

3
2ej-

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

METODO EULERIANO-LAGRANGIANO DE ADJUNTO LOCALIZADO PARA
LA ECUACION DE TRANSPORTE DOMINADA POR ADVECCION

TESIS QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

MATEMATICO

PRESENTA

EDGARDO BARON RUIZ

MEXICO D.F., OCTUBRE DE 1992

FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

3
2ej-

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

METODO EULERIANO-LAGRANGIANO DE ADJUNTO LOCALIZADO PARA
LA ECUACION DE TRANSPORTE DOMINADA POR ADVECCION

TESIS QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

MATEMATICO

PRESENTA

EDGARDO BARON RUIZ

MEXICO D.F., OCTUBRE DE 1992

FALLA DE ORIGEN

TESIS

METODO EULERIANO-LAGRANGIANO DE ADJUNTO LOCALIZADO PARA LA ECUACION DE TRANSPORTE DOMINADA POR ADVECCION

INDICE

- 1.- Introducción. (Pag. 1)
- 2.- Ecuación de Transporte con Advección y Difusión. (Pag. 5)
 - a) Cinemática.
 - b) Movimiento.
 - c) Propiedades intensivas y extensivas.
 - d) Relaciones entre las propiedades intensivas y extensivas.
 - e) Ley general de balance.
 - f) Ecuación de transporte de masa con difusión.
- 3.- Ecuaciones Diferenciales Parciales y (Pag. 16)
Características.
 - a) Ecuaciones diferenciales parciales.
 - b) Características.
 - c) Ecuación de Transporte.
- 4.- Ecuación de Transporte con Difusión y (Pag. 22)
Características.
 - a) Ecuación de Transporte con difusión.
 - b) Perturbación a la ecuación de transporte puro.
 - c) Ecuación de Difusión.

5.- Método de las Características.	(Pag. 27)
a) Planteamiento del problema.	
b) Descripción del método de características.	
c) Método de características con coeficientes variables.	
d) Observaciones al método.	
e) Otros métodos de características.	
6.- Método del Adjunto Localizado.	(Pag. 35)
(LAM)	
a) Teoría algebraica.	
b) Método del Adjunto Localizado (LAM).	
7.- Método Euleriano-Lagrangiano de Adjunto Localizado.	(Pag. 43)
(ELLAM)	
a) Ecuación de Transporte.	
b) ELLAM.	
c) Implementación de condiciones de frontera.	
d) Conservación de masa.	
8.- Conclusiones.	(Pag. 61)
Referencias.	(Pag. 64)
Apéndice A. (Herramientas Matemáticas)	(Pag. 70)
Apéndice B. (Desarrollos Matemáticos para Características)	(Pag. 75)
Apéndice C. (Desarrollos Matemáticos para ELLAM)	(Pag. 81)
Figuras.	(Pag. 86)

CAPITULO 1

INTRODUCCION

INTRODUCCION

La Ecuación de Transporte con Advección-Difusión modela importantes procesos físicos en ciencias e ingeniería. Algunos de estos son los modelos que describen el transporte de fluidos no miscibles, importantes en la industria del petróleo, o el comportamiento del transporte de contaminantes en acuíferos, relevante en el área de aguas subterráneas, por ejemplo.

Esta clase de modelos requieren de una solución numérica práctica y satisfactoria en cuanto a tiempo y exactitud.

Una de las dificultades que presentan las soluciones numéricas de dicha ecuación, es cuando la parte advectiva de la ecuación domina a la parte difusiva de la misma. Cuando esto sucede la mayoría de los métodos numéricos no dan soluciones satisfactorias, ya que estas presentan mucha difusión numérica.

Estas son algunas de las razones por las cuales este trabajo de tesis trata algunos de los métodos numéricos propuestos recientemente para la solución de la Ecuación de Transporte Dominada por Advección y que resuelven en gran medida el problema mencionado anteriormente.

Los métodos numéricos de solución para la Ecuación de Transporte derivan de tres aproximaciones principales: Los Métodos basados en aproximaciones Eulerianas, los fundamentados en aproximaciones Eulerianas-Lagrangianas y los que se basan en aproximaciones Lagrangianas.

Dentro de los métodos numéricos basados en aproximaciones Eulerianas-Lagrangianas están los métodos de características que son relativamente recientes (desarrollados a principios de los 80's en [8,9,10]) y que presentan menos difusión numérica que los métodos basados en aproximaciones Eulerianas.

Los métodos de características incluyen a muchas técnicas de aproximación llamadas de diferentes formas, como: Métodos Eulerianos-Lagrangianos (ELM) [2], Método de Transporte Difusivo, Método de Características (MOC) [7], Método Modificado de Características (MMOC) [8,10] y Métodos de Separación de Operadores [9], todos ellos tienen en común el tratar a la componente advectiva con un algoritmo a lo largo de las curvas características, mientras el paso difusivo es tratado separadamente usando una aproximación espacial (una aproximación Euleriana).

El objetivo principal de esta tesis es situar al Método Euleriano-Lagrangiano de Adjunto Localizado al que nos referiremos como ELLAM, dentro del contexto de los métodos de características. El método ELLAM es una aplicación del Método de Adjunto Localizado, el cual a su vez se basa en la Teoría Algebraica de Valores en la Frontera de Herrera, es muy reciente, y fué presentado por primera vez por el grupo ELLAM (Celia, Ewing, Herrera y Russell) en las referencias [6,33].

Además, ELLAM ha mostrado ser una herramienta muy efectiva en el tratamiento numérico del fenómeno de transporte dominado por advección, ya que ELLAM es una generalización de los métodos de características, el cual incorpora de manera consistente y sistemática las condiciones de frontera, permitiendo obtener algoritmos con la propiedad de conservar la masa.

En este trabajo de tesis se han desarrollado cuatro temas principales, el primero de ellos corresponde a la revisión de la Mecánica de los Medios Continuos. La segunda parte concierne a las Ecuaciones Diferenciales Parciales y Características. La penúltima presenta ideas relativas al Método de Adjunto Localizado (LAM). Finalmente, la última parte se refiere a la aplicación de este método a la ecuación de transporte con difusión, que ha producido el método ELLAM.

Para la primera parte el propósito es hacer una derivación matemática de la Ecuación de Transporte en forma sencilla y general. Para

esto en el capítulo 2 se lleva a cabo una revisión de la Mecánica de los Medios Continuos, y con base en ella se deriva la Ecuación de Transporte con Advección-Difusión y se generalizan algunos resultados para su aplicación a campos discontinuos [1, 29].

En la parte relativa a las Ecuaciones Diferenciales Parciales y Características [11, 12, 35, 34], el propósito central es el de explicar la naturaleza de las curvas características y exponer un método numérico sencillo basado en las curvas características para la solución de la Ecuación de Transporte. Así en los capítulos 3, 4 y 5 se revisan los fundamentos de Ecuaciones Diferenciales Parciales, se definen lo que son las Curvas Características y se justifica su uso para encontrar una solución numérica a la Ecuación de Transporte dominada por advección. En esta misma parte se presenta un método numérico para la solución de la Ecuación de Transporte basado en sus curvas características [36, 38, 40, 41].

En el capítulo 6 se presenta el Método de Adjunto Localizado que fué desarrollado por Herrera y colaboradores, en una serie de artículos [3, 4, 5, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 31, 32, 34] y se basa en la "Teoría de Problemas con Valores en la frontera" del mismo autor.

Esta teoría proporciona las bases del Método de Adjunto Localizado al que nos referiremos como LAM (Localized Adjoint Method), que es una nueva metodología para la discretización de las Ecuaciones Diferenciales Parciales (ver por ejemplo [18]). Por último en el capítulo 7 se presenta el método ELLAM que se obtiene como resultado de aplicar LAM a problemas advectivos-difusivos dependientes del tiempo, combinado con el Método de Características y que fué introducido por el grupo ELLAM [6,33].

De paso, existe también el propósito de que esta tesis sirva como una lectura introductoria a los estudiantes que se interesen en la modelación matemática y en particular en el fenómeno de transporte y la metodología ELLAM.

CAPITULO 2

ECUACION DE TRANSPORTE CON ADVECCION Y DIFUSION

La Ecuación de Transporte modela diversos fenómenos físicos de gran importancia práctica, el objetivo de este capítulo es hacer una derivación matemática de esta ecuación. En forma sencilla y general, la Mecánica de los Medios Continuos proporciona el marco de referencia a partir de las distintas leyes de balance, en particular la ley de balance de masa, que hace posible una exposición de este tipo.

El interés manifestado anteriormente nos lleva a revisar primero la Teoría de la Mecánica de los Medios Continuos para posteriormente plantear la obtención de la Ecuación de Transporte con Advección y Difusión [1, 29].

CINEMATICA

El propósito de la cinemática es la descripción del movimiento de un cuerpo en el espacio Euclidiano n -dimensional (con $n = 1, 2, 3, \dots$ dependiendo en que espacio se considere el movimiento del cuerpo). En general consideraremos un cuerpo β constituido de puntos materiales, que estarán etiquetados con X y a los que les corresponderá un punto \underline{x} en el espacio Euclidiano n -dimensional en el tiempo t . También consideraremos que la colección de puntos materiales de β toman la forma de una región conexa en el espacio n -dimensional. Es conveniente que a los puntos materiales X del cuerpo β los identifiquemos con los puntos coordinados \underline{X} llamados coordenadas materiales, estos son tomados de alguna configuración de referencia de β .

La notación que se usará en este trabajo de tesis para designar a los elementos vectoriales será mediante la letra subrayada que identifica al elemento vectorial, por ejemplo: $\underline{\alpha} \in \mathbb{R}^n$ donde $\underline{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ y $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ son escalares.

MOVIMIENTO

Ahora especificaremos la manera como los puntos materiales pueden moverse en el espacio, y postularemos que la materia es indestructible e impenetrable. Matemáticamente estos postulados implican la existencia de una correspondencia uno-a-uno entre los puntos materiales X del cuerpo β , identificados por sus coordenadas materiales \underline{X} , y los puntos espaciales \underline{x} que ocupan en el tiempo t , esto es

$$\underline{x} = p(\underline{X}, t),$$

donde $p: \beta \rightarrow \mathbb{R}^n$ con $n = 1, 2, \dots$

Requeriremos también que esta función sea continuamente diferenciable y que el determinante, es decir la matriz Jacobiana, J , nunca se anule, entonces, por el teorema de la función inversa, existe la función

$$p^{-1} \text{ tal que } p^{-1}(\underline{x}, t) = \underline{X}.$$

La función $p(\underline{x}, t)$ es, la posición de la partícula \underline{X} en el tiempo t . Por conveniencia admitiremos que p sea diferenciable tantas veces como lo necesitemos, excepto en un conjunto determinado de puntos singulares el cual requerirá de atención especial.

PROPIEDADES INTENSIVAS Y EXTENSIVAS

Introduciremos dos clases de propiedades de los sistemas macroscópicos que nos interesa estudiar: las intensivas y las extensivas.

Una propiedad intensiva Π , está definida para cada tiempo y para cada partícula (punto material). Además puede ser escalar, como la temperatura, la densidad, etc. o puede ser vectorial como la velocidad; en cambio, las propiedades extensivas son aquellas que dependen del tamaño del sistema, por ejemplo, masa, volumen, cantidad de calor, etc.

Las propiedades intensivas pueden ser descritas de dos maneras diferentes, ya sea en términos Lagrangianos o en términos Eulerianos. Al considerar una propiedad intensiva Π , su descripción Lagrangiana será dada por una función $\phi(\underline{X}, t)$, la cual indicará el valor de la propiedad Π en la partícula \underline{X} en el tiempo t ; de la misma forma, sea \underline{x} un punto en el espacio y sea $\psi(\underline{x}, t)$ el valor de la propiedad Π en el punto \underline{x} en el tiempo t , entonces la función ψ es la representación Euleriana de Π .

La ecuación que relaciona estas dos representaciones del movimiento es fácilmente deducida y tiene la forma:

$$\phi(\underline{X}, t) = \psi(p(\underline{X}, t), t).$$

Un concepto central en la descripción del movimiento es la velocidad, y como sabemos, la velocidad es obtenida mediante la derivación de la función de posición con respecto al tiempo; entonces tenemos que la descripción Lagrangiana de la velocidad podemos definirla mediante la ecuación

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = p_t(\underline{X}, t).$$

Y si la descripción Euleriana de la velocidad es $\underline{v}(\underline{x}, t)$, ambas velocidades quedan relacionadas por las ecuaciones

$$\underline{V}(\underline{X}, t) = \underline{v}(p(\underline{X}, t), t) \quad \text{o} \quad \underline{v}(\underline{x}, t) = \underline{V}(p^{-1}(\underline{x}, t), t).$$

La derivada Lagrangiana de una propiedad intensiva Π es también llamada derivada material y queda definida por $\phi_t(\underline{X}, t)$ y la Euleriana por $\psi_t(\underline{x}, t)$, como es de suponer, la derivada material se obtiene manteniendo fija la partícula, mientras que la Euleriana se obtiene manteniendo fijo el punto del espacio.

Al calcular $\phi_t(\underline{X}, t)$ se utiliza la derivada de una función de funciones obteniendo la expresión

$$\phi_t(\underline{X}, t) = \psi_t(p(\underline{X}, t), t) + p_t(\underline{X}, t)[\nabla(\psi(p(\underline{X}, t), t))].$$

Denotaremos por $D\psi/Dt$ la descripción Euleriana de la derivada material, la cual, tomando en cuenta la ecuación anterior, es claro que

$$D\psi/Dt = \psi_t + \underline{v} \cdot \nabla(\psi).$$

RELACIONES ENTRE LAS PROPIEDADES EXTENSIVAS E INTENSIVAS

Dada cualquier propiedad intensiva Π podemos definir una propiedad extensiva $E(t)$ por

$$E(t) = \int_{\beta(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.1)$$

donde $\psi(\underline{x}, t)$ es la descripción Euleriana de Π y $\beta(t)$ es la región del espacio físico ocupada por el cuerpo β en el tiempo t . La forma en que se relaciona aquí cada propiedad extensiva con su correspondiente propiedad intensiva, no es la estándar. Mas frecuentemente en lugar de la ecuación (2.1), se utiliza la ecuación

$$E(t) = \int_{\beta(t)} \rho(\underline{x}, t) \psi(\underline{x}, t) d\underline{x},$$

donde $\rho(\underline{x}, t)$ es la densidad.

La ecuación (2.1) es la forma en que la introducen Herrera y Allen en la referencia [29] y tiene la ventaja de no presuponer definida una densidad en el modelo. De esta manera, la correspondencia entre las propiedades extensivas e intensivas se vuelve mas sencilla: "la propiedad intensiva que corresponde a una extensiva, es el integrando cuando la primera cuando se expresa como una integral". En terminos más estrictamente matemáticos: " la propiedad intensiva asociada a una propiedad extensiva, es la derivada de medida de ésta última" ya que toda propiedad extensiva por definición, es una medida.

Como un ejemplo, consideremos a la densidad de masa como la propiedad intensiva, entonces se le asocia la masa que es una propiedad extensiva mediante la fórmula

$$M(t) = \int_{\beta(t)} \rho(\underline{x}, t) d\underline{x},$$

aquí $\rho(\underline{x}, t)$ es la descripción Euleriana de la densidad.

