nos detenemos primero, por completitud, a recordar cómo se construyen funciones de clasificación en análisis lineal discriminante, antes de presentar, con distinto grado de detalle, unos pocos ejemplos reales. Por supuesto, la lista de ejemplos se podría haber alargado mucho más, hasta incluir estudios en curso sobre el cáncer y el sida, dos de los grandes retos de la medicina moderna. Pero nuestro propósito no es abrumar al lector con datos, sino darle una descripción sencilla de la topología molecular y de alguna de sus aplicaciones, a la vez que mostrarle el alto grado de interdisciplinaridad que su práctica conlleva.

2 Las bases de la topología molecular: índices topológicos.

Como dijimos en la Introducción, la topología molecular se basa en la aplicación de teoría de grafos [4] a la descripción de las estructuras moleculares, siendo un *grafo* un conjunto de puntos (llamados *nodos* o *vértices*) con algunos pares de ellos conectados mediante uniones llamadas *aristas* o *ejes*. Los nodos del grafo G los numeraremos arbitrariamente y denotaremos por e_{ij} al eje que une los nodos i y j . Utilizaremos N para denotar el número de nodos de un grafo, mientras que $E(G)$ denotará el conjunto de ejes y $|E(G)|$ su cardinalidad (es decir, el número de ejes de G). Si dos nodos están conectados por un eje, se llaman *adyacentes*. El número de ejes que salen de un nodo dado se llama *grado* del nodo. Un *camino* o *trayectoria* p en G es el subgrafo obtenido al conectar consecutivamente varios nodos adyacentes; si, además, conectamos el primer punto y el último punto de p , obtenemos un *ciclo*. La *longitud* de un camino o ciclo es el número de ejes que lo componen. Cuando la teoría de grafos se aplica a moléculas, los nodos representan átomos y las aristas, enlaces químicos, normalmente enlaces covalentes puesto que es en la química orgánica donde la topología molecular ha encontrado su mayor campo de aplicación. El grafo resultante, que nos dice cómo están ligados los átomos y el camino (o caminos) que une(n) un átomo a otro en la misma molécula, se llama *grafo molecular*.

Supongamos, pues, que queremos caracterizar estructuralmente un compuesto orgánico. En el procedimiento general, se empieza eliminando los átomos de hidrógeno de la molécula; hay formulaciones en las que esto no es

así pero, por simplicidad, nosotros no las consideraremos aquí. En segundo lugar, los átomos restantes (los vértices del grafo molecular) se numeran de forma conveniente. Por último, la caracterización estructural contenida en el grafo molecular puede ser, a su vez, encapsulada de muy diversas maneras como, por ejemplo, mediante matrices, índices numéricos, polinomios, espectros, grupos u operadores. En esta sección daremos una idea general de las herramientas más sencillas utilizadas en topología molecular.

2.1 Matrices asociadas a grafos moleculares

La *matriz de adyacencia* es quizá el instrumento algebraico más sencillo en nuestro contexto ya que únicamente da información sobre qué pares de nodos están unidos mediante aristas. Si la molécula en cuestión consta, pues, de N átomos, la matriz de adyacencia del grafo molecular G , $\mathbf{A} = \mathbf{A}(G)$, es una matriz $N \times N$ simétrica cuyas componentes son

$$\mathbf{A}_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si los átomos } i, j \text{ están ligados,} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

La Figura 1 muestra el grafo de la molécula 2,3-dimetil-butano y su matriz de adyacencia $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_{ij})_{1 \leq i, j, N}$.

Si, como ocurre con el 2,3-dimetil-butano, la molécula sólo tiene enlaces simples, entonces la suma de todos los elementos de la fila i de \mathbf{A} , $\sum_{j=1}^N \mathbf{A}_{ij}$, así como la suma de todos los elementos de la columna i , $\sum_{j=1}^N \mathbf{A}_{ji}$, nos dan indistintamente el número total de ejes que confluyen en el nodo o átomo i , es decir, el grado (o *valencia topológica*) del nodo i , que denotaremos por deg_i . Si $\mathbf{DEG} = \mathbf{DEG}(G) = (\mathbf{DEG}_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ es la matriz diagonal de componentes $\mathbf{DEG}_{ij} = \text{deg}_i \delta_{ij}$ (donde δ_{ij} es la delta de Kronecker, es decir, $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$ y $\delta_{ii} = 1$), entonces la *matriz Laplaciana* del grafo G , $\mathbf{L} = \mathbf{L}(G) = (\mathbf{L}_{ij})_{1 \leq i, j, N}$, se define como [14]

$$\mathbf{L}(G) = \mathbf{DEG}(G) - \mathbf{A}(G).$$

A partir de la matriz de adyacencia \mathbf{A} (y de otras matrices relevantes, como la Laplaciana y algunas que veremos enseguida), la teoría de grafos nos enseña cómo obtener una serie de herramientas algebraicas muy útiles para caracterizar G . Aquí consideraremos sólo dos de entre las más sencillas: (i) el polinomio característico,

$$p_{\mathbf{A}}(x) = \det(\mathbf{A} - x\mathbf{I}),$$

donde \mathbf{I} denota la matriz unidad $N \times N$, y (ii) el espectro (es decir, el conjunto de valores propios λ_k de la matriz \mathbf{A} , $p_{\mathbf{A}}(\lambda_k) = 0$), si bien sólo suelen utilizarse los valores propios máximo $\lambda_{\text{máx}}$ (que caracteriza la ramificación o *branching* de G) y mínimo $\lambda_{\text{mín}}$. Puede probarse fácilmente que $\lambda_{\text{mín}} < 0 < \lambda_{\text{máx}}$. Digamos de paso que el polinomio característico de la matriz Laplaciana, $p_{\mathbf{L}}(x)$, se llama *polinomio Laplaciano*.

La *matriz de distancia*, $\mathbf{D} = \mathbf{D}(G)$, es una matriz $N \times N$ simétrica cuyas componentes son las ‘distancias topológicas’

$$\mathbf{D}_{ij} = \begin{cases} \text{longitud mínima de los caminos que unen } i \text{ y } j, & \text{si } i \neq j, \\ 0, & \text{si } i = j. \end{cases}$$

Así, pues, \mathbf{D} proporciona una imagen cualitativa de las relaciones de proximidad o lejanía entre los átomos de la molécula. La suma de las distancias topológicas entre el vértice i y todos los demás vértices del grafo molecular, se llama la *suma de distancias* del vértice i :

$$\mathbf{D}\mathbf{s}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{D}_{ij} = \sum_{j=1}^N \mathbf{D}_{ji}. \quad (1)$$

Obsérvese, finalmente, que la matriz de distancia puede obtenerse a partir de la matriz de adyacencia. La Figura 1 da asimismo la matriz $\mathbf{D} = (\mathbf{D}_{ij})_{1 \leq i, j, N}$ de la molécula 2,3-dimetil-butano.

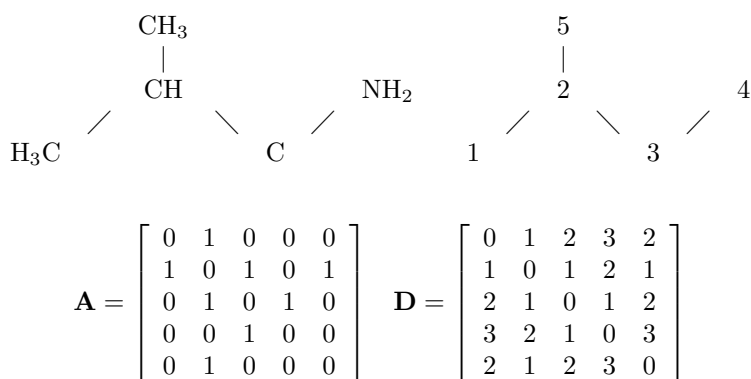


Figura 1: El grafo de la molécula 2,3-dimetil-butano y sus matrices de adyacencia y de distancia.