Como la rapidez de cambio de las propiedades extensivas es la derivada respecto a t de la propiedad, ésta se puede calcular en forma inmediata aplicando la ecuación (A.5)* a la ecuación (2.1), y obtenemos

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} \psi_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial\beta(t)} \psi(\underline{x}, t) \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x}. \quad (2.2)$$

*.) revisar el apéndice A

Pero, por el Teorema de la Divergencia se tiene

$$\int_{\partial\beta(t)} \psi(\underline{x}, t) \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} \, d\underline{x} = \int_{\beta(t)} \nabla \cdot (\psi \underline{v}) \, d\underline{x},$$

de aquí, que al sustituir en (2.2) obtengamos

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} (\psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v})) \, d\underline{x}. \quad (2.3)$$

Al desarrollar $\nabla \cdot (\psi \underline{v}) = \underline{v} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \underline{v}$, obtenemos

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} (\psi_t + \underline{v} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \underline{v}) \, d\underline{x},$$

como $D\psi/Dt = \psi_t + \underline{v} \cdot \nabla \psi$ resulta que

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} (D\psi/Dt + \psi \nabla \cdot \underline{v}) \, d\underline{x}. \quad (2.4)$$

Las ecuaciones (2.3) y (2.4) suponen que la representación Euleriana ψ y su derivada son continuas.

Hay aplicaciones muy importantes como en la teoría de ondas de choque en las cuales las representaciones Lagrangianas y Eulerianas de algunas propiedades intensivas pueden ser discontinuas, por esto es importante derivar relaciones que puedan aplicarse aún cuando estas funciones y sus derivadas sean discontinuas.

Para esto considere un cuerpo β que ocupa la región $B(t)$ en el tiempo t , suponga que $\psi(\underline{x}, t)$ puede tener discontinuidades en una superficie $\Sigma(t)$, en el interior de $\beta(t)$. Entonces $\beta(t)$ esta dividida en dos subregiones: $\beta_+(t)$ y $\beta_-(t)$, de tal manera, que las fronteras $\partial\beta_+(t)$ y $\partial\beta_-(t)$ contengan a la superficie Σ y al aplicar la ec. (A.7) en la ec. (2.1) tenemos que

$$E'(t) = \int_{\beta_+(t)} \psi_t(\underline{x}, t) \, d\underline{x} + \int_{\beta_-(t)} \psi(\underline{x}, t) \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\psi] \underline{v}_{\Sigma} \cdot \underline{n} \, d\underline{x}. \quad (2.5)$$

•) revisar el apéndice A

Usando el teorema de la Divergencia separadamente en $\beta(t)$ y $\beta'(t)$ obtenemos

$$\int_{\beta(t)} \nabla \cdot (\psi \underline{v}) \, d\underline{x} = \int_{\partial\beta} \psi \underline{v} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\psi \underline{v}] \cdot \underline{n} \, d\underline{x}.$$

Cabe hacer notar que la velocidad de las partículas \underline{v} puede ser discontinua a través de Σ , entonces la ecuación (2.5) queda

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} (\psi_t(\underline{x}, t) + \nabla \cdot (\psi \underline{v})) \, d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} \, d\underline{x}, \quad (2.6)$$

como $\nabla \cdot (\psi \underline{v}) = \underline{v} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \underline{v}$ y $D\psi/Dt = \psi_t + \underline{v} \cdot \nabla \psi$, la ecuación (2.6) se puede expresar como

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} (D\psi/Dt + \psi \nabla \cdot \underline{v}) \, d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} \, d\underline{x}. \quad (2.7)$$

LEY GENERAL DE BALANCE

Las leyes que gobiernan los sistemas macroscópicos se expresan por medio de balances globales. Su forma general, para una propiedad intensiva Π cuya representación Euleriana es $\psi(\underline{x}, t)$, está dada por

$$E'(t) = \frac{d}{dt} \int_{\beta(t)} \psi \, d\underline{x} = \int_{\partial\beta(t)} \underline{\tau} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} + \int_{\beta(t)} g \, d\underline{x}, \quad (2.8)$$

donde, $E(t)$ es la propiedad extensiva asociada a Π .

Cuando ψ es una función escalar, $\underline{\tau}$ es una función vectorial y g es una función escalar, y cuando ψ es un vector, $\underline{\tau}$ es una matriz y g es un vector.

La ecuación (2.8) es una ley de balance, cuando se cumple en todo cuerpo β . A la función τ se le llama el flujo de ψ a través de la superficie del cuerpo y a la función g se le denomina el suministro desde el exterior de ψ . Como

$$E'(t) = \int_{\beta(t)} (\psi_t(\underline{x}, t) + \nabla \cdot (\psi \underline{v})) \, d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} \, d\underline{x},$$

por la ecuación (2.6), y al compararla con la ecuación (2.8) obtenemos

$$\int_{\beta(t)} (\psi_t(\underline{x}, t) + \nabla \cdot (\psi \underline{v})) d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} d\underline{x} = \int_{\partial\beta(t)} \tau \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\beta(t)} g d\underline{x},$$

igualando a cero se tiene que

$$\int_{\beta(t)} (\psi_t(\underline{x}, t) + \nabla \cdot (\psi \underline{v})) d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma})] \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\partial\beta(t)} \tau \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\beta(t)} g d\underline{x} = 0.$$

Aplicando la versión generalizada del teorema de la Divergencia

$$\int_{\beta(t)} \{ \psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) - \nabla \cdot \tau - g \} d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma}) - \tau] \cdot \underline{n} d\underline{x} = 0,$$

de donde

$$\int_{\beta(t)} \{ \psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) - \nabla \cdot \tau - g \} d\underline{x} = 0,$$

$$\int_{\Sigma} [\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma}) - \tau] \cdot \underline{n} d\underline{x} = 0.$$

Utilizando ahora el Lema de Dubois-Reymond obtenemos que

$$\psi_t + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) - \nabla \cdot \tau - g = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.9)$$

$$[\psi(\underline{v} - \underline{v}_{\Sigma}) - \tau] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma. \quad (2.10)$$

Observando que $D\psi/Dt = \psi_t + \underline{v} \cdot \nabla(\psi)$, obtenemos una forma alternativa para la ecuación (2.9), la cual utiliza la derivada Lagrangiana

$$D\psi/Dt + \psi \nabla \cdot \underline{v} - \nabla \cdot \tau - g = 0 \quad \text{en } \beta(t). \quad (2.11)$$

Las ecuaciones (2.9) y (2.10) son muy importantes en desarrollos posteriores, sobre todo en la obtención de la ecuación del transporte, estas ecuaciones son llamadas la forma diferencial o local de la "ley general de balance" y la "condición general de salto", respectivamente.

ECUACION DE TRANSPORTE DE MASA CON DIFUSION

Son cuatro leyes de balance en las cuales descansa una gran parte de la Mecánica de los Medios Continuos, estas son:

- 1) De masa;
- 2) De momento;
- 3) De momento angular;
- 4) De energía.

Para desarrollos subsecuentes la ley de balance de masa será de gran importancia, ya que de ésta ley de balance se obtiene la ecuación de transporte.

La masa de un cuerpo está dada por

$$M(t) = \int_{\beta(t)} \rho(\underline{x}, t) \, d\underline{x},$$

donde ρ es la densidad de masa.

Al obtener

$$M'(t) = \int_{\beta(t)} g(\underline{x}, t) \, d\underline{x} + \int_{\partial\beta(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n},$$

se tiene el cambio de masa de un cuerpo, donde $\underline{\tau} \cdot \underline{n}$ representa el flujo, si lo hay, de masa por la frontera.

Es claro por las ecuaciones (2.9) y (2.10) que

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{\tau} - g = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.12)$$

$$[\rho(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma, \quad (2.13)$$

donde $\underline{\tau}$ es el flujo de masa a través de la frontera y g es la generación de masa por unidad de volúmen.

Hay un caso que tiene interés especial, cuando $\underline{\tau} = \underline{0}$ y $g = 0$, si esto sucede se dice que hay conservación de masa y las ecuaciones (2.12) y (2.13) se reducen a

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.15)$$

$$[\rho(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma. \quad (2.16)$$

A la ecuación (2.15) se le conoce como la ecuación de continuidad, de manera alternativa podemos expresarla como

$$D\rho/Dt + \rho \nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.17)$$

ya que $D\rho/Dt = \rho_t + \underline{v} \cdot \nabla \rho$.

En el caso de transporte de masa con difusión se tiene que la difusión molecular o la asociada al movimiento aleatorio de las partículas, está dada por la ley de Fick, la cual establece que $\tau = \underline{K} \cdot \nabla(\rho)$, donde \underline{K} es la matriz de difusión.

Así, al sustituir $\tau = \underline{K} \cdot \nabla(\rho)$ en las ecuaciones (2.12) y (2.13) obtenemos

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) - \nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla(\rho)) - g = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.18)$$

$$[\rho(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{K} \cdot \nabla(\rho)] \cdot \underline{n} = \quad \text{en } \Sigma, \quad (2.19)$$

donde la ecuación (2.18) es llamada la ecuación de transporte con advección y difusión, ya que el término advectivo es $\nabla \cdot (\rho \underline{v})$, el término de difusión es $\nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla(\rho))$ y el término g es el que engloba todas las posibilidades de generación o desintegración de masa las cuales podrían ser:

- 1.- Aportaciones desde el exterior mediante pozos de inyección;
 - 2.- Desintegración radioactiva en el caso en que el soluto sea radioactivo;
 - 3.- Reacciones químicas tales como oxidación, reducción, formación de complejos, etc;
 - 4.- Procesos de absorción (retención) del soluto en el terreno.
- y la ecuación (2.19) es su condición general de salto.

En el caso de fluidos contenidos en medios porosos, la masa esta dada por

$$M(t) = \int_{\beta(t)} \epsilon(\underline{x}, t) \rho(\underline{x}, t) d\underline{x}, \quad (2.20)$$

donde ϵ es la porosidad y ρ la densidad del fluido, de ésta manera el

balance global de masa en su forma diferencial y la condición general de salto están dadas por las siguientes ecuaciones

$$(\epsilon\rho)_t + \nabla \cdot (\epsilon\rho \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{\tau} - g = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.21a)$$

$$[\epsilon\rho(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma. \quad (2.22a)$$

Y en el caso de conservación de masa estas ecuaciones se transforman en

$$(\epsilon\rho)_t + \nabla \cdot (\epsilon\rho \underline{v}) = 0 \quad \text{en } \beta(t), \quad (2.21b)$$

$$[\epsilon\rho(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)] \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma. \quad (2.22b)$$

Aquí el producto $\epsilon \underline{v}$ es llamado velocidad de Darcy, en las ecuaciones (2.21) y (2.22). La porosidad puede ser eliminada cuando ésta no depende en forma importante de la posición. La eliminación de la porosidad de las ecuaciones (2.21) y (2.22) nos lleva a tener ecuaciones análogas a las ecuaciones (2.12) y (2.13).

CAPITULO 3

ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES Y CARACTERISTICAS

Muchos fenómenos físicos son asociados a una ecuación diferencial, ya sea ordinaria o parcial. En particular, en este capítulo nos interesa la ecuación diferencial parcial asociada al fenómeno de transporte de masa sin difusión, con el fin de obtener sus curvas características.

Para esto será necesario hacer una revisión general de la teoría de las ecuaciones diferenciales parciales basada en las referencias [11,12,35,39], para después poder definir y obtener las curvas características de la Ecuación de Transporte en una dimensión espacial.

ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Las ecuaciones diferenciales parciales surgen en Geometría y Física cuando el número de variables independientes del problema en discusión es mayor que uno, en este caso, las variables dependientes del problema son probablemente funciones de más de una variable independiente, entonces las variables dependientes tendrán derivadas parciales con respecto a más de una variable. Cuando el problema es de naturaleza física, al aplicar las leyes de la Física, obtenemos algunas veces relaciones entre sus derivadas y tal relación diremos que es una ecuación diferencial parcial.

Consideremos una ecuación diferencial parcial en la cual las variables independientes son denotadas por x, y, z, \dots y las variables dependientes por u, v, w, \dots , así, la forma funcional es:

$$u = u(x, y, z), \quad (3.1)$$

en este caso particular hemos designado a u como función de las variables independientes x, y y z , y las derivadas parciales con la forma

$$u_x = \frac{\partial u}{\partial x}, u_y = \frac{\partial u}{\partial y}, u_{xy} = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}. \quad (3.2)$$

Empleando las formas (3.1) y (3.2) podemos representar a una ecuación diferencial parcial en la forma general

$$F(x, y, z, u, u_x, u_y, u_z, u_{xx}, u_{yy}, u_{zz}, u_{xy}, \dots) = 0, \quad (3.3)$$

donde F es una función que indica cómo y en que forma aparecen las derivadas parciales existentes.

El orden de una ecuación diferencial parcial está definido por el orden de la derivada más alta presente en la ecuación.

En la búsqueda de la solución de las ecuaciones diferenciales parciales la propiedad de linealidad tiene un papel importante.

Consideremos la ecuación diferencial parcial de segundo orden

$$A \frac{\partial u}{\partial t} - B \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + C \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (3.4)$$

aquí la variable dependiente es u que depende de las variables independientes (x, t) .

La linealidad de esta ecuación está establecida por la forma funcional de los coeficientes A , B y C . Si los coeficientes son constantes o funciones de las variables independientes (x, t) únicamente, la ecuación es lineal. Si los coeficientes, además, son funciones de la variable dependiente u y sus primeras derivadas, la ecuación es casi-lineal. Si los coeficientes son funciones de sus segundas derivadas, la ecuación es no lineal.

En general, cuando los coeficientes de una ecuación diferencial parcial de n -ésimo orden son funciones de las derivadas de n -ésimo orden, la ecuación es no lineal y cuando son funciones de las derivadas de m -ésimo orden, con $m < n$, la ecuación es casi-lineal.

Estas características de las ecuaciones son importantes ya que muchas propiedades analíticas de las ecuaciones diferenciales parciales lineales y casi-lineales son conocidas. Como regla general cada ecuación diferencial parcial no lineal debe ser considerada individualmente.

La solución de una ecuación diferencial parcial la cual puede escribirse para el ejemplo (3.4) como $u(x, t)$, denota una función que cuando es sustituida en la ecuación, genera una identidad.

Cuando uno discute la solución de una ecuación diferencial parcial es necesario considerar condiciones iniciales apropiadas y condiciones de frontera.

CARACTERISTICAS

Las ecuaciones diferenciales parciales de primer orden casi-lineales con una variable dependiente y dos variables independientes de la forma

$$a(x, t, u)u_x + b(x, t, u)u_t = c(x, t, u), \quad (3.5)$$

o bien:

$$a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial t} = c, \quad (3.5')$$

donde los coeficientes a, b y c no son necesariamente funciones analíticas de sus argumentos, son el caso general de la ecuación de transporte sin difusión en una dimensión espacial. Llamaremos a la ecuación (3.5) lineal cuando c sea lineal en u y cuando a y b no dependan de u .

Sabemos que de una función solución $u = u(x, t)$, de la ecuación diferencial (3.5), su derivada total está expresada por

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial t} dt, \quad (3.6)$$

y que en un punto (x, t, u) de tal superficie solución, el vector $(u_x, u_t, -1)$ tiene dirección normal a la superficie solución.

La ecuación (3.5), establece que el producto escalar entre los vectores $(u_x, u_t, -1)$ y (a, b, c) es cero, de esta manera el vector (a, b, c) es perpendicular a la normal y está en el plano tangente de la superficie $u = u(x, t)$. Podemos por esto, interpretar a la ecuación diferencial parcial (3.5) geoméricamente como un requisito para que cualquier solución $u = u(x, t)$ a través del punto con coordenadas (x, t, u) deba ser tangente en ese punto, al vector prescrito (a, b, c) .

En una superficie específica $u = u(x, t)$ solución de (3.5), podemos considerar el campo de direcciones definido por los vectores tangenciales (a, b, c) . Este campo de direcciones se compone de las tangentes de una familia uniparamétrica de curvas en esa superficie llamadas

características, la cuales son determinadas por el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{dx}{a} = \frac{dt}{b} = \frac{du}{c}, \quad (3.7)$$

el cual puede ser resuelto mediante integración directa.