Otras matrices utilizadas en topología molecular incluyen la matriz $\chi = \chi(G) = (\chi_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ [18], donde

$$\chi_{ij} = \begin{cases} (\deg_i \cdot \deg_j)^{-1/2} & \text{si } e_{ij} \in E(G), \\ 0 & \text{en caso contrario,} \end{cases}$$

la matriz de distancias recíprocas [9], la matriz *detour* [20], la matriz de resistencia [12], etc.

2.2 Índices topológicos

La finalidad de los *índices topológicos* es codificar información topológica sobre las moléculas de forma puramente numérica. Este formato facilita enormemente

la búsqueda automatizada de moléculas con propiedades estructurales comunes y, por tanto, posibles candidatos a compartir propiedades químicas o farmacológicas deseadas. La relación entre grafos e índices topológicos no es unívoca, de manera que dado un índice topológico o un conjunto de ellos, en general no es posible identificar el grafo molecular correspondiente; esto es lo que se llama el *problema de degeneración*. Es esta degeneración, justamente, la que permite identificar grupos de moléculas con propiedades comunes mediante índices topológicos. El adjetivo ‘topológico’ hace referencia a que la información contenida en los índices es invariante respecto a propiedades ‘no esenciales’, como pueden ser la numeración de los nodos, las distancias reales entre átomos o todas aquellas distorsiones de la molécula que no modifiquen el grafo subyacente. De la gran cantidad de índices topológicos que han sido propuestos en la literatura (véase, por ejemplo, [2]), aquí nos conformaremos con presentar una selección de aquéllos que han probado ser más útiles en la práctica, agrupados por el tipo de información que contienen. Por brevedad, nos limitaremos a índices basados en las matrices de adyacencia y de distancia.

2.2.1 Índices basados en la matriz de adyacencia

Randić introdujo en 1975 un primer número de conectividad χ_R , llamado *índice de Randić*, para caracterizar la ramificación del grafo molecular [16]. Si $E(G)$ denota el conjunto de aristas del grafo G , sea $f : E(G) \rightarrow \mathbb{R}$ la función

$$f(e_{ij}) = (\deg_i \cdot \deg_j)^{-1/2}. \quad (2)$$

Entonces, χ_R se define como

$$\chi_R(G) = \sum_{e_{ij} \in E(G)} f(e_{ij}).$$

Como consecuencia, a una mayor ramificación de la molécula, le corresponde un valor menor de χ_R .

Posteriormente, Randić introdujo un segundo número de conectividad, llamado *número de identificación ID* [17]. Dado el camino p de longitud m en G , definimos la función f^* del conjunto de caminos en G con valores en \mathbb{R} como

$$f^*(p) = \prod f(e_{ij}), \quad (3)$$

donde el producto es sobre las aristas e_{ij} que componen el camino p . Entonces,

$$ID(G) = N + \sum_p f^*(p), \quad (4)$$

donde N es el número de vértices del grafo.

El índice de Randić fue generalizado por Kier y Hall [10, 11]. Para definir los *índices ${}^m\chi$ de Kier y Hall*, se descompone primero el grafo molecular en subgrafos con m aristas contiguas. Entonces,

$${}^m\chi(G) = \sum \left(\deg_{i_1} \cdot \deg_{i_2} \cdot \dots \cdot \deg_{i_{m+1}} \right)^{-1/2}, \quad (5)$$

donde la suma es sobre todos los caminos en G formados por m aristas $e_{i_1 i_2}, \dots, e_{i_m i_{m+1}}$. Obsérvese que ${}^1\chi = \chi_R$. En particular, se denotan mediante

$${}^m\chi_p, {}^m\chi_c, {}^m\chi_{pc}, {}^m\chi_{ch}, \dots \quad (6)$$

los índices de Kier y Hall obtenidos mediante subgrafos del tipo *path*, *cluster* (estrella), *path/cluster*, *chain* (polígonos), etc.

2.2.2 Índices basados en la matriz de distancia

Los índices basados en la matriz de distancia se llaman a veces *índices geométricos*, para distinguirlos de aquéllos derivados de la matriz de adyacencia.

El *índice de Wiener* W fue definido originalmente como el número de enlaces entre todos los pares de átomos de una molécula acíclica [21]. La definición de W basada en la matriz de distancia \mathbf{D} fue propuesta por Hosoya [19] como la semisuma de los elementos no-diagonales de la matriz \mathbf{D} :

$$W(G) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \mathbf{D}_{ij} = \sum_{i<j} \mathbf{D}_{ij} = \sum_{i>j} \mathbf{D}_{ij}$$

(ya que $\mathbf{D}_{ii} = 0$). El índice de Wiener es uno de los índices topológicos más estudiados debido a su simplicidad y buena correlación con las propiedades estructurales del grafo molecular. Sin embargo, su degeneración es relativamente alta, lo que obliga a utilizarlo con otros índices (por ejemplo, con los índices de información que veremos más abajo).

Por su parte, Hosoya introdujo asimismo el índice que actualmente se conoce como *índice de Hosoya* [19]:

$$Z(G) = \sum_k n(G, k),$$

donde $n(G, k)$ es el número de maneras en que podemos elegir k aristas no-adyacentes de G . Por definición, $n(G, k) \equiv 1$ y $n(G, 1) = |E(G)|$.

El *índice de Balaban* [1] del grafo molecular G se define por la fórmula

$$J(G) = \frac{|E(G)|}{\mu + 1} \sum_{e_{ij} \in E(G)} (\mathbf{DS}_i \cdot \mathbf{DS}_j), \quad (7)$$

donde \mathbf{DS}_i y \mathbf{DS}_j denotan las sumas de distancias (1) de los vértices i y j , respectivamente, extremos del eje $e_{ij} \in E(G)$ y μ denota el número de ciclos de G . Se ha probado analítica y computacionalmente que el índice de Balaban tiene muy poca degeneración.

Fue también Balaban quien sugirió sustituir en la definición del número de identificación de Randić 4, la función $f(e_{ij})$, ec. (2), por

$$g(e_{ij}) = (\mathbf{DS}_i \cdot \mathbf{DS}_j)^{-1/2}$$

y la función $f^*(p)$, ec. (3), por

$$g^*(p) = \prod g(e_{ij}).$$

De forma análoga a (4), se define entonces el *número de identificación selectivo SID* como

$$SID(G) = N + \sum_p g^*(p).$$

Como indica su nombre, se ha encontrado que el índice *SID* es altamente selectivo [3].

Para concluir este breve listado, mencionaremos, además, el *índice molecular topológico MTI* que se define a partir de las matrices \mathbf{A} y \mathbf{D} . En primer lugar, se introduce el vector $\mathbf{E} = \mathbf{E}(G)$ de descriptores estructurales para vértices,

$$\mathbf{E}(G) = \mathbf{Deg}(G)(\mathbf{A} + \mathbf{D}), \quad (8)$$

donde $\mathbf{Deg}(G) = (\deg_1, \dots, \deg_N)$ es el *vector de grados* de G (que identificamos con una matriz $1 \times N$) que multiplica matricialmente en (8) a la matriz $\mathbf{A} + \mathbf{D}$, de dimensiones $N \times N$. Entonces,

$$MTI(G) = \sum_{i=1}^N \mathbf{E}_i.$$

Este índice topológico, como todos los anteriores, ha sido estudiado intensamente en la literatura y probado ser muy útil en topología molecular.

2.2.3 Índices basados en la teoría de la información

Por último, repasaremos algunos índices geométricos, inspirados en la teoría de la información.

Los *índices de información* I_D^E y \bar{I}_D^E , que representan la información total y promedio sobre las distancias en el grafo molecular G con N vértices, se definen como

$$I_D^E(G) = \frac{N(N-1)}{2} \log_2 \frac{N(N-1)}{2} - \sum_{k=1}^l d(G, k) \log_2 d(G, k),$$

$$\bar{I}_D^E(G) = \frac{2I_D^E(G)}{N(N-1)} = - \sum_{k=1}^l \frac{2d(G, k)}{N(N-1)} \log_2 \frac{2d(G, k)}{N(N-1)},$$

donde $d(G, k)$ denota el número de pares de vértices en G separados una distancia k , y l es el ‘diámetro’ de G (es decir, el mayor elemento de la matriz de distancia \mathbf{D}). Por otra parte, los índices de información I_D^W y \bar{I}_D^W , que representan la información total y promedio sobre la distribución de distancias

en G , se calculan mediante las fórmulas

$$I_D^W(G) = W \log_2 W - \sum_{k=1}^l d(G, k) k \log_2 k,$$

$$\bar{I}_D^W(G) = \frac{I_D^W(G)}{W} = - \sum_{k=1}^l d(G, k) \frac{k}{W} \log_2 \frac{k}{W},$$

donde W es el índice de Wiener del grafo G .

La lista de índices basados en la teoría de la información incluye también, entre otros varios, los *índices* U , V , X e Y , cuya definición precisa los siguientes descriptores locales: (i) la información local media sobre la magnitud de las distancias,

$$u.inf_i = - \sum_{i \neq j}^N \frac{\mathbf{D}_{ij}}{\mathbf{DS}_i} \log_2 \frac{\mathbf{D}_{ij}}{\mathbf{DS}_i},$$

donde \mathbf{DS}_i es la suma de distancias (1) del vértice i ; (ii) la información local sobre la magnitud de las distancias,

$$v.inf_i = \mathbf{DS}_i \log_2 \mathbf{DS}_i - u.inf_i;$$

(iii) la información local extendida media sobre la magnitud de las distancias,

$$y.inf_i = \sum_{i \neq j}^N \mathbf{D}_{ij} \log_2 \mathbf{D}_{ij};$$

y (iv) la información local extendida sobre la magnitud de las distancias,

$$x.inf_i = \mathbf{DS}_i \log_2 \mathbf{DS}_i - y.inf_i.$$

Finalmente,

$$U(G) = \frac{|E(G)|}{\mu + 1} \sum_{e_{ij} \in E(G)} (u.inf_i \cdot u.inf_j)^{-1/2},$$

$$V(G) = \frac{|E(G)|}{\mu + 1} \sum_{e_{ij} \in E(G)} (v.inf_i \cdot v.inf_j)^{-1/2},$$

$$X(G) = \frac{|E(G)|}{\mu + 1} \sum_{e_{ij} \in E(G)} (x.inf_i \cdot x.inf_j)^{-1/2},$$

$$Y(G) = \frac{|E(G)|}{\mu + 1} \sum_{e_{ij} \in E(G)} (y.inf_i \cdot y.inf_j)^{-1/2},$$

donde, al igual que en (7), μ es el número de ciclos de G .

3 Aplicaciones

Esta sección pretende mostrar los procedimientos y aplicaciones de la topología molecular.

3.1 Predicción de propiedades específicas y selección de nuevas moléculas

El objetivo último de la topología molecular es el establecimiento de ecuaciones de correlación entre propiedades moleculares e índices topológicos. Para ello suele utilizarse el *análisis lineal discriminante*, introducido por R.A. Fisher en 1936, si bien algunos autores prefieren técnicas no lineales como, por ejemplo, redes neuronales. Nosotros nos limitaremos al análisis lineal por ser el más extendido y, por tanto, el mejor contrastado.

El objetivo del análisis discriminante es encontrar una función capaz de distinguir (o discriminar, de ahí el nombre) entre dos o más categorías o grupos de objetos. La capacidad discriminante se mide determinando el porcentaje de objetos clasificados correctamente dentro de cada grupo.

En la práctica, el análisis discriminante se realiza mediante alguno de los paquetes estadísticos disponibles en el mercado (SPSS, BMDP, STATISTICA, etc.). La selección de los descriptores se basa en el parámetro F-Snedecor, y el criterio de clasificación es la menor distancia de Mahalanobis, que es la distancia entre el valor individual y el valor medio global que aparece en la ecuación de regresión. El programa estadístico elige las variables usadas en la computación de las funciones de clasificación (normalmente lineal) paso a paso: en cada una de estas fases, la variable que aporta más a la separación de los grupos se introduce en la función de discriminación, mientras que la que aporta menos, se elimina. La calidad de la función de discriminación se evalúa con el parámetro lambda de Wilks (llamado también U-estadístico), empleando el test de igualdad de las medias de grupo para las variables de la función de discriminación.

En el caso que nos ocupa, los descriptores son los índices topológicos y el objetivo es clasificar una molécula dada como ‘buena’ (o activa) o ‘mala’ (o inactiva) respecto de cierta propiedad farmacológica, empleando para ello una función lineal discriminante. Supongamos, pues, que se ha elegido un conjunto determinado de p índices topológicos, que denotaremos por x_1, x_2, \dots, x_p . A continuación, seleccionamos una muestra proveniente de una base de datos de moléculas, de las que sabemos cuáles poseen determinada propiedad y cuáles no. De las moléculas que tengan dicha propiedad, diremos que están en la clase \mathcal{G} (*good*) y, en caso contrario, diremos que están en la clase \mathcal{B} (*bad*). Supondremos, además, que la propiedad farmacológica en cuestión es medible y, en consecuencia, que dicha característica viene determinada por el valor de una variable y que toma valores en un intervalo cerrado I . Por último, establecemos la hipótesis de trabajo de que la variable y se puede escribir como combinación lineal de los índices topológicos considerados:

$$y = c_1x_1 + \dots + c_px_p.$$

La propuesta de Fisher es la siguiente. Denotemos por la igualdad matricial

$$\mathbf{y} = \mathbf{Xc} \tag{9}$$

al sistema de igualdades formado por las n observaciones realizadas, siendo $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$ (el superíndice T denota, como de costumbre, transposición, de manera que \mathbf{y} es un vector columna), \mathbf{X} una matriz $n \times p$ y $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_p)^T \in \mathbb{R}^p$. Supongamos, además, que tenemos n_G muestras de la población \mathcal{G} y n_B muestras de la población \mathcal{B} ($n_G + n_B = n$). Entonces podemos escribir el sistema lineal (9) (poniendo primero las muestras ‘buenas’ y, a continuación, las ‘malas’) como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y}_G \\ \mathbf{y}_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_G \\ \mathbf{X}_B \end{pmatrix} \mathbf{c}.$$

donde \mathbf{X}_G es una submatriz $n_G \times p$ y \mathbf{X}_B es una submatriz $n_B \times p$.