Las ecuaciones diferenciales (3.7) establecen que el incremento (dx, dt, du) es paralelo al vector (a, b, c) y está en el plano tangente de la superficie $u = u(x, t)$, la cual debe estar generada por una familia uniparamétrica de soluciones de (3.7).

Aun más, cualquier familia uniparamétrica de soluciones del par de ecuaciones diferenciales ordinarias (3.7), cae fuera de una superficie cuya ecuación $u = u(x, t)$ debe resolver (3.6), puesto que una superficie así generada necesariamente tiene a cada uno de sus puntos (x, t, u) un plano tangente que contiene el correspondiente vector (a, b, c) .

A continuación mostraremos la obtención de la ecuación (3.7) basada en la referencia [2], con el objetivo de encontrar una ecuación diferencial para las curvas características.

De la ecuación (3.5') podemos despejar a $\partial u / \partial x$, así:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{c - (b \partial u / \partial t)}{a},$$

substituyendo en (3.6):

$$du = \frac{c - (b \partial u / \partial t)}{a} dx + \frac{\partial u}{\partial t} dt,$$

multiplicando por a :

$$- a du + (c - b \partial u / \partial t) dx + a \frac{\partial u}{\partial t} dt = 0,$$

desarrollando el segundo término y agrupando términos:

$$(c dx - a du) + (a dt - b dx) \frac{\partial u}{\partial t} = 0.$$

Esta ecuación es independiente de $\partial u / \partial x$, para que sea independiente de $\partial u / \partial t$ tenemos que:

$$a dt - b dx = 0, \quad (3.8)$$

y substituyendo en la ecuación anterior, tenemos que:

$$c dx - a du = 0. \quad (3.9)$$

La ecuación (3.8) es una ecuación diferencial para las curvas características. La ecuación (3.9) es una ecuación diferencial para los valores solución de la variable dependiente u , sobre las curvas características generadas por la ecuación (3.8).

De esta manera y mediante las ecuaciones (3.8) y (3.9), obtenemos la ecuación (3.7).

$$\frac{dx}{a} = \frac{dt}{b} = \frac{du}{c}.$$

ECUACION DE TRANSPORTE

La obtención de las curvas características de la Ecuación de Transporte sin difusión en una dimensión, es por la ecuación (3.8) sólo un ejercicio de sustitución.

Consideremos la ecuación diferencial parcial lineal de primer orden:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = ru, \quad (3.10)$$

siendo esta, la Ecuación de Transporte sin difusión.

Al hacer las sustituciones correspondientes, para aplicar la ecuación (3.8) obtenemos:

$$v dt - dx = 0,$$

de donde

$$dx = v dt, \quad (3.11)$$

siendo la ecuación (3.11) la ecuación que deben satisfacer las curvas características de la ecuación (3.10). La forma de las curvas características es obtenida mediante integración directa, así

$$\int dx = v \int dt, \text{ entonces } x = v t + c' \quad \text{o} \quad t = 1/v x + c''$$

donde c' y c'' son constantes.

CAPITULO 4

ECUACION DE TRANSPORTE CON DIFUSION Y CARACTERISTICAS

El fenómeno físico del transporte de masa con difusión es modelado por una ecuación diferencial parcial de segundo orden clasificada como parabólica, la obtención de sus curvas características es relativamente fácil ver referencias [11,12,35,39], sin embargo, la utilización de éstas para la solución de dicha ecuación plantea ciertas dificultades, en este capítulo se tratará de dar una revisión de cómo son superadas éstas dificultades.

ECUACION DE TRANSPORTE CON DIFUSION

La ecuación que modela el proceso físico de transporte con difusión en una dimensión espacial es la siguiente

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} - ru = 0, \quad (4.1)$$

en este trabajo de tesis consideraremos a los coeficientes D y v de la ecuación (4.1) constantes, a menos que se especifique otra naturaleza de dichos coeficientes.

La relación de la ecuación (4.1) con la ecuación (2.18) es simple, si sustituimos $\rho = u(x, t)$, $\underline{v} = v$, $\underline{K} = D$ y $g = ru$, en la ecuación (2.18) obtenemos (4.1).

La ecuación característica asociada a una ecuación casi-lineal de segundo orden con dos variables independientes es la siguiente

$$A(dy)^2 - B(dy)(dx) + C(dx)^2 = 0. \quad (4.2a)^*$$

Las curvas características o características asociadas con la ecuación diferencial parcial de segundo orden casi-lineal, son las soluciones de la ecuación diferencial característica asociada.

Así tenemos que las curvas características de la ecuación (4.1) deben satisfacer la siguiente ecuación

$$(dy/dx) = \frac{-B \pm (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A} \quad (4.2b)^*$$

*.- REVISAR EL APENDICE B

Para obtener las curvas características de la ecuación (4.1) basta con hacer las sustituciones correspondientes: $A = -D$; $B = 0$; $C = 0$, Así, obtenemos:

$$(dt/dx) = \frac{-0 \pm (0^2 + 4DD)^{1/2}}{-2D} = 0,$$

como $(B^2 - 4AC) = 0$, la ecuación (4.1) es clasificada como parabólica.

Así

$$(dt/dx) = 0, \text{ entonces, } dt = 0,$$

por lo tanto: $t = \text{constante}$.

Como podemos observar, las curvas características de la Ecuación de Transporte con difusión, en el plano (x, t) resultan ser rectas paralelas al eje de la coordenada espacial con la forma $t = \text{constante}$, estas características para nosotros no tienen ninguna utilidad ya que podría decirse que no se 'desplazan' en el tiempo.

PERTURBACION A LA ECUACION DE TRANSPORTE PURO

La ecuación (3.10)** modela el fenómeno físico de transporte puro, al sumar a la ecuación (3.10) un término de difusión de segundo orden, es decir

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} + \left(-\epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = ru, \quad (4.3)$$

no importa que pequeña sea ϵ , siempre que $\epsilon > 0$ la ecuación (4.3) modela un proceso advectivo-difusivo. El hecho de sumarle a la ecuación (3.10) el término $-\epsilon \partial^2 u / \partial x^2$ implica un cambio formal de orden pero también tiene un cambio cualitativo en sus propiedades matemáticas. Esta perturbación a la ecuación (3.10) es llamada una perturbación singular.

Si el cociente ϵ/v es muy pequeño, se dice que la ecuación es dominada por advección, en efecto, si el término $-\epsilon \partial^2 u / \partial x^2$ es muy pequeño, el fenómeno físico que modela la ecuación (3.10) es casi el mismo que el de la ecuación (4.3).

Esto sugiere que las curvas características asociadas a la ecuación (3.10) nos podrían servir para transformar la ecuación diferencial parcial (4.1) en otra ecuación diferencial de solución quizás mas simple, cuando el término $-D \partial^2 u / \partial x^2$ es muy pequeño.

*.- REVISAR EL APENDICE B, **.- ECUACION DEL CAPITULO 3

ECUACION DE DIFUSION

A continuación desarrollaremos una parametrización de la ecuación (4.1) basada en las curvas características de la ecuación (3.10) [7,8,10].

Por el capítulo 3 sabemos que las curvas características de la ecuación (3.10) tienen la forma

$$\int dx = v \int dt, \text{ entonces } x = v t + c',$$

donde c' es una constante.

Para la parametrización deseada consideremos una función $u(\zeta, \tau)$ tal que $\zeta = x - vt$ y $\tau = t$, calculando:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial \tau} \frac{d\tau}{dt}$$

tenemos que

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \frac{dx}{dt} - v \frac{dt}{dt} = -v \quad \text{y} \quad \frac{d\tau}{dt} = 1,$$

por lo tanto

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{\partial u}{\partial \tau}, \quad (4.4a)$$

calculando ahora

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \tau} \frac{d\tau}{dx}$$

tenemos que

$$\frac{\partial \zeta}{\partial x} = 1 \quad \text{y} \quad \frac{\partial \tau}{\partial x} = 0,$$

por lo tanto

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial \zeta}, \quad (4.4b)$$

así

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2}. \quad (4.4c)$$

Al substituir los términos (4.4a, b, c) en la ecuación (4.1)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} - ru = 0,$$

obtenemos

$$\begin{aligned} & \left(-v \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{\partial u}{\partial \tau} \right) - D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} \right) + v \left(\frac{\partial u}{\partial \zeta} \right) = ru, \\ & -v \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \frac{\partial u}{\partial \tau} - D \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} + v \frac{\partial u}{\partial \zeta} = ru, \\ & \frac{\partial u}{\partial \tau} - D \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} = ru, \end{aligned} \tag{4.5a}$$

así, si $ru = 0$ obtenemos que

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2}. \tag{4.5b}$$

Como hemos visto, la ecuación (4.1) mediante la parametrización anterior es transformada en la ecuación (4.5), conocida como la ecuación de difusión o difusión del calor ver referencias [1, 11, 38], la cual es mucho mas sencilla de resolver que la ecuación original.

Hay que notar que la transformación de la ecuación (4.1) es hecha mediante la parametrización a lo largo de las curvas características de la ecuación (3.10) y es independiente del tamaño del término $D\partial^2 u/\partial x^2$.

CAPITULO 5

METODO DE CARACTERISTICAS

Muchos métodos numéricos de solución de la Ecuación de Transporte con advección-difusión están basados en las curvas características, estos métodos pueden ser identificados por nombres como: Método de Características [7], Método Euleriano-Lagrangiano [2] o Método de Separación de Operadores [9], entre otros, todos ellos para la solución de la Ecuación de Transporte. En este capítulo el desarrollo de el Método de Características será llevado a cabo mediante una técnica de diferencias finitas [1, 2, 36, 38, 40, 41].

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Consideremos el siguiente problema de valor inicial para la Ecuación de Transporte dominada por advección en una dimensión espacial.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} x \in \Omega_x &= [0, 1], \\ t \in \Omega_t &= [t^n, t^{n+1}] \\ (x, t) \in \Omega &= \Omega_x \times \Omega_t, \end{aligned}$$

sujeta las a condiciones iniciales

$$u(x, t^n) = u^n(x),$$

con condiciones de frontera adecuadas en 0 y 1

Como sea visto, las ecuaciones de transporte puro y la ecuación de transporte con difusión modelan casi el mismo fenómeno físico cuando el término $D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ en la ecuación (5.1) es muy pequeño, es decir, la ecuación (5.1) es dominada por advección, en este caso las curvas características de la ecuación de transporte puro pueden ser útiles para obtener una solución numérica de la ecuación (5.1).

DESCRIPCION DEL METODO DE CARACTERISTICAS

El método de aproximación de la solución de la ecuación (5.1) utilizando las características de la Ecuación de Transporte es llamado Método de Características.

Como se ha visto, mediante una parametrización a lo largo de las curvas características de la ecuación de transporte puro [7,8], la ecuación (5.1) es transformada en la ecuación de difusión

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2}, \quad (4.5b)^*$$

De esta manera podemos replantear el problema inicial como

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2}, \quad (5.2)$$

con

$$\begin{aligned} \zeta &\in \Omega_\zeta = [0', 1'], \\ \tau &\in \Omega_\tau = [\tau^n, \tau^{n+1}], \\ (\zeta, \tau) &\in \Omega_\zeta \times \Omega_\tau, \end{aligned}$$

sujeta las condiciones iniciales

$$u(\zeta, \tau^n) = u^n(\zeta),$$

y condiciones de frantera adecuadas en $0'$ y $1'$.

La discretización de la ecuación (5.2) puede ser hecha mediante técnicas de elemento finito o de diferencias finitas en particular en este trabajo de tesis y con el fin de ilustrar el método, se utiliza un esquema totalmente implícito de diferencias finitas [1,36,40,41].

Así, $\Omega_\zeta = [0', 1']$ lo discretizamos con una partición uniforme de E puntos, tal que, $\zeta_1 = 0'$, $\zeta_E = 1'$ y $\zeta_i - \zeta_{i-1} = h$, para $i=1, \dots, E$. en $\Omega_\tau = [\tau^n, \tau^{n+1}]$ para $n = 0, 1, 2, \dots$, consideraremos intervalos de tiempo iguales, es decir, $\tau^{n+1} - \tau^n = k$, e introduciendo la notación

$$u(\zeta_1, \tau^n) = u_1^n, \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} u(\zeta_1, \tau^n) \right) = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} \right)_1^n \quad y$$

$$\left(\frac{\partial u(\zeta_1, \tau^n)}{\partial \tau} \right) = \left(\frac{\partial u}{\partial \tau} \right)_1^n.$$

Utilizando un esquema totalmente implícito de diferencias finitas tenemos que:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} \right)_1^{n+1} = \frac{u_{1+1}^{n+1} - 2u_1^{n+1} + u_{1-1}^{n+1}}{h^2}, \quad (5.3)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \tau} \right)_1^{n+1} = \frac{u_1^{n+1} - u_1^n}{k}. \quad (5.4)$$

*.- ECUACION DEL CAPITULO 4

Al sustituir las ecuaciones (5.3) y (5.4) en en la ecuación (5.2) se obtiene:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k} = (D) \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2},$$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k} - \frac{D}{h^2} (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) = 0,$$

$$u_i^{n+1} - u_i^n = ju_{i+1}^{n+1} - j2u_i^{n+1} + ju_{i-1}^{n+1}, \quad \text{con } j = \frac{k}{h^2} (D)$$

$$u_i^{n+1} - ju_{i+1}^{n+1} + j2u_i^{n+1} - ju_{i-1}^{n+1} = u_i^n,$$

$$(j) (u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} (-2 - [1/j]) + u_{i-1}^{n+1}) = -u_i^n,$$

$$u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} (-2 - [1/j]) + u_{i-1}^{n+1} = -[1/j] u_i^n,$$

Así, la ecuación en diferencias finitas asociada a la ecuación (5.2) es la siguiente:

$$u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} (-2 - \frac{h^2}{kD}) + u_{i-1}^{n+1} = -(\frac{h^2}{kD}) u_i^n. \quad (5.5)$$

Esta ecuación es totalmente implícita y contiene tres valores desconocidos de la variable dependiente u en el tiempo τ^{n+1} . Si este procedimiento lo efectuamos para

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2} \right)_i^{n+1} \quad \text{y} \quad \left(\frac{\partial u}{\partial \tau} \right)_i^{n+1}$$

cuyo índice i va de 2 a $E-1$, el arreglo que obtenemos es un sistema de ecuaciones lineales con $E-2$ incógnitas y $E-2$ ecuaciones que tiene la forma de una matriz tridiagonal, que al ser resuelto, permite conocer los valores de la función u en los puntos ζ_{i+1} , ζ_i , ζ_{i-1} , en el tiempo τ^{n+1} a partir de de los valores de la función u en los puntos ζ_i en el tiempo τ^n .

El sistema de ecuaciones lineales tridiagonal obtenido es fácilmente resuelto por el algoritmo de Thomas [36], con ayuda de una computadora.

Este mismo procedimiento puede ser aplicado para obtener los valores de u_1^{n+2} conociendo de antemano los valores de u_1^{n+1} .

Hay que tomar en cuenta que con el método anterior se encuentra una solución en diferencias finitas para la ecuación (5.2), que no es el problema original.

Como es de suponerse la ecuación (5.2) se transforma en la ecuación (5.1) mediante la parametrización $u(x, t)$ donde $x = \zeta + vt$ y $t = \tau$.