Sea $\mathbf{m}_G \in \mathbb{R}^p$ (respectivamente, $\mathbf{m}_B \in \mathbb{R}^p$) el vector de medias calculadas por columnas en \mathbf{X}_G (respectivamente, \mathbf{X}_B). Definamos del mismo modo la media \mathbf{m} calculada por columnas empleando \mathbf{X} . Denotemos por $\bar{y}_G, \bar{y}_B, \bar{y}$ las medias calculadas por columna empleando los vectores $\mathbf{y}_G, \mathbf{y}_B$ e \mathbf{y} , respectivamente. Entonces podemos escribir la dispersión total de las observaciones $y_i, 1 \leq i \leq n$, como

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \mathbf{y}^T \mathbf{H} \mathbf{y} = \mathbf{c}^T \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X} \mathbf{c} = \mathbf{c}^T \mathbf{T},$$

donde $\mathbf{H} = \mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T$ es una matriz simétrica $n \times n$, \mathbf{I} es la matriz unidad $n \times n$, $\mathbf{1}_n \in \mathbb{R}^n$ es el vector que tiene todas sus entradas iguales a 1 y $\mathbf{T} = \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X}$ es una matriz $p \times p$ denominada *matriz de dispersión total*. La dispersión dentro de grupos \mathcal{G} y \mathcal{B} la podemos describir mediante la expresión

$$\mathbf{Y}_B^T \mathbf{H}_B \mathbf{Y}_B + \mathbf{Y}_G^T \mathbf{H}_G \mathbf{Y}_G = \mathbf{c}^T (\mathbf{X}_B^T \mathbf{H}_B \mathbf{X}_B + \mathbf{X}_G^T \mathbf{H}_G \mathbf{X}_G) \mathbf{c},$$

La matriz $\mathbf{W} = \mathbf{X}_B^T \mathbf{H}_B \mathbf{X}_B + \mathbf{X}_G^T \mathbf{H}_G \mathbf{X}_G$ es simétrica y de dimensiones $p \times p$.

Por otra parte, la dispersión total entre estos mismos grupos se puede expresar como

$$\begin{aligned} n_G (\bar{y}_G - \bar{y})^2 + n_B (\bar{y}_B - \bar{y})^2 &= n_G (\mathbf{c}^T (\mathbf{m}_G - \mathbf{m}))^2 + n_B (\mathbf{c}^T (\mathbf{m}_B - \mathbf{m}))^2 \\ &= \mathbf{c}^T \mathbf{B} \mathbf{c}, \end{aligned}$$

donde

$$\mathbf{B} = \frac{n_G n_B}{n} (\mathbf{m}_G - \mathbf{m}_B) (\mathbf{m}_G - \mathbf{m}_B)^T.$$

Finalmente, se puede demostrar que

$$\mathbf{c}^T \mathbf{T} \mathbf{c} = \mathbf{c}^T \mathbf{W} \mathbf{c} + \mathbf{c}^T \mathbf{B} \mathbf{c}.$$

La idea de Fisher consiste en la elección un vector \mathbf{c} que maximice el cociente

$$\frac{\mathbf{c}^T \mathbf{B} \mathbf{c}}{\mathbf{c}^T \mathbf{W} \mathbf{c}}$$

La solución general de este problema viene dada por el vector propio de la matriz $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ que corresponde al valor propio de mayor magnitud. En nuestro caso, la matriz $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ tiene un único valor propio que es igual a su traza (es decir, a la suma de sus elementos diagonales) y el correspondiente vector propio es $\mathbf{c} = \mathbf{W}^{-1}(\mathbf{m}_G - \mathbf{m}_B)$. La regla para discriminar entre grupos se basa en la *distancia de Mahalanobis*. Dada una observación $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^p$, diremos que se encuentra en la clase \mathcal{G} si la distancia de Mahalanobis a \mathbf{m}_G es menor que la distancia de Mahalanobis a \mathbf{m}_B , esto es, si

$$(\mathbf{x} - \mathbf{m}_G)^T \mathbf{W}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_G) < (\mathbf{x} - \mathbf{m}_B)^T \mathbf{W}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{m}_B).$$

Se puede comprobar que esta expresión es equivalente a

$$\mathbf{c}^T \left(\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mathbf{m}_G + \mathbf{m}_B) \right) > 0.$$

En consecuencia, la función discriminante la podemos expresar del modo siguiente:

$$\mathbf{x} \in \mathcal{G} \quad \text{si} \quad \mathbf{c}^T \left(\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mathbf{m}_G + \mathbf{m}_B) \right) > 0,$$

$$\mathbf{x} \in \mathcal{B} \quad \text{si} \quad \mathbf{c}^T \left(\mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mathbf{m}_G + \mathbf{m}_B) \right) \leq 0.$$

Podemos emplear entonces esta función para determinar si nuevas moléculas poseen o no la característica farmacológica sujeta a estudio (es decir, si son activas o inactivas) en base únicamente a sus índices topológicos.

3.2 Aplicaciones concretas

Como dijimos en la Introducción, la topología molecular nació del estudio de las propiedades físico-químicas de compuestos orgánicos. Como es de esperar, las aplicaciones biológicas y farmacológicas no suelen ser tan determinantes, debido a la gran variabilidad individual de los animales de laboratorio o de las personas sometidas a tratamiento. Además, muchas de las propiedades biológicas son menos específicas que las físicas o químicas, es decir están menos ligadas a la estructura molecular y más relacionadas con la presencia de grupos químicos funcionales, tamaño molecular, etc. Y aunque esto es una gran limitación, algunos autores han obtenido resultados muy interesantes, como por ejemplo Murakami [15] que estableció relaciones cuantitativas entre los índices de conectividad molecular y la unión a proteínas celulares de una serie de pesticidas. Por su parte, Kier y Hall llegaron a una correlación excelente para la acción anestésica local con el índice ${}^1\chi$ y, en otro estudio similar, se probó la correlación entre el logaritmo de la concentración de inhibición del M. Tuberculosis por un conjunto de alquil-bromofenoles y el índice ${}^1\chi^v$ [10] (${}^m\chi^v$ se obtiene formalmente como ${}^m\chi$, sustituyendo en (5) deg_i por $\text{deg}_i^v = Z_i^v - H_i$, donde Z_i^v y H_i son, respectivamente, el número de electrones de valencia del átomo i y el correspondiente número de átomos de hidrógenos suprimidos).

Veamos un ejemplo concreto de aplicación del método topológico a la analgesia [7]. En este estudio, la función discriminante contenía 11 índices

topológicos (todos ellos índices de Kier y Hall), a saber:

$${}^0\chi, {}^1\chi, {}^1\chi^v, {}^2\chi^v, {}^3\chi_p, {}^3\chi_c, {}^3\chi_p^v, {}^3\chi_c^v, {}^4\chi_p, {}^4\chi_c, {}^4\chi_{pc},$$

(véase (6)). Como resultado del análisis discriminante, se seleccionó un conjunto de 17 moléculas con acción analgésica entre las que había derivados de estructuras químicas con reconocida acción analgésica, como el ácido acetilsalicílico (componente activo de la Aspirina) y las pirazolonas, mientras que otras eran inéditas y, por tanto, se podrían utilizar como cabezas de serie para una nueva gama de analgésicos.

Se realizaron pruebas farmacológicas para confirmar la actividad analgésica, para determinar la dosis eficaz 50 (es decir, la que es óptima para el 50 % de los animales de laboratorio estudiados) y, asimismo, para determinar la dosis letal 50 (es decir, la que provoca la muerte en la mitad de los animales tratados con ese fármaco) para estudios de toxicidad. Estas pruebas se realizaron en ratones de entre 20 y 30 gramos, en número suficiente para obtener datos estadísticos fiables. Las pruebas de analgesia se realizaron siguiendo el protocolo de Witkin [23]. De las 17 moléculas estudiadas, 10 presentaron una clara acción analgésica [7]. El resultado más interesante fue el descubrimiento de que una molécula inédita, concretamente el 2-(1-propenil) fenol, tiene un porcentaje de analgesia que es casi el doble que el del ácido acetilsalicílico. Otra molécula inédita, la 2',4'-dimetilacetofenona, obtuvo resultados parecidos a la anterior. Ambas moléculas fueron patentadas (Patentes nº P.9101034 y P.9101134).