Así, la ecuación en diferencias finitas asociada a la ecuación (5.2), nos permite obtener una aproximación al problema inicial planteado por la ecuación (5.1) con solo hacer el cambio de variable $x_1 = \zeta_1 + vk$ y $t^n = \tau^n$, donde $k = t^{n+1} - t^n$ en la ecuación (5.5), es decir la ecuación

$$u_{i+1}^{n+1} + u_i^{n+1} \left(-2 - \frac{h^2}{kD}\right) + u_{i-1}^{n+1} = -\left(\frac{h^2}{kD}\right) u_i^n \quad (5.6)$$

donde $u_{i+1}^{n+1} = u(x_{i+1}, t^{n+1})$, $u_i^{n+1} = u(x_i, t^{n+1})$, $u_{i-1}^{n+1} = u(x_{i-1}, t^{n+1})$, notese que $u^n = u(x, t^n) = u(\zeta, \tau^n)$, ya que en este punto $k=t^{n+1}-t^n = 0$.

La ecuación (5.6) evaluada en los punto x_i es totalmente implícita e involucra tres valores desconocidos de la variable dependiente u en el tiempo t^{n+1} . Si el el indice i el la ecuación (5.6) va de 2 a E-1, obtenemos un sistema lineal de E-2 ecuaciones con E-2 incognitas de forma tridiagonal, el cual es resuelto como se menciona anteriormente.

Notese que el sistema tridiagonal obtenido de la ecuación (5.6) al variar el indice i , nos proporciona información de una función u en los puntos (x_i, t^{n+1}) , que es solución de el problema original planteado por la ecuación (5.1).

METODO DE CARACTERISTICAS CON COEFICIENTES VARIABLES

El método de características para la ecuación de transporte con coeficientes variables puede verse como una generalización al método expuesto anteriormente, pero que exige mas cuidado, para esto hay que tomar en cuenta las siguientes consideraciones.

El considerar a los coeficientes V y D de la ecuación (5.1) variables, es decir, como funciones de las variables independientes (x, t) implica considerar las curvas características de la ecuación ecuación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + V(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (5.7)$$

donde V es variable.

Para encontrar las curvas características de la ecuación (5.7) se procede de forma similar al capítulo tres, es decir, se parte de la ecuación

$$\frac{dx}{a} = \frac{dt}{b} = \frac{du}{c},$$

donde a, b y c son variables, en el caso particular de la ecuación (5.7), a = V(x, t) y b = 1.

De esta manera las curvas que satisfacen la ecuación diferencial

$$dx = V(x, t) dt$$

son las curvas características de la ecuación (5.7), hay que notar que cuando V es variable las curvas características no son líneas rectas si no curvas.

La obtención de las curvas características de la ecuación (5.7) es importante ya que son necesarias para efectuar la parametrización de la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (5.8)$$

a lo largo de estas curvas. Para transformar a la ecuación (5.8) en una ecuación de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D'(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial \zeta^2}, \quad (5.9)$$

donde el coeficiente D' es variable.

La discretización de la ecuación (5.9) puede ser hecha mediante técnicas de elemento finito o diferencias finitas en particular, mediante un esquema de diferencias finitas adecuado a la naturaleza de el coeficiente D', para así poder tener una solución numérica de la ecuación (5.9) adecuada .

*.- MAS DETALLES VER REFERENCIAS [36, 38, 40, 41]

Al efectuar la parametrización de 'regreso' en la ecuación (5.9) para obtener la solución del problema original, debe tomarse en cuenta nuevamente la naturaleza de D' [41].

OBSERVACIONES AL METODO

Las principales observaciones que tiene el método de características presentado son asímple vista:

a).- Es un método numérico para la solución de la Ecuación de Transporte dominada por advección que obtiene los valores de la variable dependiente u sobre sus curvas características.

b).- Si en la región de interés $\Omega = [0,1] \times [t^n, t^{n+1}]$ el valor de $h = t^{n+1} - t^n$, es lo suficientemente grande puede suceder que al obtener los valores de u_i^{n+1} a partir de u_i^n algunos puntos de u_i^{n+1} salgan de la región Ω , implicando la posibilidad de que el sistema lineal de ecuaciones obtenido para encontrar los valores de la función solución u en el tiempo t^{n+1} , cambie en dimensión y número de incógnitas, con respecto al sistema obtenido en un paso anterior de tiempo.

c).- Entre más pequeño es el intervalo en el tiempo: $h = t^{n+1} - t^n$, se tiene una mejor aproximación a la solución exacta.

d).- Dificultad con las condiciones iniciales y de frontera, por que no es sistemática su implementación al problema.

e).- La malla cambia para cada intervalo de tiempo, es decir, las coordenadas espaciales x_i no permanecen constantes para cada intervalo de tiempo.

f).- La dimensión espacial y la temporal son unidas mediante una curva característica.

OTROS METODOS DE CARACTERISTICAS

Los métodos de características pueden identificarse por nombres como Métodos Euleriano-Lagrangianos (ELM) [2], Método de Características (MOC) [7], Método Modificado de Características (MMOC) [8], Método para Transporte Difusivo y Método de Separación de Operadores [10], Todos ellos agrupados bajo el título de Métodos de Características (MC's).

Todos los Métodos de Características tienen en común el tratar a la componente advectiva con un algoritmo a lo largo de las características, mientras el paso difusivo es tratado separadamente usando una aproximación espacial mas común. Estos métodos tienen la significativa ventaja de que las restricciones impuestas al número de Courant* en los algoritmos Eulerianos son atenuadas por la naturaleza Lagrangiana de el paso advectivo.

De los métodos de características mencionados anteriormente quizás el mas importante sea el Método Modificado de Características, por las ventajas que brinda, propuesto por primera vez por Douglas, J. Jr. y Russell, T. F.** en 1982, el cual combina junto con el método técnicas de elemento finito y diferencias finitas, este método tiene la propiedad de mantener fija la malla, es decir, las componentes espaciales x_i permanecen constantes para todo intervalo de tiempo, esto permite adiferencia del Método de Características, una mayor libertad para el tamaño de el intervalo en el tiempo ($h = t^{n+1} - t^n$).

La modificación hecha al Método de Características para obtener el Método Modificado de Características consiste en que al querer trabajar con una malla fija, se calcula la característica que pasa por el nodo de la red (x_i, t^{n+1}) , quedando como incognita en el tiempo t^n el pie de la caracteística, el cual es interpolado linealmente por los puntos (x_j, t^n) que se encuentren mas cerca de el pie de la caranterística donde los x_j dependen de el número de Courant.

Los Métodos de Características en general sean empleado junto con técnicas de elemento finito como el método de Galerkin para la solución numérica de problemas de transporte con advección difusión, en el desplazamiento de fluidos miscibles y no miscibles en medios porosos (ver referencias [7, 8, 9, 10, 37]).

*.- NUMERO DE COURANT = Vh/k .,

**.- VER REFERENCIA [8]

CAPITULO 6

METODO DEL ADJUNTO LOCALIZADO (LAM)

El método del Adjunto Localizado al que nos referiremos como LAM (Localized Adjoint Method) es una nueva metodología para la discretización de las ecuaciones diferenciales parciales, el LAM está basado en la "Teoría Algebraica de Problemas con Valores en la Frontera" de Herrera.

En este capítulo haremos la formulación general de LAM., para lo cual se tendrá que revisar brevemente parte de la teoría algebraica de Herrera [16, 17].

TEORIA ALGEBRAICA

Consideremos una región Ω y dos espacios de funciones lineales, uno que será \mathcal{D}_1 de funciones que llamaremos funciones de ensayo y otro que será \mathcal{D}_2 de funciones de prueba, ambos definidos en Ω , además supondremos que las funciones que pertenecen a \mathcal{D}_1 y \mathcal{D}_2 pueden tener discontinuidades de salto a través de algunas fronteras internas cuya unión denotaremos por Σ .

La ecuación diferencial se define como

$$\mathcal{L}u = f_{\Omega} \quad \text{en } \Omega,$$

donde \mathcal{L} es un operador diferencial, y Ω puede ser en forma general una región espacio-tiempo.

Ciertas condiciones de frontera son especificadas sobre la frontera $\partial\Omega$ de Ω y la superficie de discontinuidades Σ , cuando Ω es una región espacio-tiempo las condiciones sobre $\partial\Omega$ y Σ son generalmente incluidas en las condiciones iniciales.

La definición del operador adjunto formal requiere, que el operador \mathcal{L} y su adjunto \mathcal{L}^* , satisfagan la siguiente condición:

$$w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w = \nabla \cdot \underline{\mathcal{D}}(u, w),$$

es decir, que $w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w$ sea una divergencia de una función bilineal $\underline{\mathcal{D}}(u, w)$.

Sea

$$w \mathcal{L}u - u \mathcal{L}w = \nabla \cdot \underline{\mathcal{D}}(u, w), \quad (6.1)$$

integrando la ecuación (6.1) sobre Ω obtenemos

$$\int_{\Omega} w \mathcal{L}u - u \mathcal{L}w \, dx = \int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{\mathcal{D}}(u, w) \, dx,$$

aplicando el Teorema de la Divergencia generalizado a la parte derecha se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{\mathcal{D}}(u, w) \, dx &= \int_{\partial\Omega} \underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} \, dx + \int_{\Sigma} [\underline{\mathcal{D}}(u, w)] \cdot \underline{n} \, dx, \\ &= \int_{\partial\Omega} \mathcal{R}_{\partial}(u, w) \, dx + \int_{\Sigma} \mathcal{R}_{\Sigma}(u, w) \, dx, \end{aligned}$$

donde

$$\mathcal{R}(u, w) = \underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} \quad \text{y} \quad \mathcal{R}(u, w) = - [\underline{\mathcal{D}}(u, w)] \cdot \underline{n},$$

aquí, el paréntesis cuadrado representa el salto de $\underline{\mathcal{D}}$ a través de Σ , es decir, el límite cuando $\underline{\mathcal{D}}$ se acerca a Σ por el lado positivo menos el límite cuando $\underline{\mathcal{D}}$ se acerca por el lado negativo a Σ , este salto lo representaremos por

$$[\underline{\mathcal{D}}(u, w)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \underline{\mathcal{D}}(u, w) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^-} \underline{\mathcal{D}}(u, w) \quad \text{cuando } \underline{\mathcal{D}} \text{ tiende a } \Sigma.$$

El lado positivo de Ω es escogido de forma arbitraria, pero al escoger el vector normal unitario \underline{n} sobre Σ , se toma apuntando hacia el lado positivo de Ω .

Supondremos que $\mathcal{L}u$ generalmente no está definido sobre Σ , así u y sus derivadas pueden ser discontinuas en Σ , es por esto que supondremos que las integrales sobre Ω son llevadas a cabo en regiones que no incluyen a Σ , consecuentemente los operadores diferenciales tendrán que ser tomados en el sentido elemental y no en un sentido distribucional [17].

En la teoría general de las ecuaciones diferenciales parciales las fórmulas de Green son muy importantes por su frecuente uso.

Para la construcción de tales fórmulas, una forma común de hacerlo es obtenerlas de la descomposición de la función bilineal \mathcal{R}_{∂} , la forma general de tal descomposición es:

$$\mathcal{R}_{\partial}(u, w) = \underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} = \mathcal{B}(u, w) - \mathcal{C}(u, w),$$

donde \mathcal{B} y \mathcal{C} son dos funciones bilineales.

Cuando consideramos problemas de valores iniciales y de frontera, la definición de estas funciones depende del tipo de frontera y de condiciones iniciales prescritas, una propiedad básica de $\mathcal{B}(u, w)$ es que para cualquier u que satisfaga las condiciones iniciales y de frontera prescritas, $\mathcal{B}(u, w)$ es una función lineal de $w \in \mathcal{D}_2$ bien definida independientemente de la u escogida, a esta función lineal la denotaremos por $\mathcal{G}_\partial(w)$ o mas brevemente por $\mathcal{B}(u, \cdot) = \mathcal{G}_\partial$.

Por otra parte, la función lineal $\mathcal{C}(u, \cdot)$ puede no ser evaluada en términos de los valores de frontera prescritos, pero esto también depende exclusivamente de los valores en la frontera de u (los valores de frontera complementarios). Generalmente, tales valores de frontera solamente pueden ser evaluados después de haber resuelto el problema de valores iniciales y de frontera.

De forma similar se formulan los problemas de valores iniciales y de frontera con saltos prescritos, para esto necesitamos fórmulas de Green aplicables a campos discontinuos, esto nos introduce a una descomposición general de la función bilineal $\mathcal{R}_\Sigma(u, w)$ cuya función es definida puntualmente.

La teoría general incluye el desarrollo de operadores diferenciales con coeficientes discontinuos. Sin embargo, en esta tesis solo se tratarán operadores lineales con coeficientes constantes.

En este caso tal descomposición es facilmente obtenida de la identidad algebraica

$$[\mathcal{D}(u, w)] = \mathcal{D}([u], \dot{w}) + \mathcal{D}(\dot{u}, [w])$$

$$\text{donde } [u] = u_+ - u_- \text{ y } \dot{u} = (u_+ + u_-) / 2,$$

tal que $u_+ = \lim u$ y $u_- = \lim u$ cuando u tiende a Σ por el lado positivo y por el lado negativo respectivamente.

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
 \mathcal{R}_{\Sigma}(u, w) &= - [\mathcal{D}(u, w)] \cdot n \\
 &= -\{\mathcal{D}([u], \dot{w}) + \mathcal{D}(\dot{u}, [w])\} \cdot n \\
 &= -\mathcal{D}([u], \dot{w}) \cdot n - \mathcal{D}(\dot{u}, [w]) \cdot n \\
 &= \mathcal{J}(u, w) - \mathcal{K}(u, w),
 \end{aligned}$$

donde $\mathcal{J}(u, w) = -\mathcal{D}([u], \dot{w}) \cdot n$ y $\mathcal{K}(u, w) = \mathcal{D}(\dot{u}, [w]) \cdot n$ siendo \mathcal{J} y \mathcal{K} la descomposición deseada.

Una importante propiedad de la función bilineal $\mathcal{J}(u, w)$ es que, cuando u esta especificado, esta define una única función lineal de w , la cual es independiente de la u escogida.

Cuando consideremos problemas con valores iniciales y de frontera con saltos prescritos, la función lineal definida por los saltos prescritos es denotada por \mathcal{J}_{Σ} y la condición de salto en cualquier punto de Σ , puede ser especificado por medio de la ecuación

$$\mathcal{J}(u, \cdot) = \mathcal{J}.$$

En problemas con saltos prescritos, la función lineal $\mathcal{K}^{\bullet}(u, \cdot)$ tiene un papel semejante a los valores complementarios de frontera $\mathcal{E}^{\bullet}(u, w)$, estos pueden ser evaluados solamente despues de que el problema con valores iniciales y de frontera ha sido resuelto y cierta información acerca del promedio de la solución y su derivada en Σ , es conocido. Tal información podemos llamarla "promedio generalizado".

Introduciendo la notación

$$\begin{aligned}
 \langle Pu, w \rangle &= \int_{\Omega} w \mathcal{L}u \, dx; \\
 \langle Bu, w \rangle &= \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}(u, w) \, dx; \\
 \langle Ju, w \rangle &= \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u, w) \, dx; \\
 \langle Q^{\bullet}u, w \rangle &= \int_{\Omega} u \mathcal{L}^{\bullet}w \, dx; \\
 \langle C^{\bullet}u, w \rangle &= \int_{\partial\Omega} \mathcal{C}^{\bullet}(w, u) \, dx; \\
 \langle K^{\bullet}u, w \rangle &= \int_{\Sigma} \mathcal{K}^{\bullet}(w, u) \, dx.
 \end{aligned}$$

Utilizando esta notación la ecuación (6.1) puede escribirse como

$$\langle Pu, w \rangle - \langle Q^* u, w \rangle = \langle Bu, w \rangle - \langle C^* (u, w) \rangle + \langle Ju, w \rangle - \langle K^* u, w \rangle.$$

Esta es una identidad entre formas bilineales y como tal puede ser escrita también como

$$P - B - J = Q^* - C^* - K^*, \quad (6.2)$$

siendo ésta la fórmula de Green-Herrera para operadores diferenciales en campos discontinuos.