Pero eso no es todo. El índice terapéutico (IT), que es el más empleado para determinar el grado de inocuidad de un medicamento, viene dado por la relación entre la dosis letal 50 y la dosis eficaz 50. Debe ser igual o mayor de 10 para que un medicamento pueda considerarse seguro. Para el 2-(1-propenil) fenol, el índice terapéutico es de 21 y para la 2',4'-dimetilacetofenona, de 16 (compárense estos valores con el IT = 5 del ácido acetilsalicílico). El valor de este índice para la sulfadiazina está en medio de los dos anteriores, a saber, 18. Esto pone de manifiesto el aceptable grado de inocuidad de estos nuevos analgésicos en cuanto a la toxicidad aguda.

Compuesto	Analgésia (%)	DE50 (mg/kg)	DL50 (mg/kg)	IT
Ácido acetilsalicílico	49 ± 1	100 ± 8	500 ± 20	5
2-(1-propenil) fenol	85 ± 1	34 ± 5	720 ± 10	21
2',4'-dimetilacetofenona	80 ± 1	45 ± 5	700 ± 10	16
p-metil-propiofenona	56 ± 1	100 ± 3	590 ± 20	6
Sulfadiazina	43 ± 1	112 ± 10	2000	18

Cuadro 1: Resumen del estudio de analgesia en [7]

Otro ejemplo significativo es el hallazgo de nuevos antivíricos eficaces contra el Herpes Simplex-tipo I. Aquí la topología molecular hizo posible el

descubrimiento del ácido 1,2,3 triazol-4,5 dicarboxílico, que nunca se había utilizado como antivírico [5].

Para terminar, citemos dos ejemplos más: búsqueda de antihistamínicos [6] y búsqueda de antimaláricos [8].

Referencias

- [1] A.T. Balaban, Highly discriminating distance-based topological index, *Chem. Phys. Lett.* **89** (1982), 399-404.
- [2] A.T. Balaban, I. Motoc, D. Bonchev y O. Mekenyan, Topological indices for structure-activity correlations, *Top. Curr. Chem.* **114** (1984), 21-71.
- [3] A.T. Balaban, Numerical modelling of chemical structures: Local graph invariants and topological indices. In, *Graph Theory and Topology in Chemistry* (R.B. King and D.H. Rouvray, Eds.), Elsevier, Amsterdam, *Stud. Phys. Theor. Chem.* **51**, 159-176.
- [4] B. Bollobás, *Modern Graph Theory*, Springer Verlag, New York, 1998.
- [5] J.V. de Julián-Ortiz, J. Gálvez, C. Muñoz, R. García-Domenech y C. Gimeno, Virtual Combinatorial Syntheses and Computational Screening of New Potential Anti-Herpes Compounds, *J. Med. Chem.* **42** (1999), 3308-3314.
- [6] M.J. Duart, R. García-Domenech, J. Gálvez, P. Alemán, R.V. Martín-Algarra y G.M. Antón-Fos, Application of a mathematical topological pattern of antihistaminic activity for the selection of new drug candidates and pharmacology assays, *J. Med. Chem.* **49** (2006), 3667-3673.
- [7] J. Gálvez, R. García-Domenech, J.V. de Julián-Ortiz y R. Soler, Topological Approach to Analgesia, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **34** (1994), 1198-1203.
- [8] J. Gálvez, J.V. de Julián-Ortiz y R. García-Domenech, Diseño y desarrollo de nuevos fármacos contra la malaria, *Enf. Emerg.* **7** (2005), 44-51.
- [9] O. Ivanciuc, T.S. Balaban y A.T. Balaban, Design of topological indices. Part IV: Reciprocal distance matrix, related local vertex invariants and topological indices, *J. Math. Chem.* **12** (1993), 309-318.
- [10] L.B. Kier y L.H. Hall, *Molecular Connectivity in Chemistry and Drugs Research*, Academic Press, London, 1976.
- [11] L.B. Kier y L.H. Hall, *Molecular Connectivity in Structure-Activity Analysis*, Research Studies Press, Letchworth, 1986.
- [12] D.J. Klein y M. Randić, Resistance distance, *J. Math. Chem.* **12** (1993), 81-95.

- [13] L.C. Miller y M.L. Tainter, Calculation of ED50 and LD50, *Proc. Soc. Exp. Biol. Med.* **57** (1944), 261-264.
- [14] B. Mohar, Laplacian matrices of graphs, *Stud. Phys. Theor. Chem.* **63** (1989), 1-8.
- [15] M. Murakami y J. Fukami, J. Specific molecular connectivity analysis of pesticides and related compounds: a preliminary study. *Bull Environ Contam Toxicol.* **34** (1985), 775-9.
- [16] M. Randić, On characterization of molecular branching, *J. Am. Chem. Soc.* **97** (1975), 6609-6615.
- [17] M. Randić, On molecular identification numbers, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **24** (1984), 164-175.
- [18] M. Randić, Similarity based on extended basis descriptors, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **32** (1992), 686-692.
- [19] H. Hosoya, A newly proposed quantity characterizing the topological nature of structural isomers of saturated hydrocarbons, *Bull. Chem. Japan* **44** (1971), 2332-2339.
- [20] N. Trinajstić, S. Nikolić, B. Lučić, D. Amić y Z. Mihalić, The detour matrix in chemistry, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **37** (1997), 631-638.
- [21] H. Wiener, Structural determination of paraffin boiling points, *J. Am. Chem. Soc.* **69** (1947), 17-20.
- [22] E. Wigner, The unreasonable effectiveness of mathematics in the natural sciences, *Comm. Pure Appl. Math* **13** (1960).
- [23] L.B. Witkin, C.F. Heubner, F. Galdi, E. O'Keefe, P. Spitaletta y A.J. Plummer, Pharmacology of 2-amino-indane hydrochloride (Su-8629): a potent non-narcotic analgesic, *J. Pharmacol. Exp. Ther.* **133** (1961), 400-408.

Ninth International Conference Zaragoza–Pau on Applied Mathematics and Statistics

Editores: M. Madaune–Tort, D. Trujillo, M.C. López de Silanes, M. Palacios, G. Sanz y J.J. Torrens

Monografías del Seminario Matemático García de Galdeano 33

ISBN: 84–7733–871–X (442+xxxii páginas) – 2006

Por F.J. Sayas

Las antaño Jornadas Zaragoza–Pau de Matemática Aplicada y Estadística, que se celebran en la localidad oscense de Jaca con periodicidad bienal desde finales de los ochenta, han crecido en los últimos años a un congreso internacional que reúne a un largo centenar de investigadores de ambos lados de la frontera pirenaica. Su novena edición, en septiembre de 2005, incluyó diez conferencias plenarias, setenta y tres comunicaciones orales y veinte pósters sobre distintos temas de la matemática aplicada y estocástica. Dos sesiones especiales, sobre *Aero–Termodinámica y Difusión, Convección y Medios Porosos*, aunaron aspectos teóricos y prácticos de terrenos de fuerte vocación interdisciplinar.

Este volumen, editado por la Universidad de Zaragoza dentro de la serie de monografías del Seminario Matemático, incluye



cincuenta y cuatro artículos referenciados correspondientes tanto a las sesiones plenarias como a las contribuidas. Como ya es costumbre en las jornadas más recientes, este tomo de *proceedings* está cuidadosamente editado, con todos los artículos escritos en lengua inglesa. Científicamente, este libro es un buen muestrario de los temas de interés de la comunidad aplicada (matemática–estadística) en las universidades francesas y españolas con un énfasis en los centros que se agrupan en el eje de la Comunidad de Trabajo de los Pirineos (Pamplona, Pau, Toulouse y Zaragoza). En los trabajos incluidos se pueden apreciar las (fuertes) conexiones presentes y posibles entre la matemática española y francesa, a la vez que se pueden entrever las divergencias existentes.

Estimados socios:

Os comento algunas noticias que pueden ser de vuestro interés. Recordad que podéis consultar esta información desde la página web de SēMA (www.sema.org.es).

BOLETÍN DE SēMA EN MATHSCINET

Tras la solicitud por parte de SēMA, desde fechas recientes los artículos del Boletín de SēMA, a partir del número 32, aparecen recogidos en la bases de datos MATHSCINET (www.ams.org/mathscinet/). Se están haciendo las gestiones para la incorporación de los números anteriores del Boletín. Entendemos que esta iniciativa contribuye a una mayor difusión y reconocimiento de la revista.

ECCOMAS AWARD FOR THE BEST THESIS OF 2006 ON COMPUTATIONAL METHODS IN APPLIED SCIENCES AND ENGINEERING

Como sabéis todos los años SēMA propone un candidato para este premio. Este año el comité de selección nombrado por SēMA eligió la tesis doctoral de Ana María Ferreiro Ferreiro, titulada *Development of post-process techniques for hydrodynamic flows, modelling of sediment transport problems and numerical simulation using finite volume techniques*.

Desde SēMA transmitimos nuestra sincera felicitación a la doctora y a los directores de la tesis, Manuel Castro Díaz y Enrique Fernández Nieto. También felicitamos al resto de los candidatos por el nivel del trabajo realizado.

Más recientemente, el 4 de Mayo de 2007, se ha reunido el Comité de Evaluación del premio ECCOMAS para decidir las dos tesis premiadas entre las 19 candidatas: Finalmente, los ganadores son:

Dr. Per Heintz (Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden) por la tesis *Finite Element Procedures for the Numerical simulation of Crack Propagation and Bilateral Contact*,

Dr. Santiago Badia (Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spain) por la tesis *Stabilized pressure segregation methods and their application to fluid-structure interaction problems*,

a los que felicitamos desde SēMA, junto a sus directores. Todos los candidatos propuestos por las sociedades recibirán un diploma acreditativo.

ELECCIONES SēMA

Como todos los años se ha publicado la convocatoria de elecciones para cubrir CUATRO puestos vacantes en el Comité Ejecutivo de SēMA. El plazo para presentar candidaturas termina el próximo 4 de septiembre de 2007. La elección se realizará, como es habitual, en la Asamblea Ordinaria que tendrá lugar durante la celebración del próximo CEDYA en Sevilla. Recibiréis información detallada por e-mail y a través de la web de SēMA.

Un cordial saludo,
Carlos Castro.

Tipo de evento:	Congreso
Nombre:	NONCONVEX PROGRAMMING: LOCAL AND GLOBAL APPROACHES. THEORY, ALGORITHMS AND APPLICATIONS
Lugar:	National Institute for Applied Sciences, Rouen, France
Fecha:	del 17 al 21 de diciembre de 2007
E-mail:	lethi@univ-metz.fr (Prof. LE THI Hoai An), pham@insa-rouen.fr (Prof. PHAM DINH Tao)
WWW:	http://ncp07.insa-rouen.fr

Tipo de evento:	Congreso
Nombre:	XX CONGRESO DE ECUACIONES DIFERENCIALES Y APLICACIONES (CEDYA) / X CONGRESO DE MATEMÁTICA APLICADA (CMA)
Lugar:	Sevilla
Fecha:	del 24 al 28 de septiembre de 2007
WWW:	www.congreso.us.es/cedya2007

Tipo de evento:	Congreso
Nombre:	THE 2 ND INTERNATIONAL CONFERENCE ON VIRTUAL LEARNING
Lugar:	University OVIDIUS Constanta, Constanta, ROMANIA
Fecha:	del 26 al 28 de octubre de 2007
E-mail:	vlada@fmi.unibuc.ro (Dr. M. Vlada); galbeanu@gmail.com
WWW:	www.icvl.eu/2007

Tipo de evento:	Workshop
Nombre:	OPTIMAL TRANSPORT (LONG PROGRAM)
Lugar:	UCLA, Los Angeles, California
Fecha:	del 10 de marzo al 13 de junio de 2008
Organiza:	Andrea Bertozzi (University of California, Los Angeles (UCLA), Mathematics), Yann Brenier (Université de Nice Sophia Antipolis), Wilfrid Gangbo (Georgia Institute of Technology), Peter Markowich (Universität Wien, Institute of Mathematics) y Jean-Michel Morel (École Normale Supérieure de Cachan, CMLA)
E-mail:	ot2008@ipam.ucla.edu
WWW:	www.ipam.ucla.edu/programs/ot2008

Tipo de evento:	Workshop
Nombre:	NONLINEAR PDES OF MIXED TYPE ARISING IN MECHANICS AND GEOMETRY
Lugar:	American Institute of Mathematics, Palo Alto, California
Fecha:	del 17 al 21 de marzo de 2008
Organiza:	Gui-Qiang Chen, Tai-Ping Liu, Richard Schoen y Marshall Slemrod
E-mail:	workshops@aimath.org
WWW:	http://aimath.org/ARCC/workshops/pdesofmixedtype.html

Tipo de evento:	Workshop
Nombre:	IMA WORKSHOP: NETWORK DYNAMICS AND CELL PHYSIOLOGY
Lugar:	University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota
Fecha:	17 y 18 de abril de 2008
Organiza:	Bela Novak (Budapest University of Technology and Economics), John Tyson (Virginia Polytechnic Institute & State University)
E-mail:	visit@ima.umn.edu
WWW:	www.ima.umn.edu/2007-2008/T4.17-18.08

Tipo de evento:	Workshop
Nombre:	IMA WORKSHOP: DESIGN PRINCIPLES IN BIOLOGICAL SYSTEMS
Lugar:	University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota
Fecha:	del 21 al 25 de abril de 2008
E-mail:	visit@ima.umn.edu
WWW:	www.ima.umn.edu/2007-2008/W4.21-25.08

Tipo de evento:	Congreso
Nombre:	5-TH EUROPEAN CONGRESS OF MATHEMATICS
Lugar:	Amsterdam
Fecha:	del 14 al 18 de julio de 2008
Organiza:	Stichting 5ECM (bajo auspicios de la EMS)
WWW:	www.5ecm.nl

Arrarás Ventura, Andrés

Prof. Ayudante de Universidad. *Líneas de investigación:* Análisis numérico de EDP's parabólicas; dinámica no lineal de flujos en medios porosos. – UNIV. PÚBLICA DE NAVARRA – Dpto. de Ingeniería Matemática e Informática – Campus de Arrosadía, s/n. 31006 Pamplona.

Tlf.: 948168049. *Fax:* 948169521.

e-mail: andres.arraras@unavarra.es.

Camacho Vázquez, Gema

Estudiante (Becario). *Líneas de investigación:* Análisis teórico y numérico de ecuaciones en derivadas parciales – UNIV. DE SEVILLA – Fac. de Matemáticas – Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico – Tarfia, s/n. 41012 Sevilla.

Tlf.: 954556807. *Fax:* 954552898.

e-mail: gemacv@us.es.

Fernández Romero, Ascensión

e-mail: sensi_f@hotmail.com.

Ferreiro Ferreiro, Ana María

Prof. Asociado. *Líneas de investigación:* Sistemas hiperbólicos, volúmenes finitos, alto orden, transporte de sedimentos. – UNIV. DE LA CORUÑA – E. U. de Arquitectura Técnica – Dpto. de Matemáticas – Campus de Zapateira, s/n. 15071 La Coruña.

Tlf.: 981167000 Ext. 2740. *Fax:* 981167160.

e-mail: aferreiro@udc.es.

Gaspar Lorenz, Francisco José

Prof. Titular de Universidad. *Líneas de investigación:* Métodos multimalla, diferencias finitas, poroelasticidad – UNIV. DE ZARAGOZA – Centro Politécnico Superior – Dpto. de Matemática Aplicada – C/ María de Luna, 3 50018 Zaragoza.

Tlf.: 976762010. *Fax:* 976761886.

e-mail: fjgaspar@unizar.es.