Los problemas de valores iniciales y de frontera con saltos prescritos pueden formularse por medio de la ecuación (6.1), pero para su formulación también pueden utilizarse las ecuaciones

$$B(u, \cdot) = q_{\partial} \quad \text{y} \quad j(u, \cdot) = j_{\Sigma},$$

con estas ecuaciones le podemos asociar una formulación variacional al problema, para esto definimos los funcionales lineales $f, q, j \in \mathcal{D}$ mediante

$$\langle f, w \rangle = \int_{\Omega} w f_{\Omega} \, dx; \quad \langle q, w \rangle = \int_{\partial\Omega} q_{\partial}(w) \, dx; \quad \langle j, w \rangle = \int_{\Sigma} j_{\Sigma}(w) \, dx,$$

con estas definiciones el problema de valores iniciales y de frontera con saltos prescritos tiene la forma

$$Pu = f, \quad Bu = q, \quad Ju = j, \quad (6.3)$$

aquí los funcionales bilineales B y J son operadores de frontera para P totalmente disjuntos [16, 17, 33].

En este caso el sistema de ecuaciones (6.3) es equivalente a la ecuación variacional

$$\langle (P-B-J)u, w \rangle = \langle f-q-j, w \rangle \quad \forall w \in \mathcal{D}_2, \quad (6.4)$$

la ecuación (6.4) es llamada la formulación variacional del problema en términos de los datos, porque P, B, J están prescritos.

Usando la fórmula Green-Herrera (6.2) la formulación variacional (6.4) es transformada en

$$\langle (Q^* - C^* - K^*)u, w \rangle = \langle f-q-j, w \rangle \quad \forall w \in \mathcal{D}_2, \quad (6.5)$$

aquí la ecuación (6.5) es llamada la formulación variacional del problema en términos de la solución buscada, porque Q^*, C^* y K^* no están prescritas.

Las formulaciones variacionales (6.4) y (6.5) son equivalentes, esto por la fórmula Green-Herrera (6.2), los funcionales lineales Q^*u , C^*u y K^*u suministran información sobre la solución buscada en puntos interiores de la región Ω , los valores de frontera complementarios y el promedio generalizado de la solución en Σ , respectivamente.

El funcional K^*u contiene información acerca del promedio de la solución y de sus derivadas a través de la superficie de discontinuidades Σ , tal información puede ser clasificada de acuerdo con el orden de las derivadas, por ejemplo, K^*u puede ser descompuesta en: el promedio de la función, en el promedio de la primera derivada de la función, etc., etc., así a K^*u podemos expresarla como la suma de operadores K^0, K^1, K^2, \dots , cada uno conteniendo la información del promedio de la derivada del orden correspondiente, tal descomposición es inducida cuando $\mathcal{K}^*(u,w)$ es descompuesta localmente, en la suma de funciones bilineales $\mathcal{K}^0(u,w), \mathcal{K}^1(u,w), \mathcal{K}^2(u,w), \dots$, cada una conteniendo la información local de la derivada correspondiente.

Similarmente, J puede ser expresada como la suma de los operadores J^0, J^1, \dots , conteniendo cada uno la información del salto de la derivada de orden correspondiente, siendo $\mathcal{J}(u,w)$ la suma de $\mathcal{J}^0(u,w), \mathcal{J}^1(u,w), \mathcal{J}^2(u,w), \dots$.

Así

$$K = \sum_I K^I; \quad K^*_I = \sum K^I; \quad \mathcal{J} = \sum_I \mathcal{J}^I; \quad J = \sum_I J^I. \quad (6.6)$$

METODO DEL ADJUNTO LOCALIZADO (LAM)

LAM. (Localized Adjoint Method) está basado en las siguientes observaciones, cuando se aplica el método de residuos pesados a una solución aproximada $\hat{u} \in \mathcal{D}_1$ de u la cual satisface

$$\langle (P-B-J)\hat{u}, w^\alpha \rangle = \langle f-q-j, w^\alpha \rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N$$

donde $\{w^1, w^2, \dots, w^N\} \in D_2$, es un sistema dado de funciones de peso, sin embargo, estas ecuaciones pueden estar expresadas en términos de la información buscada, de esta manera

$$\langle (Q^* - C^* - K^*) \hat{u}, w^\alpha \rangle = \langle f - q - j, w^\alpha \rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N.$$

Como sabemos la solución exacta satisface la ecuación (6.5), por lo cual es claro que

$$\langle (Q^* - C^* - K^*) \hat{u}, w^\alpha \rangle = \langle (Q^* - C^* - K^*) u, w^\alpha \rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N$$

o de forma quizá mas clara

$$\langle (Q^* - C^* - K^*) (\hat{u} - u), w^\alpha \rangle = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N. \quad (6.7)$$

La ecuación (6.7) puede utilizarse para analizar la información de la solución exacta en una aproximación, en los métodos del Adjunto Localizado estas observaciones pueden ser usadas como una estructura previa para seleccionar mas convenientemente las funciones de peso.

El método presentado en este capítulo se aplicó sucesivamente a Ecuaciones Diferenciales ordinarias [31, 32, 26]. Ecuaciones Elípticas en varias dimensiones [3]. Métodos Espaciales Optimos para problemas dependientes del tiempo [4, 15, 23, 24, 34, 20]. Finalmente se desarrolló ELLAM [6, 30, 33].

Las aplicaciones a problemas específicas han sido numerosas [3, 5, 20, 21, 22].

CAPITULO 7

METODO EULERIANO-LAGRANGIANO DE ADJUNTO LOCALIZADO (ELLAM)

La aplicación del Método del Adjunto Localizado (LAM) a problemas de transporte con advección-difusión en espacio-tiempo, tiene como resultado una metodología que es una generalización a los métodos de características, esta metodología es propuesta por el grupo ELLAM en las referencias (6) y (33) con el nombre de Método Euleriano-Lagrangiano de Adjunto Localizado al que los autores se refieren como ELLAM.

ECUACION DE TRANSPORTE ADVECCION-DIFUSION

Cuando aplicamos LAM a problemas dependientes del tiempo es necesario considerar una región Ω en el espacio-tiempo, en la cual puedan ocurrir superficies de discontinuidades Σ .

La notación usada para denotar a los vectores \underline{M} de Ω , será como pares ordenados $\underline{M} = (\underline{m}, m_t)$ donde \underline{m} es un vector cuyas componentes son las coordenadas espaciales de \underline{M} y m_t es la coordenada temporal de \underline{M} , de esta manera definiremos también a \underline{V}_Σ como la velocidad vectorial de la superficie $\Sigma(t)$, donde $\Sigma(t)$ es el conjunto de puntos de Σ en el tiempo t , \underline{V}_Σ es un vector en el espacio el cual puede escribirse como

$$\underline{V}_\Sigma = V_\Sigma \underline{n}$$

donde \underline{n} es el vector normal unitario a $\Sigma(t)$. V_Σ puede ser positiva o negativa dependiendo de el movimiento de $\Sigma(t)$ y de la elección de \underline{n} , en el caso unidimensional \underline{n} debe ser tomada como la unidad.

El vector espacio tiempo $(\underline{V}_\Sigma, 1) = (V_\Sigma \underline{n}, 1)$ es tangente a $\Sigma(t)$ esto en una dimensión es fácil de comprobar, con este hecho es fácil también ver que el vector normal unitario espacio tiempo \underline{N} a Σ está definido por

$$\underline{N} = (1 + V_\Sigma^2)^{-1/2} (\underline{n}, -V_\Sigma)$$

En esta sección consideraremos la Ecuación de Transporte con Advección-Difusión en una dimensión de la forma

$$\mathcal{L}u \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} + Vu \right) + Ru = f_\Omega, \quad \text{en } \Omega \quad (7.1)$$

$$\begin{aligned}x \in \Omega_x &= [0, 1]; \\t \in \Omega_t &= [t^n, t^{n+1}); \\(x, t) \in \Omega &= \Omega_x \times \Omega_t;\end{aligned}$$

Sujeta a las condiciones iniciales

$$u(x, t) = u^n(x) \quad (7.2)$$

y condiciones de frontera dadas en $x = 0$ y 1 . El siguiente desarrollo se acopla a cualquier combinación de condiciones de frontera. La forma en que las condiciones de frontera y Ω son escogidas en las ecuaciones (7.1) y (7.2), es conveniente cuando aplicamos el procedimiento de integración numérica paso por paso en el tiempo.

El operador adjunto definido para $\mathcal{L}u$ es

$$\mathcal{L}^*w = -\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial w}{\partial x} \right) - V \frac{\partial w}{\partial x} + Rw, \quad (7.3)^*$$

y la función $\mathcal{D}(u, w)$ es

$$\mathcal{D}(u, w) = \left\{ u \left(D \frac{\partial w}{\partial x} + Vw \right) - w \left(D \frac{\partial u}{\partial x} + Vu \right), uw \right\}. \quad (7.4)^*$$

Así

$$\mathcal{R}_\Sigma = -[\mathcal{D}(u, w)] \cdot \underline{N} = (1 + V_\Sigma^2)^{-1/2} \left[u \left(D \frac{\partial w}{\partial x} + (V - V_\Sigma)w \right) - w \left(D \frac{\partial u}{\partial x} + Vu \right) \right]$$

Teniendo en cuenta que el proceso físico que la ecuación (7.1) simula es el transporte con difusión Fickiana de un soluto con concentración u , en un fluido libre moviéndose con velocidad V , las condiciones de "suavidad" implicadas por el balance de masa son:

$$u \left[(V - V_\Sigma) - D \frac{\partial u}{\partial x} \right] = 0, \text{ en } \Sigma$$

y las impuestas por la difusión Fickiana son:

$$[u] = 0, \text{ en } \Sigma$$

en el caso en que los coeficientes D y V sean continuos, las condiciones implicadas por el balance de masa se pueden sustituir por

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right] = 0, \text{ en } \Sigma$$

*.- PARA LAS ECUACIONES (7.3) Y(7.4) REVISAR EL APENDICE C

De la identidad $\mathcal{R} = \mathcal{J}(u, w) - \mathcal{K}^0(u, w)$, se obtiene

$$\mathcal{J}^0(u, w) = -(1+V_\Sigma^2)^{-1/2} \{u\} \left[D \frac{\partial w}{\partial x} + \dot{w} (V-V_\Sigma) \right]; \quad (7.5a)^*$$

$$\mathcal{J}^1(u, w) = (1+V_\Sigma^2)^{-1/2} \dot{w} \left[D \frac{\partial u}{\partial x} \right]; \quad (7.5b)^*$$

$$\mathcal{K}^0(w, u) = (1+V_\Sigma^2)^{-1/2} \dot{u} \left\{ \left[D \frac{\partial w}{\partial x} \right] + (V-V_\Sigma) \{w\} \right\}; \quad (7.6a)^*$$

$$\mathcal{K}^1(w, u) = -(1+V_\Sigma^2)^{-1/2} \{w\} D \frac{\partial u}{\partial x} \quad (7.6b)^*$$

estas ecuaciones son útiles para descomponer la frontera $\partial\Omega$ en $\partial_0\Omega$, $\partial_1\Omega$, $\partial_n\Omega$ y $\partial_{n+1}\Omega$ las cuales están definidas como subconjuntos de Ω para puntos (x, t) que satisfacen $x=0$, $x=1$, $t=t^n$, $t=t^{n+1}$, respectivamente. Las condiciones iniciales, dadas por la ecuación (7.2) son satisfechas en $\partial_n\Omega$ y las condiciones de frontera pertenecientes a $\partial_0\Omega \cup \partial_1\Omega$. Estas últimas pueden ser de tipo Dirichlet, Neuman, de Flujo o combinación de éstas. A causa del papel especial que tiene el flujo total, $(D[\partial u/\partial x]Vu)_n$, en la conservación de masa, las únicas condiciones de frontera del tipo de Flujo que son consideradas son aquellas para las que $(D[\partial u/\partial x]Vu)_n$, ($=F$) esta prescrito.

La notación: $\partial_D\Omega$, $\partial_N\Omega$ y $\partial_F\Omega$ se refiere al tipo de condiciones prescritas, Dirichlet, Neuman y de Flujo, respectivamente.

Las funciones bilineales $\mathcal{B}(u, w)$ y $\mathcal{E}(u, w)$, implicadas por las distintas condiciones iniciales y de frontera son:

$$\mathcal{B}(u, w) = -uw, \text{ en } \partial_n\Omega; \quad \mathcal{E}(w, u) = -uw \text{ en } \partial_{n+1}\Omega, \quad (7.7a)$$

$$\mathcal{B}(u, w) = uD \frac{\partial w}{\partial x} \underline{n}, \quad \mathcal{E}(w, u) = w(D \frac{\partial u}{\partial x} - Vu) \underline{n} \text{ en } \partial_D\Omega \quad (7.7b)$$

$$\mathcal{B}(u, w) = -wD \frac{\partial u}{\partial x} \underline{n}, \quad \mathcal{E}(w, u) = -u(D \frac{\partial w}{\partial x} + Vw) \underline{n} \text{ en } \partial_N\Omega \quad (7.7c)$$

$$\mathcal{B}(u, w) = -w(D \frac{\partial u}{\partial x} - Vu) \underline{n}, \quad \mathcal{E}(w, u) = -uD \frac{\partial w}{\partial x} \underline{n} \text{ en } \partial_F\Omega \quad (7.7d)$$

otra expresión alternativa para el caso de condiciones de frontera de Dirichlet es

$$\mathcal{B}(u, w) = u(D \frac{\partial w}{\partial x} + Vw) \underline{n}, \quad \mathcal{E}(w, u) = wD \frac{\partial u}{\partial x} \underline{n}, \text{ en } \partial_D\Omega \quad (7.7e)$$

en las ecuaciones (7.7) el vector normal unidad puede tomar los valores de 1 o -1, observemos también que $\mathcal{E}(u, \cdot) \equiv 0$ en $\partial_n\Omega$, mientras

$$\mathcal{B}(u, \cdot) \equiv 0 \text{ en } \partial_{n+1}\Omega.$$

Es claro por las ecuaciones (7.5) y (7.7) que

$$q_{\partial}(w) = -u^n w, \text{ en } \partial_n \Omega; \quad q_{\partial}(w) = u_{\partial} \left(D \frac{\partial w}{\partial x} + v w \right) \underline{n}, \text{ en } \partial_n \Omega; \quad (7.8a)$$

$$q_{\partial}(w) = -w q \underline{n}, \text{ en } \partial_n \Omega; \quad q_{\partial}(w) = -w(F) \underline{n}, \text{ en } \partial_f \Omega; \quad (7.8b)$$

mientras $j_{\Sigma}(w) \equiv 0$, en Σ .

Las expresiones para las funciones bilineales B, C, J y K se obtienen integrando \mathcal{B} y \mathcal{C} en $\partial \Omega$ y \mathcal{J} y \mathcal{K} en Σ , similarmente por las ecuaciones (6.5), las expresiones para f , g y j son obtenidas integrando f_{Ω} , q_{∂} y j_{Σ} en Ω , $\partial \Omega$ y Σ respectivamente. En el presente caso $j_{\Sigma} = 0$, así que $j=0$.

ELLAM

La metodología de ELLAM da acceso a una formulación general que incluye a muchos métodos específicos basados en combinar aproximaciones Lagrangianas y Eulerianas, en general llamados Métodos de Características (CMs).