Giménez Manglano, Isabel

Prof. Titular de Escuela Universitaria. *Líneas de investigación:* Álgebra lineal numérica – UNIV. POLITÉCNICA DE VALENCIA – Escuela de Informática Aplicada – Dpto. de Matemática Aplicada – Camino de Vera, s/n. 46021 Valencia.

Tlf.: 963877007 Ext. 76671. *Fax:*

e-mail: igimenez@imm.upv.es.

Liz Marzán, Eduardo

Prof. Titular de Universidad. *Líneas de investigación:* Ecuaciones diferenciales funcionales, ecuaciones en diferencias, sistemas dinámicos. – UNIV. DE VIGO – E.T.S.I. de Telecomunicación – Dpto. de Matemática Aplicada II – Campus de Lagoas–Marcosende 36310 Vigo (Pontevedra).

Tlf.: 986812127. *Fax:* 986812116.

e-mail: eliz@dma.uvigo.es.

Pasadas Fernández, Miguel

Prof. Titular de Universidad. *Líneas de investigación:* Aproximación de curvas y superficies – UNIV. DE GRANADA – E.T.S.I. de Caminos, Canales y Puertos – Dpto. de Matemática Aplicada – Campus de Fuentenueva, s/n. 18071 Granada.

Tlf.: 958343130. *Fax:* 958249513.

e-mail: mpasadas@ugr.es.

Portero Egea, Laura

Prof. Ayudante de Universidad. *Líneas de investigación:* Análisis numérico de EDP's parabólicas; dinámica no lineal de flujos en medios porosos. – UNIV. PÚBLICA DE NAVARRA – Dpto. de Ingeniería Matemática e Informática – Campus de Arrosadía, s/n. 31006 Pamplona.

Tlf.: 948168052. *Fax:* 948169521.

e-mail: laura.portero@unavarra.es.

Selgas Buznego, Virginia

Prof. Ayudante de Universidad. *Líneas de investigación:* Análisis numérico de ecuaciones en derivadas parciales. – UNIV. DE LA CORUÑA – Fac. de Informática – Dpto. de Matemáticas – Campus de Elviña, s/n. 15071 La Coruña.

Tlf.: 981167000 Ext. 1390. *Fax:* 981167160.

e-mail: vselgas@udc.es.

Suárez Grau, Francisco Javier

Estudiante. *Líneas de investigación:* Análisis teórico y numérico de ecuaciones en derivadas parciales. – UNIV. DE SEVILLA – Fac. de Matemáticas – Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico – Tarfia, s/n. 41012 Sevilla.

Tlf.: 954557981. *Fax:* 954552898.

e-mail: fjsgrau@us.es.

Suárez Taboada, María

Estudiante. *Líneas de investigación:* Finanzas cuantitativas. – UNIV. DE LA CORUÑA – Fac. de Informática – Dpto. de Matemáticas – Campus de Elviña, s/n. 15071 La Coruña.

Tlf.: 981167000 Ext. 1301. *Fax:* 981167160.

e-mail: mariasuarez@udc.es.

Taboada Vázquez, Raquel

Profesor Colaborador. *Líneas de investigación:* Modelización de aguas someras, análisis asintótico. – UNIV. DE LA CORUÑA – E.T.S.I. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos – Dpto. de Métodos Matemáticos y de Representación – Campus de Elviña, s/n. 15071 La Coruña.

Tlf.: 981167000 Ext. 1418. *Fax:* 981167170.

e-mail: raqueltv@udc.es.

Univ. de Málaga

Departamento de Análisis Matemático

Facultad de Ciencias. Campus de Teatinos, s/n. 29071 Málaga. *Tlf.:* 952131894.

Fax: 952131894.

e-mail: girela@uma.es.

<http://webdeptos.uma.es/anamat/>

Direcciones útiles

Consejo Ejecutivo de SĒMA

Presidente:

Carlos Vázquez Cendón. (carlosv@udc.es).

Dpto. de Matemáticas. Facultad de Informática. Univ. de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. *Tel:* 981 16 7000-1335.

Vicepresidente:

Mikel Lezaun Iturralde. (mpleitm@lg.ehu.es).

Dpto. de Matemática Aplicada, Estadística e I.O. Facultad de Ciencias. Univ. del País Vasco. Apartado 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). *Tel:* 944 647700.

Secretario:

Carlos Castro Barbero. (ccastro@caminos.upm.es).

Dpto. de Matemática e Informática. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Univ. Politécnica de Madrid. Av. Aranguren s/n. 28040 Madrid. *Tel:* 91 336 6664.

Vocales:

Rafael Bru García. (rbru@mat.upv.es)

Dpto. de Matemática Aplicada. E.T.S.I. Agrónomos. Univ. Politécnica de Valencia. Camí de Vera, s/n. 46022 Valencia. *Tel:* 963 879 669.

José Antonio Carrillo de la Plata. (carrillo@mat.uab.es)

Dpto. de Matemáticas. Univ. Autónoma de Barcelona. Edificio C. 08193 Bellaterra (Barcelona). *Tel:* 935 812 413.

Rosa María Donat Beneito. (Rosa.M.Donat@uv.es) Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matemàtiques. Univ. de Valencia. Dr. Moliner, 50. 46100 Burjassot (Valencia) *Tel:* 963 544 727.

Inmaculada Higuera Sanz. (higuera@unavarra.es).

Dpto de Matemática e Informática Univ. Pública de Navarra. Campus de Arrosadía, s/n. *Tel:* 948 169 526. 31006 Pamplona.

Carlos Parés Madroñal. (carlos_pares@uma.es).

Dpto. de Análisis Matemático. Fac. de Ciencias. Univ. de Málaga. Campus de Teatinos, s/n. 29080 Málaga. *Tel:* 952 132 017.

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. de Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. *Tel:* 926 295 436

Enrique Zuazua Iriondo. (enrique.zuazua@uam.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 914 974 368.

Tesorero:

Íñigo Arregui Álvarez. (arregui@udc.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Informática. Univ. de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. *Tel:* 981 16 7000-1327.

Comité Científico del Boletín de SēMA

Enrique Fernández Cara. (cara@us.es).

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y An. Numérico. Fac. de Matemáticas. Univ. de Sevilla. Tarfia, s/n. 41012 Sevilla. *Tel:* 954 557 992.

Alfredo Bermúdez de Castro. (mabermud@usc.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matemáticas. Univ. de Santiago de Compostela. Campus Univ.. 15706 Santiago (A Coruña) *Tel:* 981 563 100.

Eduardo Casas Rentería. (eduardo.casas@unican.es).

Dpto. de Matemática Aplicada y C.C.. E.T.S.I. Ind. y Telec. Univ. de Cantabria. Avda. de Los Castros s/n. 39005 Santander. *Tel:* 942 201 427.

José Luis Cruz Soto. (jlacruz@uco.es).

Dpto. de Informática y An. Numérico. Univ. de Córdoba. Campus de Rabanales. Edificio C-2. 14071 Córdoba. *Tel:* 957 218 629.

José Manuel Mazón Ruiz. (Jose.M.Mazon@uv.es).

Dpto. de Análisis Matemático. Fac. de Matemáticas. Univ. de Valencia. Dr. Moliner, 50. 46100 Burjassot (Valencia) *Tel:* 963 664 721.

Ireneo Peral Alonso. (ireneo.peral@uam.es).

Dpto. de Matemáticas, C-XV. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 913 974 204.

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela s/n. 13071 Ciudad Real. *Tel:* 926 295 436 .

Juan Luis Vázquez Suárez. (juanluis.vazquez@uam.es).

Dpto. de Matemáticas, C-XV. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 913 974 935.

Luis Vega González. (mtpvegol@lg.ehu.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. del País Vasco. Apto. 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). *Tel:* 944 647 700.