En esta tesis la formulación de ELLAM es derivada en una dimensión espacial con coeficientes constantes. Para su formulación en mas dimensiones espaciales ver referencia [3].

Como se mostro la formulación variacional en términos de la información buscada

$$\langle (Q^{\bullet} - C^{\bullet} - K^{\bullet})u, w \rangle = \langle f - q - j, w \rangle \quad \forall w \in \mathcal{D}_2, \quad (6.5)$$

debe ser aplicada junto con funciones de peso w , escogidas de tal manera que $Q^{\bullet} w = 0$, es decir,

$$\mathcal{L}^{\bullet} w \equiv - \frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial w}{\partial x} \right) - v \frac{\partial w}{\partial x} + R w = 0, \quad \text{en } \Omega \quad (7.9)$$

de esta manera la ecuación (6.5) queda como

$$\langle (C^{\bullet} + K^{\bullet})u, w \rangle = \langle q + j - f, w \rangle. \quad \forall w \in \mathcal{D}_2$$

El escoger diferentes funciones de peso w , que satisfagan (6.5) lleva a diferentes clases de aproximación, incluyendo a los Métodos Espaciales Optimos [4, 20, 24, 23, 34, 30, 15], y en general a los Métodos de Características (CMs) [2, 7, 8, 9, 10, 37].

Cuando un procedimiento de integración numérica es aplicado paso a paso en el tiempo a la ecuación (7.1), el objetivo es predecir el valor de la función solución u en el tiempo t^{n+1} cuando se conoce en el tiempo t^n y se tienen condiciones de frontera prescritas. Idealmente toda la información de la solución buscada debiera concentrarse en el valor de la solución u , en cada uno de los subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$ con $i = 1, \dots, E$ en el tiempo t^{n+1} .

Por ejemplo, si desearamos obtener la proyección de $\mathcal{L}^2([0,1])$ de la solución exacta $u(x, t^{n+1})$ en el subespacio de las funciones lineales por tramos, las cuales son globalmente continuas, generado por las funciones

$$w^i(x_i, t^{n+1}) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{\Delta x}, & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{\Delta x}, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (7.10)$$

Se requiere eliminar información de la solución buscada en Ω excepto en los subintervalos $[x_{i-1}, x_i]$, $[x_i, x_{i+1}]$ en el tiempo t^{n+1} . Las funciones de peso que concentran la información de la manera deseada, además de satisfacer $\mathcal{L}^* w^i = 0$ en Ω , deben ser suaves, es decir, $[w^i] = [\partial w / \partial x] = 0$ en las fronteras laterales de Ω , también $w^i(x, t^{n+1}) = 0$ excepto cuando $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$.

En el intervalo $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ se requiere que $w^i(x, t^{n+1})$ tenga la forma de la ecuación (7.10), así obtenemos un problema de condiciones iniciales y de frontera que generalmente está bien planteado pero que tiene soluciones que no son locales.

Al trabajar con métodos numéricos se buscan funciones que tengan soporte local, esto es debido a que permiten trabajar con algoritmos sencillos y fáciles de implementar. Para la i -ésima función de peso la localización se logra si se permiten funciones de peso no suaves, esto es, que se permitan discontinuidades en la función o en su derivada, o en ambas, es decir, $[w] \neq 0$, o $[\partial w / \partial x] \neq 0$, o ambas e información de la

solución u o su derivada normal, o ambas en las curvas de discontinuidades Σ_1 , e incorporandola al sistema de residuos pesados, esto es a pesar de el hecho que el objetivo es la obtención de información acerca de la solución buscada en el tiempo t^{n+1} .

Si se escogen funciones de peso w continuas pero con derivada discontinua ($[w]=0$ pero $[\partial w/\partial x] \neq 0$), las condiciones que deben de satisfacer las condiciones de peso $w^i(x, t)$ son las siguientes:

- a) El soporte de w^i es $\Omega^i = \Omega_1^i \cup \Omega_2^i$, donde $\Omega_1^i = \Omega_i$ y $\Omega_2^i = \Omega_{i+1}$ ($i=1, 2, \dots, E-1$), ver figura 1.
- b) w^i satisface la ecuación $\mathcal{L}^* w = 0$, en Ω .
- c) En $t = t^{n+1}$, w^i tiene la forma de las funciones lineales por tramos dadas por la ecuación (7.10).
- d) w^i es continua.
- e) El salto de $[\partial w^i/\partial x]$ es constante en Σ_1 .
- f) En frontera lateral de Ω , las condiciones de frontera que son impuestas eliminan toda la información en la frontera, es decir, $\mathcal{E}(w^i, \cdot) = 0$.

Por las ecuaciones (7.7b a la d) obtenemos que esta última condición

es:

$$w^i = 0, \quad \text{en } \partial_D \Omega; \quad (7.11a)$$

$$D(\partial w^i/\partial x) + V w^i = 0, \quad \text{en } \partial_N \Omega; \quad (7.11b)$$

$$\partial w^i/\partial x = 0, \quad \text{en } \partial_F \Omega \quad (7.11c)$$

Cuando el dominio Ω^i no intersecta las fronteras laterales las condiciones (7.11) se satisfacen inmediatamente, pero cuando no es así, se deben de construir funciones especiales para cada caso de condiciones de frontera.

El desarrollo de funciones de peso con estas propiedades no es fácil, sobre todo cuando los coeficientes no son constantes.

Para el caso en que los coeficientes de la ecuación (7.1) son constantes y el término de fuentes es nulo, es decir, el término $R=0$, y la partición es uniforme, las funciones de peso localizadas utilizadas en la referencia [1] fueron:

$$w^1(x, t) = \begin{cases} \frac{x-x_{1-1}}{\Delta x} + v \frac{t^{n+1}-t}{\Delta x}, & (x, t) \in \Omega_1^1 \\ \frac{x_{1+1}-x}{\Delta x} + v \frac{t^{n+1}-t}{\Delta x}, & (x, t) \in \Omega_2^1 \\ 0, & \text{en otro } (x, t) \end{cases} \quad (7.12)$$

Si el dominio de Ω_1 no intersecan las fronteras laterales, estas funciones de peso, ilustradas en la figura 2, satisfacen todas las propiedades requeridas de la (a) a la (f), pero si las fronteras laterales son intersechadas por el correspondiente dominio, entonces la condición (f) es violada.

Una importante ventaja en la metodología de ELLAM es el tratamiento consistente y sistematizado, propio de el ELLAM para incorporar las condiciones de frontera, esto permite construir una aproximación numérica que posee la propiedad de conservación de masa.

Observe que para las funciones de peso (7.12) \mathcal{J} y \mathcal{K} no se anulan al menos en tres líneas de discontinuidades: Σ_{1-1} , Σ_1 y Σ_{1+1} .

Así

$$\langle K^* u, w^1 \rangle = \sum_{j=1-1}^{1+1} \langle K_j^* u, w^1 \rangle, \quad (7.13)$$

los saltos son:

$$[\partial w / \partial x]_{1-1} = 1/\Delta x; \quad [\partial w / \partial x]_1 = -2/\Delta x; \quad [\partial w / \partial x]_{1+1} = 1/\Delta x; \quad (7.14)$$

Quando la región Ω_1^1 , no interseca a las fronteras laterales, los términos de frontera (7.7b-d) se anulan y la formulación variacional en términos de la información buscada, se reduce a

$$\langle (C_{n+1}^* + K^*) u, w^1 \rangle = \langle q_n - f, w^1 \rangle:$$

$$\int_{x_{1-1}}^{x_{1+1}} u(x, t^{n+1}) w^1(x, t^{n+1}) dx - \frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_1(t), t) dt - 2 \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_c(t), t) dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_r(t), t) dt \right) =$$

$$= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u(x, t^n) w^i(x, t^n) dx + \int_{\Omega} f_{\Omega}(x, t) w^i(x, t) dx dt \quad (7.15)$$

donde los términos desconocidos se han agrupado en la parte izquierda de la ecuación, los conocidos del lado derecho y σ_1 , σ_c , σ_r describen a las curvas características Σ_{i-1} , Σ_i , Σ_{i+1} respectivamente.

Observe que las integrales:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_1(t), t) dt, \quad 2 \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_c(t), t) dt \quad \text{y} \quad \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_r(t), t) dt$$

son integrales a lo largo de las curvas características.

Las integrales que aparecen en la ecuación (7.15) se pueden aproximar de diferentes maneras y diferentes aproximaciones de estas integrales conducen a diferentes algoritmos de CM's reportados en la literatura.

Estas integrales se aproximan en términos de valores de u en los nodos en los niveles de tiempos t^n y t^{n+1} , de tal forma que las incógnitas en la ecuación corresponden, a la larga, a incógnitas en el tiempo t^{n+1} , $\{U_0^{n+1}, U_1^{n+1}, \dots, U_E^{n+1}\}$ donde U_1^{n+1} es una aproximación a $u(x_1, t^{n+1})$.

Por ejemplo, la interpolación lineal de u por tramos en los niveles de tiempo t^n y t^{n+1} , junto con una aproximación totalmente implícita en $t=t^{n+1}$ de la integral sobre las características, conducen al Método Modificado de Características propuesto por Douglas y Russell en [8].

El sistema de ecuaciones que se obtiene en este caso es

$$\left(\frac{\Delta x}{6} - \frac{D\Delta t}{\Delta x} \right) u_{i-1}^{n+1} + 2 \left(\frac{\Delta x}{3} + \frac{D\Delta t}{\Delta x} \right) u_i^{n+1} + \left(\frac{\Delta x}{6} - \frac{D\Delta t}{\Delta x} \right) u_{i+1}^{n+1} =$$

$$\int_{\Omega} f_{\Omega} w^i dx dt + \Delta x \left(\beta_1 u_{i-N_c-2}^n + \beta_2 u_{i-N_c-1}^n + \beta_3 u_{i-N_c}^n + \beta_4 u_{i-N_c+1}^n \right),$$

donde N_c es la parte entera de el número de Courant Cu ,

$$Cu = \frac{V\Delta t}{\Delta x}, \quad \alpha = 1 - (Cu - Nc)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{6} - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{6}, \quad \beta_2 = \frac{2}{3} - \alpha^2 + \frac{\alpha^3}{2},$$

$$\beta_3 = \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{\alpha^3}{2}, \quad \beta_4 = \frac{\alpha^3}{6}.$$

IMPLEMENTACION DE CONDICIONES DE FRONTERA

La ecuación (7.15) se modifica cuando la región Ω^1 intersecta las fronteras laterales, es decir, cuando una o mas curvas características intersectan la frontera espacial. Cuando esto ocurre las condiciones de frontera son incluidas en las ecuaciones de aproximación [6,13,14,33].

La frontera espacial se divide en frontera de entrada y frontera de salida.

Para la implementación de las condiciones de frontera en la frontera de entrada ($x = x_0$), para la ecuación (7.1) consideraremos el caso en el que el número de Courant: $Cu = V(\Delta t)/\Delta x$ (con $0 < V$), esta entre uno y dos. El caso en el que Cu es arbitrario es tratado en el artículo "An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for Advection Diffusion Equation" [6].

La curva característica que pasa a través del nodo uno ($x = x_1$) en el tiempo t^{n+1} intersecta a la frontera de entrada en el tiempo t_1^* , tal que: $t^n < t_1^* < t^{n+1}$ (ver fig 3), por esto las ecuaciones que involucran a esta curva característica son influenciadas por las condiciones de frontera.

Consideremos la ecuación de ELLAM relacionada con el nodo uno (asociada a la función de peso w^1 ilustrada en la figura 2), la función de peso w^1 difiere de la función w^1 por que parte de w^1 intersecta la frontera en $x = x_0$, con un valor diferente de cero. Por esto la

evaluación de ecuación (7.15) es modificada por la influencia de las condiciones de frontera. Pero la condición $\mathcal{L}^* w^1 = 0$, debe mantenerse y los saltos correspondientes de la derivada espacial deben de evaluarse. Por esto la ecuación (7.15) al ser evaluada para w^1 se transforma en

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_2} u(x, t^{n+1}) w^1(x, t^{n+1}) dx + V \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(0, t) w^1(x, t) dt - \\
 & \frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t_1}^{t^{n+1}} u(0, t) dt - 2 \int_{t_1}^{t^{n+1}} u(\sigma_c(t), t) dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_r(t), t) dt \right) \\
 & + D \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) w^1(0, t) dt + \frac{D}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^1} u(0, t) dt \\
 & = \int_{x_0}^{x_2} u(x, t^n) w^1(x, t^n) dx + \int_{\Omega_1^1 \cup \Omega_2^1} f(x, t) w^1(x, t) dx dt \quad (7.16)
 \end{aligned}$$

Al examinar la ecuación (7.16), encontramos que la primera integral espacial de el lado derecho de la ecuación en el tiempo t^n , es modificada por la frontera $x = 0$, porque el intervalo de integración es $(2-Cu)\nabla x$ en vez de $2\nabla x$. La parte que es cortada por la frontera corresponde a $Cu(\nabla x)$, y es recogida por la segunda integral del lado izquierdo de la ecuación. las siguientes tres integrales del lado izquierdo de la ecuación corresponden a los tres términos difusivos de la ecuación (7.15), excepto la que involucra el valor de frontera $u(0, t)$. Finalmente las últimas dos integrales del lado izquierdo que son evaluadas a lo largo de la frontera $x = x_0 = 0$, note que la primera de ellas involucra al gradiente espacial $\partial u(0, t)/\partial x$, esto introduce otro grado de libertad adicional en la frontera, así por estas dos últimas integrales, los términos $u(0, t)$ y $\partial u(0, t)/\partial x$ están presentes en la ecuación.

Siempre que se especifiquen condiciones de frontera de Dirichlet o Neumann en $x=0$, el flujo en la frontera necesita ser determinado debido a estas integrales.

Por esto la ecuación que corresponde al nodo cero con función de peso: $w^0(x, t)$ (fig. 4) debe incluirse.

La razón de que ambos valores de frontera aparezcan en la formulación ELLAM es que los elementos de LAM (fig 2) en el espacio tiempo, no son paralelos al eje del tiempo.

Términos similares aparecen en todas las ecuaciones que no se anulan en una parte de la frontera espacial.

Para este caso en el que $1 \leq Cu < 2$ y $N_c = 1$, las ecuaciones asociadas a w^0 , w^1 y w^2 tienen influencia de la frontera y las ecuaciones ELLAM relevantes para w^0 , w^1 y w^2 son respectivamente (7.17) (7.16) y (7.18).

$$\int_{x_0}^{x_1} u(x, t^{n+1}) w^0(x, t^{n+1}) dx - V \int_{t_n}^{t^{n+1}} u(0, t) w^0(0, t) dt -$$

$$\frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t_1}^{t^{n+1}} u(0, t) dt - \int_{t_1}^{t^{n+1}} u(\sigma_r(t), t) dt \right) + D \int_{t_1}^{t^{n+1}} \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) w^0(0, t) dt$$

$$= \int_{\Omega_1^0 u \Omega_2^0} f(x, t) w^0(x, t) dx dt. \quad (7.17)$$

$$\int_{x_1}^{x_3} u(x, t^{n+1}) w^2(x, t^{n+1}) dx + V \int_{t_n}^{t_1} u(0, t) w^2(0, t) dt -$$

$$\frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t_1}^{t^{n+1}} u(\sigma_1(t), t) dt - 2 \int_{t_n}^{t^{n+1}} u(\sigma_c(t), t) dt + \int_{t_n}^{t^{n+1}} u(\sigma_r(t), t) dt \right)$$

$$+ D \int_{t_n}^{t_1} \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) w^2(0, t) dt - \frac{D}{\Delta x} \int_{t_n}^{t_1} u(0, t) dt$$

$$= \int_{\Omega_1^2 u \Omega_2^2} f(x, t) w^2(x, t) dx + \int_{\Omega_1^2 u \Omega_2^2} f(x, t) w^1(x, t) dx dt \quad (7.18)$$

Si están especificadas condiciones de frontera de Dirichlet, entonces todas las integrales que involucran a $u(0,t)$ son conocidas y las integrales que involucran al flujo difusivo: $D[\partial u(0,t)/\partial x]$ son desconocidas. Inversamente para condiciones de frontera de Neumann, $\partial u(0,t)/\partial x$ es conocido y $u(0,t)$ debe determinarse. Finalmente para las condiciones de frontera de flujo el gradiente $\partial u(0,t)/\partial x$ puede expresarse en términos de $u(0,t)$ o viceversa.