Enrique Zuazua Iriondo. (enrique.zuazua@uam.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Ciencias. Univ. Aut. de Madrid. Cantoblanco, Ctra. de Colmenar, km. 14. 28049 Madrid. *Tel:* 913 974 368.

Grupo Editor del Boletín de SĒMA

Pablo Pedregal Tercero. (Pablo.Pedregal@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3809

Enrique Fernández Cara. (cara@us.es).

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y An. Numérico. Fac. de Matemáticas. Univ. de Sevilla. Tarfia, s/n. 41012 Sevilla. Tel: 954 557 992.

Ernesto Aranda Ortega. (Ernesto.Aranda@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3813

José Carlos Bellido Guerrero. (JoseCarlos.Bellido@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3859

Alfonso Bueno Orovio. (Alfonso.Bueno@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. Fac. de Químicas. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300

Alberto Donoso Bellón. (Alberto.Donoso@uclm.es).

Dpto. de Matemáticas. E.T.S.I. Industriales. Univ. de Castilla-La Mancha. Avda. Camilo José Cela, s/n. 13071 Ciudad Real. Tel: 926 295 300 ext. 3859

Responsables de secciones del Boletín de SĒMA

Artículos:

Enrique Fernández Cara. (cara@us.es).

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y An. Numérico. Fac. de Matemáticas. Univ. de Sevilla. Tarfia, s/n. 41012 Sevilla. Tel: 954 557 992.

Matemáticas e Industria:

Mikel Lezaun Iturralde. (mpleitm@lg.ehu.es).

Dpto. de Matemática Aplicada, Estadística e I. O. Fac. de Ciencias. Univ. del País Vasco. Aptdo. 644. 48080 Bilbao (Vizcaya). Tel: 944 647 700.

Educación Matemática:

Roberto Rodríguez del Río. (rr_delrio@mat.ucm.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Químicas. Univ. Compl. de Madrid. Ciudad Universitaria. 28040 Madrid. Tel: 913 944 102.

Resúmenes de libros:

Fco. Javier Sayas González. (jsayas@posta.unizar.es).

Dpto. de Matemática Aplicada. Centro Politécnico Superior. Universidad de Zaragoza. C/María de Luna, 3. 50015 Zaragoza. Tel: 976 762 148.

Noticias de SĒMA:

Carlos Castro Barbero. (ccastro@caminos.upm.es).

Dpto. de Matemática e Informática. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Univ. Politécnica de Madrid. Av. Aranguren s/n. 28040 Madrid. Tel: 91 336 6664.

Anuncios:

Óscar López Pouso. (oscarlp@usc.es).
Dpto. de Matemática Aplicada. Fac. de Matemáticas. Univ. de Santiago de Compostela. Campus sur, s/n. 15782 Santiago de Compostela *Tel:* 981 563 100, ext. 13228.

Responsables de otras secciones de SĒMA**Gestión de Socios:**

Íñigo Arregui Álvarez. (arregui@udc.es).
Dpto. de Matemáticas. Fac. de Informática. Univ. de A Coruña. Campus de Elviña, s/n. 15071 A Coruña. *Tel:* 981 16 7000-1327.

Página web: www.sema.org.es/:

Carlos Castro Barbero. (ccastro@caminos.upm.es).
Dpto. de Matemática e Informática. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Univ. Politécnica de Madrid. Av. Aranguren s/n. 28040 Madrid. *Tel:* 91 336 6664.

1. Los artículos publicados en este Boletín podrán ser escritos en español o inglés y deberán ser enviados por correo certificado a

Prof. E. FERNÁNDEZ CARA
Presidente del Comité Científico, Boletín SĕMA
Dpto. E.D.A.N., Facultad de Matemáticas
Aptdo. 1160, 41080 SEVILLA

También podrán ser enviados por correo electrónico a la dirección

`boletin.sema@uclm.es`

En ambos casos, el/los autor/es deberán enviar por correo certificado una carta a la dirección precedente mencionando explícitamente que el artículo es sometido a publicación e indicando el nombre y dirección del autor corresponsal. En esta carta, podrán sugerirse nombres de miembros del Comité Científico que, a juicio de los autores, sean especialmente adecuados para juzgar el trabajo.

La decisión final sobre aceptación del trabajo será precedida de un procedimiento de revisión anónima.

2. Las contribuciones serán preferiblemente de una longitud inferior a 24 páginas y se deberán ajustar al formato indicado en los ficheros a tal efecto disponibles en la página web de la Sociedad (<http://www.sema.org.es/>).
3. El contenido de los artículos publicados corresponderá a un área de trabajo preferiblemente conectada a los objetivos propios de la Matemática Aplicada. En los trabajos podrá incluirse información sobre resultados conocidos y/o previamente publicados. Se anima especialmente a los autores a presentar sus propios resultados (y en su caso los de otros investigadores) con estilo y objetivos divulgativos.

Ficha de Inscripción Individual

Sociedad Española de Matemática Aplicada SEMA

Remitir a: SEMA, Despacho 520, Facultad de Matemáticas,
Universidad Complutense. 28040 Madrid.
Fax: 913 944 607. CIF: G-80581911

Datos Personales

Apellidos:
Nombre:
Domicilio:
C.P.: Población:
Teléfono: DNI/CIF:
Fecha de inscripción:

Datos Profesionales

Departamento:
Facultad o Escuela:
Universidad o Institución:
Domicilio:
C.P.: Población:
Teléfono: Fax:
Correo electrónico:
Página web: <http://>
Categoría Profesional:
Líneas de Investigación:
.....

Dirección para la correspondencia: Profesional Personal

Cuota anual para el año 2005

- Socio ordinario: 30 EUR. Socio de reciprocidad con la RSME: 12 EUR.
 Socio estudiante: 15 EUR. Socio extranjero: 25 EUR.

Datos bancarios

...de de 200..

Muy Sres. Míos:

Ruego a Uds. que los recibos que emitan a mi cargo en concepto de cuotas de inscripción y posteriores cuotas anuales de SēMA (Sociedad Española de Matemática Aplicada) sean pasados al cobro en la cuenta cuyos datos figuran a continuación

Entidad (4 dígitos)	Oficina (4 dígitos)	D.C. (2 dígitos)	Número de cuenta (10 dígitos)

Entidad bancaria:

Domicilio:

C.P.: Población:

Con esta fecha, doy instrucciones a dicha entidad bancaria para que obren en consecuencia.

Atentamente,

Fdo.

Para remitir a la entidad bancaria

...de de 200..

Muy Sres. Míos:

Ruego a Uds. que los recibos que emitan a mi cargo en concepto de cuotas de inscripción y posteriores cuotas anuales de SēMA (Sociedad Española de Matemática Aplicada) sean cargados a mi cuenta corriente/libreta en esa Agencia Urbana y transferidas a

SEMA: 0128 - 0380 - 03 - 0100034244
Bankinter
C/ Hernán Cortés, 63
39003 Santander

Atentamente,

Fdo.

Ficha de Inscripción Institucional

Sociedad Española de Matemática Aplicada SEMA

Remitir a: SEMA, Despacho 520, Facultad de Matemáticas,
Universidad Complutense. 28040 Madrid.
Fax: 913 944 607. CIF: G-80581911

Datos de la Institución

Departamento:

Facultad o Escuela:

Universidad o Institución:

Domicilio:

C.P.: Población:

Teléfono: DNI/CIF:

Correo electrónico:

Página web: <http://>

Fecha de inscripción:

Forma de pago

La cuota anual para el año 2005 como Socio Institucional es de 150 EUR.
El pago se realiza mediante transferencia bancaria a

SEMA: 0128 - 0380 - 03 - 0100034244
Bankinter
C/ Hernán Cortés, 63
39003 Santander