Para los tres tipos de condiciones de frontera, $u(0,t)$ y $\partial u(0,t)/\partial x$ deben poder determinarse. Es por esto que la ecuación ELLAM asociada al nodo w^0 (7.17) es necesaria.

Note que en las tres ecuaciones (7.17) (7.16) y (7.18) los flujos advectivos y difusivos pueden combinarse, por ejemplo, en la ecuación (7.17) el término del flujo total en la frontera es:

$$- \int_{t_1}^{t^{n+1}} [Vu(0,t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0,t)] w^0(0,t) dt$$

Esto conviene a la implementación de condiciones de frontera de flujo y también facilita ver que el conjunto final de ecuaciones posee la propiedad de conservación de masa.

Note que en general, cuando una característica cruza la frontera, algunas de las integrales que aparecen en las ecuaciones de ELLAM, el intervalo de integración es menor a Δt . En particular las integrales relacionadas con el término difusivo, el intervalo de integración es de t_1^* a t^{n+1} . Esto indica que la parte difusiva de la ecuación es aplicada en un intervalo de tiempo reducido. Este efecto que fue inadvertido en muchas referencias de MC's en la literatura, aparece naturalmente en ELLAM.

La implementación de las condiciones de frontera en la frontera de salida es un poco más complicada. Considerando el caso en el que $1 \leq Cu < 2$ y $Nc = 1$, las ecuaciones de ELLAM pueden escribirse para los nodos: $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{E-1}$, con las ecuaciones: (7.17), (7.16) (7.18) y (7.15).

Si únicamente las incógnitas en estas ecuaciones son los valores en los nodos en el tiempo t^{n+1} , entonces estas ecuaciones constituyen un conjunto de E ecuaciones con $E+2$ incógnitas $\partial_0^{n+1}/\partial x$, U_0^{n+1} , U_1^{n+1} , ..., U_{E-1}^{n+1} , U_E^{n+1} .

Una ecuación adicional está disponible de las condiciones de frontera para el flujo de entrada. Si son dadas condiciones de frontera de Dirichlet en: $x = 1$, entonces U_E^{n+1} es conocida y junto con las condiciones de frontera en: $x = 0$, el sistema puede resolverse para las incógnitas anteriores.

Sin embargo, si están prescritas condiciones de frontera de Neumann, U_E^{n+1} es incógnita y una ecuación adicional debe ser incluida, esto es, se necesita la ecuación asociada al nodo w^E .

La ecuación asociada a w^E (fig. 5) es la primera función que no se anula en un intervalo a lo largo de $x=x_E=1$, $t^n \leq t < t^{n+1}$. Por esto, términos de frontera aparecen en dicha ecuación. La evaluación de ELLAM para esta ecuación conduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{E-1}}^x u(x, t^{n+1}) w^E(x, t^{n+1}) dx + V \int_{t_{E+1}}^{t^{n+1}} u(1, t) w^E(1, t) dx dt \\ & - \frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_1(t), t) dt - 2 \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_c(t), t) dt + \int_{t^n}^{t^{E+1}} u(\sigma_r(t), t) dt \right) \\ & - D \int_{t_{E+1}}^{t^{n+1}} \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) w^E(1, t) dt - \frac{D}{\Delta x} \int_{t_{E+1}}^{t^{n+1}} u(1, t) dt \\ & = \int_{x_{E-1}}^{x_{E+1}} u(x, t^n) w^E(x, t^n) dx + \int_{\Omega_1^E \cup \Omega_2^E} f(x, t) w^E(x, t) dx dt. \quad (7.19) \end{aligned}$$

Para condiciones de frontera de Neumann, $\partial u(1, t)/\partial x$ puede ser prescrita por el flujo de salida, mientras $u(1, t)$ en $t^n \leq t < t^{n+1}$ es incógnita.

Una posibilidad para la evaluación de $u(l, t)$ en $t^n \leq t < t^{n+1}$ es efectuar una interpolación simple entre U_E^n y U_E^{n+1} , así no es introducida ninguna incógnita adicional en la ecuación (7.19) y el sistema de ecuaciones es cerrado.

Otra opción es colocar un nodo adicional en (x_E, t_{E+1}^*) llamado α_1 que define una incógnita adicional: U_{α_1} y la ecuación de ELLAM asociada a este nodo adicional tiene solo una parte en el dominio Ω (ver Fig. 6). Usando una función de peso w^{E+1} , la ecuación ELLAM asociada al nodo adicional es:

$$\begin{aligned} & \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(l, t) w^{E+1}(l, t) dt - \frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_1(t), t) dt - 2 \int_{t^n}^{t^{n+1}} u(\sigma_0(t), t) dt \right) \\ & - D \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\partial u}{\partial x}(l, t) w^{E+1}(l, t) dt + \frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t_{E+1}^*}^{t^n} u(l, t) dt - \int_{t^n}^{t_{E+1}^*} u(l, t) dt \right) \\ & = \int_{x_E}^{x_E} u(x, t^n) w^{E+1}(x, t^n) dx + \int_{\Omega_1^{E+1}}^{\Omega_2^{E+1}} f(x, t) w^{E+1}(x, t) dx dt \quad (7.20) \end{aligned}$$

Las integrales a lo largo de la frontera $x = x_E = l$ pueden ser aproximadas nuevamente por los valores de los nodos, porque w^{E+1} no se anula en $t = t^n$ y toda la información es tomada como conocida para $t < t^n$; es decir, la información en el nodo E en t^n es conocida por un paso previo en el tiempo.

Para este caso de condiciones de frontera de Neumann y $N_c=1$, hay $E+2$ ecuaciones ELLAM, correspondiendo a $E+2$ funciones de peso (w^i con $i = 0, 1, 2, \dots, E+1$), estas son resueltas para los incógnitas: $\partial U_0^{n+1} / \partial x$, U_0^{n+1} , U_1^{n+1} , ..., U_{E-1}^{n+1} , U_E^{n+1} , U_{α_1} . De aquí los valores conocidos son: U_0^{n+1} (de las condiciones del flujo de entrada en la frontera); $(\partial U_0^{n+1} / \partial x)$, $(\partial U_E^{n+1} / \partial x)$, $(\partial U_{\alpha_1} / \partial x)$ y $(\partial U_0^n / \partial x)$ (de las condiciones del flujo de salida en la frontera) y U_E^n de la solución de un paso previo en el tiempo.

CONSERVACION DE MASA

Una importante característica de la metodología de ELLAM es que gracias a la forma sistemática en que incorpora los términos de frontera al esquema numérico, es posible elegir funciones de prueba con las que se obtiene función conservación de masa [6, 13].

Para el caso en el que $1 \leq Cu < 2$ y $Nc = 1$, consideremos la suma total de todas las ecuaciones ELLAM, es decir, la suma total de las ecuaciones asociadas a las funciones de peso: w^0, w^1, \dots, w^{E+1} , expresada en la ecuación (7.21). El caso general en el que el número de Courant es arbitrario, es tratado en el artículo [6].

$$\begin{aligned}
 & \int_{x_0}^{x_E} u(x, t^{n+1}) dx - \left(\int_{x_0}^{x_{E+1}} u(x, t^n) dx + \int_{x_{E+1}}^{x_E} u(x, t^n) w^{E+1}(x, t^n) dx \right) \\
 & - \int_{t^n}^{t^{n+1}} [Vu(0, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0, t)] dt + \int_{t_{E+1}^n}^{t^{n+1}} [Vu(1, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(1, t)] dt \\
 & - \int_t^{t_{E+1}^n} [Vu(1, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(1, t)] w^{E+1}(x, t) dt - \frac{D}{\Delta x} \int_{t^n}^{t_{E+1}^n} u(1, t) dt \\
 & + \frac{D}{\Delta x} \int_{t^n}^{t_{E+1}^n} u(\sigma_c(t), t) dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_0}^{x_E} f(x, t) dx dt \\
 & - \int_{\Omega_2^{E+1}} f(x, t) [1 - w^{E+1}(x, t)] dx dt. \tag{7.21}
 \end{aligned}$$

En la ecuación (7.21) se usó el hecho de que en cualquier elemento de el espacio-tiempo: $\Omega_1^k = \Omega_1^{k+1}$ y $w^k + w^{k+1} = 1$. En general, $\sum_{i=0}^{E+1} w^i(x, t^{n+1}) = 1$, en $(0 \leq x \leq 1)$ y $\sum_{i=0}^{E+1} w^i(0, t) = 1$ en $(t_{E+1}^n \leq t \leq t^{n+1})$. Al examinar la ecuación (7.21) se observa que un balance global es casi alcanzado. Las regiones de frontera e interiores asociadas con el espacio-tiempo Ω_2^{E+1} son responsables de la falta del balance global. Esto puede explicarse de la siguiente manera.

Dentro de cualquier región espacio-tiempo limitado por los nodos x_k y x_{k+1} en t^{n+1} , dos funciones de peso no se anulan, estas funciones son las correspondientes w^k y w^{k+1} , por que la suma de estas funciones se lleva a cabo en una región y por la simetría en las integrales de frontera. La suma de estas dos ecuaciones ELLAM asociadas a estas funciones de peso conserva un balance global.

A la región Ω_2^{E+1} le falta la ecuación ELLAM asociada con la función de peso w^{E+2} , esta función es la única que no es nula en $[0, 1] \times [t^n, t^{n+1}]$ y para la cual una ecuación ELLAM no fue tomada en cuenta; esto se debió a que la ecuación w^{E+2} no fue necesaria para conocer las incógnitas de interés, porque el valor en el nodo E obtenido en un paso previo de tiempo sustituyeron a esta ecuación. Sin embargo, esta ecuación puede ser usada para hacer cumplir la conservación global de masa.

La Ecuación de ELLAM asociada a la función de peso w^{E+2} (figura 7) es:

$$\int_{t^n}^{t^{E+1}} [Vu(1, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(1, t)] w^{E+2}(1, t) dt - \int_{x_{E+1}}^{x_E} u(x, t^n) w^{E+2}(x, t^n) dx + \frac{D}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{E+1}} u(1, t) dt - \int_{t^n}^{t^{E+1}} u(\sigma_1(t), t) dt \right) = \int_{\Omega_1^{E+2}} f(x, t) w^{E+2}(x, t) dx dt. \quad (7.22)$$

Sumando la ecuación (7.21) y (7.22) obtenemos la ecuación (7.23) la cual representa un estado de conservación de masa global.

$$\int_{x_0}^{x_E} u(x, t^{n+1}) dx - \int_{x_0}^{x_E} u(x, t^n) dx - \int_t^{t^{n+1}} [Vu(0, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(0, t)] dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} [Vu(1, t) - D \frac{\partial u}{\partial x}(1, t)] dt = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_0}^{x_E} f(x, t) dx dt. \quad (7.23)$$

Es por esto que el conjunto de todas las ecuaciones de ELLAM, incluyendo a la asociada con la función de peso w^{E+2} , posee la propiedad conservativa.

El uso de todas las ecuaciones ELLAM de un sistema específico, aun sin la ecuación (7.22), en general, no posee la propiedad de conservación de masa.

Otra opción para obtener un sistema que posea la propiedad de conservación de masa es el método de celdas desarrollado en [13], en el cual las funciones son constantes en las bandas. De esta manera se obtienen algoritmos que también permiten la implementación sistemática y consistente de las condiciones de frontera, los resultados obtenidos en promedio son ligeramente más precisos que en [6], por su sencillez en las funciones de peso su implementación es más fácil que en [6], esto permite que más fácilmente se generalice a coeficientes variables y a varias dimensiones.

CAPITULO 8

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

Este trabajo de tesis trata con detalle la obtención de la Ecuación de Transporte con Advección-Difusión a partir de la Mecánica de los Medios Continuos.

Se expone en esta tesis un panorama general de los métodos numéricos basados en aproximaciones Eulerianas-Lagrangianas para la solución de la Ecuación de Transporte Advección-Difusión.

En particular se desarrolla el Método de Características (propuesto a principio de los 80's) el cual tiene un marco de referencia Lagrangiano que permite obtener una solución numérica de la Ecuación de Transporte Dominada por Advección, dependiente del tiempo en una dimensión espacial y presenta algunas limitaciones del mismo.

En esta tesis se presenta también una aproximación por el Método del Adjunto Localizado (LAM) en una región espacio-tiempo para la Ecuación de Transporte con Advección-Difusión en una dimensión espacial, el LAM es una metodología reciente para la discretización de las Ecuaciones Diferenciales Parciales, fundamentada en la teoría algebraica de "Problemas con Valores en la Frontera" de Herrera.

La formulación de LAM es basada en una discretización del espacio tiempo, en la cual se define un número finito de funciones de peso especializadas, estas funciones que no son unicas deben de satisfacer la ecuación homogénea del adjunto, cada una de ellas.

Esta formulación conduce a una metodología general que incluye a muchos métodos específicos, basados en aproximaciones Eulerianas-Lagrangianas, llamados Métodos de Características (MC's).

Los autores de esta metodología (el grupo ELLAM) se refieren a esta como: Método Euleriano-Lagrangiano de Adjunto Localizado (ELLAM), presentado por primera vez en los artículos "An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for the Advection-Diffusion Equation" y Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework", ELLAM no solo es una generalización de los métodos de características, ya que también ELLAM tiene una metodología propia que es consistente y sistemática en la incorporación de las condiciones de frontera.

ELLAM es la primera metodología que hace un tratamiento completo de las condiciones de frontera para la Ecuación de Transporte, que permite la implementación de cualquier tipo de condiciones de frontera** de una forma consistente y sistemática, que permiten obtener un esquema conservativo para la Ecuación de Transporte.

Creo que es conveniente resaltar que ELLAM es una generalización de los métodos de características que se basa en una aproximación por el Método de Adjunto Localizado (LAM) y no en una técnica de separación de operadores o descomposición de la ecuación,

El escoger diferentes funciones de peso desde el marco de referencia de el LAM, nos puede conducir no necesariamente a una aproximación Euleriana-Lagrangiana.

Diferentes funciones de peso especializada requeridas en la discretización desde el marco de referencia de ELLAM, conducen a diferentes métodos reportados en la literatura con marco de referencia Euleriano-Lagrangiano.

La conservación de masa que se obtiene mediante la metodología de ELLAM depende exclusivamente de las funciones de peso escogidas y al igual que en las condiciones de frontera, ELLAM es el primer método que tiene la cualidad de la conservación de masa.

**.- NEUMAN, DIRICHLET, DE FLUJO.

REFERENCIAS

- [1].- Allen, M., Herrera, I. y Pinder, G.F., Mathematical Modelling in Science and Engineering, Ed. John-Wiley, 1987.
- [2].- Baptista, A. M., Solution of Advection-Dominated Transport by Eulerian-Lagrangian Methods Using the Backward Methods of Characteristics., Ph. D. Tesis, Dept. of Civil Engineering, M. I. T., 1987.
- [3].- Celia, M. A., Herrera, I. y Bouloutas, E. T., "Adjoint Petrov-Galerkin Methods For Multi-Dimensional Flow Problems", In Finite Element Analysis in Fluids, T.J. Chung y Karr R., Eds. UAH Press, Huntsville Alabama., pp 953-958, 1989 (Invited Lecture).
- [4].- Celia, M. A., Herrera, I., Bouloutas, E. T. y Kindred, J. S., "A New Numerical Approach for the Advective-Diffusive Transport Equation", Numerical Methods for Partial Differential Equations, 5, pp 203-226, 1989.
- [5].- Celia, M. A., Kindred, J. S. y Herrera, I., "Contaminant Transport and Biodegradation: 1: A Numerical Model for Reactive Transport in Porous Media", Water Resources Research, 25(6), pp1141-1148, 1989.
- [6].- Celia, M. A., Russell, T. F., Herrera, I. y Ewing R.E., "An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for the Advection-Diffusion Equation", Adv. Water Resources, Vol 13, No.4, pp 187-206, 1990.
- [7].- Dahle, H. K., Espedal, M. S., Ewing, R. E., Saevareid, O., "Characteristics Adaptive Subdomain Methods for Reservoir Flow Problems", Numerical Methods for Partial Differential Equations, Vol. 6, pp. 279-309, 1990.

- [8].- Douglas, J. Jr., Russell, T. F. "Numerical Methods for Convection-Dominated Diffusion Problems Based on Combining the Method of Characteristics with Finite Element or Finite Difference Procedures", SIAM J. Numer. Anal., Vol. 19, No. 5, pp 871-885, 1982.
- [9].- Espedal, M.S., Ewing, R.E., "Characteristic Petrov-Galerkin Subdomain Methods for Two-Phase Immiscible Flow", Comp. Meth. App. Mech. and Engin., Vol 64, pp. 113-135, 1987.
- [10].- Ewing, R.E., Russell, T.F., "Multistep Galerkin Methods Along Characteristics for Convection-Diffusion Problems", Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations, IV, Eds. Vichnevetsky R. y Stepleman R.S., IMACS, 1981.
- [11].- Garabedian, P. R., Partial Differential Equations, Ed. John-Wiley, 1964.
- [12].- Greenspan, D., Introduction of Partial Differential Equations, Ed. McGRAW-HILL, 1976.
- [13].- Herrera, G., Tratamiento Numérico de Transporte Dominado por Advección., Tesis de Maestría en Geofísica (Area Modelación Matemática y Computacional), UACPyP/CCH, U.N.A.M., 1992.
- [14].- Herrera, G., Herrera, I. y Galindo, A., "Procedures for Advection Dominated Transport", en las memorias del "7th IMACS International Conference on Computer Methods for Partial Differential Equations", llevado a cabo del 22 al 24 de Junio de 1992, (por aparecer).
- [15].- Herrera, I., "Advances in the Numerical Simulation of Steep Fronts", In Finite Element Analysis in Fluids, Eds.: T.J. Chung y R. Karr, University of Alabama Press, pp 965-970, 1989.

- [16].- Herrera, I., "An Algebraic Theory of Boundary Value Problems", KINAM, 3(2), pp161-230, 1981, (invitado).
- [17].- Herrera, I., Boundary Methods: An Algebraic Theory, Ed. Pitman Advanced Publishing Program, Applicable Mathematics Series, London, 1984.
- [18].- Herrera, I., "Localized Adjoint Method: A New Discretization Methodology", Computational Methods in Geosciences, Eds.: W.E. Fitzgibbon and M.F. Wheeler, SIAM, Philadelphia, pp 66-77, 1992.
- [19].- Herrera, I., "Localized Adjoint Method: An Overview of its Present State" en las memorias del "7th IMACS International Conference on Computer Methods for Partial Differential Equations", llevado a cabo del 22 al 24 de Junio de 1992, (por aparecer).
- [20].- Herrera, I., "Localized Adjoint Method: Application to advection dominated flows", Groundwater Management: quantity and Quality, IAHS Publ. No. 188, pp 349-357, 1989.
- [21].- Herrera, I., Localized Adjoint Methods: Applications to Multiphase Flow Problems", Proceedings Fifth Wyoming Enhanced Oil Recovery Symposium, Mayo 10-11, 1989, Enhanced Oil Recovery Institute, University of Wyoming, pp 155-173, 1990.
- [22].- Herrera, I., "Localized Adjoint Methods in Water Resources Problems", In Computational Methods in Surface Hydrology, Eds. G. Gambolati, A. Rinaldo y C. A. Brebbia, Springer-Verlag, pp 433-440, 1990 (Invited Paper).
- [23].- Herrera, I., "New Approach to Advection-Dominated Flows and Comparison with Other Methods", Computational Mechanics', 88, Springer Verlag, Heidelberg, Vol 2, 1988.
- [24].- Herrera, I., "New Method for Diffusive Transport", Groundwater Flow and Quality Modelling, by D. Reidel Publishing Co., pp 165-172, 1988.

- [25].- Herrera, I., "Some Unifying Concepts in Applied Mathematics", En the Merging of Dicipines: New Directions and Pure, Applied and Computational Mathematics, Eds. R.E. Ewing, K.I. Gross y C.F. Martin, Springer Verlag, New York, pp 79-88, 1986, (invited Paper).
- [26].- Herrera, I., "The Algebraic Theory Approach for Ordinary Differential Equations: Highly Accurate Finite Differences", Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations, 3(3), pp 199-218, 1987.
- [27].- Herrera, I., "Unified Approach to Numerical Methods, Part 2. Finite Elements, Boundary Methods, and its Coupling", Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations, 3, pp 159-186, 1985.
- [28].- Herrera, I., "Unified Formulation of Numerical Methods. I Green's Formulas for Operators in Discontinuous Fields", Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations, Vol 1, pp 25-44, 1985.
- [29].- Herrera, I., Allen, M., "Modelación Computacional en Ciencias e Ingeniería: Formulación de las Ecuaciones Básicas", Comunicaciones Técnicas, Serie Docencia y Divulgación No. 9, Instituto de Geofísica, U.N.A.M., 1986.
- [30].- Herrera, I., Celia, M. A. y Martínez, J. D., "Localized Adjoint Method as a New Approach to Advection Dominated Flows", In Recent Advances in Ground-Water Hidrology, Eds. J.E. Moore, A.A. Zaporazec, S.C. Csallany y T.C. Varney, American Institute of Hidrology, pp 321-327, 1989 (Invited Paper).
- [31].- Herrera, I., Chargoy, L., "An Overview of the Treatment of Ordinary Differential Equations by Finite Differences", Pergamon Press, Oxford, Vol. 8, pp 17-19, 1987.

- [32].- Herrera, I., Chargoy, L. y Alducin, G., "Unified Approach to Numerical Methods. part 3. Finite Differences and Ordinary Differential Equations", Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations, 1, pp 241-258, 1985.
- [33].- Herrera, I., Ewing, R. E., Celia, M. A., y Russell, T. F., "Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework", SIAM J. Numer. Anal. (por aparecer).
- [34].- Herrera, I., Hernández, G., "Advances on the Numerical Simulation of Steep Fronts", Numerical Methods for Transport and Hidrologic Processed, Vol 2, Eds. M.A. Celia, L.A. Ferrand and G. Pinder, of the Series Developments in Water Science Computational Mechanics Publications, Elsevier, Amsterdam Vol. 36, pp 139-145, 1988.
- [35].- Lapidus, P., Pinder, G. F., Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering, Ed. John-Wiley, 1982.
- [36].- Rosenberg, D. U., Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations, Ed. Richard Bellman, 1969.
- [37].- Russell, T. F., "Time Stepping Along Characteristics with Incomplete Iteration for a Galerkin Approximación of Miscible Displacement in Porus Media", SIAM J. Numer. Anal., Vol. 22, No. 5, 1985.
- [38].- SMITH, G. D., Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods, Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series, Eds. Churchhouse, R. F. and Tayler A., 1985.
- [39].- Sneddon, I. N., Elemets Of Partial Differential Equations, Ed. McGRAW-HILL, 1957.

- [40].- Strikwerda, J. C., Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations, Mathematics Series, Eds. Wadsworth & Brooks/Cole, 1989.
- [41].- Twizell, E.H., Computational Methods for Partial Differential Equations, Ed. Ellis Horwood Limited, 1984.

APENDICE A

HERRAMIENTAS MATEMATICAS

Este apéndice tiene como finalidad concentrar las herramientas matemáticas básicas más importantes y sobresalientes usadas en esta tesis.

Los desarrollos matemáticos en el presente trabajo están fundamentados en resultados del cálculo diferencial e integral, en esta sección mencionaremos solamente tres de ellos, que son considerados de gran importancia en el desarrollo de la Mecánica de los Medios Continuos [1, 29].

El primero de ellos es el Teorema de la Divergencia, el cual es fácilmente obtenido de la fórmula de integración por partes en espacios de varias dimensiones, su obtención entonces es como sigue: Sea Ω una región del espacio Euclidiano N-dimensional y sea $f(x_1, x_2, \dots, x_N)$ una función de N variables, entonces

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x_i}(\underline{x}) d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} f(\underline{x}) \cdot n_i d\underline{x}, \quad (\text{A.1})$$

donde $\underline{x} = (x_1, \dots, x_N)$, x_i es la i-ésima componente de \underline{x} y si $\underline{n} = (n_1, n_2, \dots, n_N)$, es el vector normal unitario que apunta hacia el exterior de Ω , entonces n_i es la i-ésima componente de \underline{n} . Este resultado es la fórmula de integración por partes en espacios de varias dimensiones, conocido también como el Teorema de Green.

Para la obtención del Teorema de la Divergencia, sea $\underline{F}(x_1, x_2, \dots, x_N)$ una función vectorial en el espacio N-dimensional. Su divergencia se define por

$$\nabla \cdot \underline{F} = \sum_{j=1}^N \frac{\partial F_j}{\partial x_j}. \quad (\text{A.2})$$

Entonces por la ec. (2.1) se tiene que

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{F} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{F} \cdot \underline{n} \, d\underline{x}. \quad (\text{A.3})$$

este es el Teorema de la Divergencia.

El Teorema de la Divergencia, en su forma común, no es aplicable cuando \underline{F} es discontinua, ésta es una limitación ya que en la práctica suelen surgir funciones discontinuas; esta limitación puede ser superada con la siguiente generalización del Teorema de la Divergencia.

Para esto consideremos una región $\Omega(t)$, dividida en dos subregiones $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$, por una superficie de discontinuidades $\Sigma(t)$ y supongase que $f(\underline{x}, t)$ y su derivada son continuas por separado en cada una de las subregiones de $\Omega(t)$, pero no a través de $\Sigma(t)$. Apliquemos el Teorema de la Divergencia separadamente en cada una de las subregiones

$$\int_{\Omega_+} \nabla \cdot \underline{F} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega_+} \underline{F} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} + \int_{\Sigma} \underline{F}_+ \cdot \underline{n} \, d\underline{x};$$

$$\int_{\Omega_-} \nabla \cdot \underline{F} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega_-} \underline{F} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} \underline{F}_- \cdot \underline{n} \, d\underline{x}.$$

El cambio de signo se debe a que en Σ el vector normal unitario \underline{n} se toma apuntando hacia el exterior de $\Omega_-(t)$, y $\underline{F}_+ = \lim \underline{F}$ cuando \underline{x} tiende a Σ en Ω_+ , $\underline{F}_- = \lim \underline{F}$ cuando \underline{x} tiende a Σ en Ω_- .

Al sumar ambas ecuaciones se obtiene

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{F} \, d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{F} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} [\underline{F}] \cdot \underline{n} \, d\underline{x}, \quad (\text{A.3a})$$

donde $[\underline{F}] = \underline{F}_+ - \underline{F}_-$, siendo este el Teorema de la Divergencia generalizado.

El segundo resultado se refiere al cálculo de derivadas de integrales cuando la región de integración $\Omega(t)$ depende de un parámetro t , para esto consideremos la integral

$$I(t) = \int_{\Omega(t)} f(\underline{x}, t) d\underline{x}. \quad (\text{A.4})$$

Sea $\tau(t) = \partial\Omega(t)$ la frontera de $\Omega(t)$ y \underline{v}_τ la velocidad con que se desplazan los puntos τ , entonces

$$I'(t) = \int_{\Omega} f_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\tau(t)} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\tau \cdot \underline{n} d\underline{x}. \quad (\text{A.5})$$

La ecuación (A.5) es válida sólo cuando $f(\underline{x}, t)$ y su derivada son continuas.

Hay casos en los cuales f y su derivada pueden ser discontinuas, por ello hay que derivar relaciones que puedan aplicarse aun en estos casos.

Para esto consideremos una región $\Omega(t)$ dividida en dos subregiones: $\Omega_+(t)$ y $\Omega_-(t)$, por una superficie de discontinuidades $\Sigma(t)$ y supongase que $f(\underline{x}, t)$ y su derivada son continuas por separado en cada una de las subregiones de $\Omega(t)$, pero no a través de $\Sigma(t)$.

Al aplicar a f la ecuación (A.5) en cada una de las subregiones de $\Omega(t)$ obtenemos

$$I'_+(t) = \int_{\Omega_+} f_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\tau_+} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\tau \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} d\underline{x}; \quad (\text{A.6a})$$

$$I'_-(t) = \int_{\Omega_-} f_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\tau_-} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\tau \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\Sigma} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} d\underline{x}; \quad (\text{A.6b})$$

Aquí en Σ el vector normal unitario \underline{n} se toma apuntando hacia fuera de la región $\Omega(t)$, lo que provoca la aparición de el signo menos en la ec. (A.6a).

Al sumar las ecuaciones (A.6a) y (A.6b) se obtiene

$$I'(t) = \int_{\Omega} f_t(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\tau(t)} f(\underline{x}, t) \underline{v}_\tau \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} [f(\underline{x}, t)] \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} d\underline{x}. \quad (\text{A.7})$$

Hay que hacer notar que $[f(\underline{x}, t)] \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n}$ no cambia siempre que \underline{n} apunte hacia el lado que se tome como positivo.

El último resultado, establece que si $f(\underline{x})$ es una función continua en una región Ω y sea S una subregión cualquiera de Ω y además

$$\int_S f(\underline{x}) \, d\underline{x} = 0,$$

para toda subregión S de Ω . Entonces, $f(\underline{x}) = 0$, para toda \underline{x} en Ω .

A este resultado se le conoce en Mecánica de los Medios Continuos como el lema de Dubois-Reymond.

Una consecuencia o corolario importante del lema de Dubois-Reymond es obtenido de la siguiente manera: Sean f y g funciones continuas en una región Ω y S una subregión cualquiera de Ω y además

$$\int_S f(\underline{x}) \, d\underline{x} = 0,$$

$$\int_S g(\underline{x}) \, d\underline{x} = 0,$$

Para toda subregión S de Ω , se tiene que

$$\int_S f(\underline{x}) \, d\underline{x} = \int_S g(\underline{x}) \, d\underline{x}.$$

Entonces por el lema de Dubois-Reymond

$$f(\underline{x}) = g(\underline{x}) \quad \text{para toda } \underline{x} \text{ en } \Omega.$$

Una extensión del lema de Dubois-Reimond es que si una función $f(\underline{x})$ es continua en una región Ω , excepto en una superficie Σ , a través de la cual f puede tener discontinuidades de salto, y además para toda subregión S de Ω , donde $\Sigma(S)$ es la parte Σ contenida en S se tiene que

$$\int_S f(\underline{x}) \, d\underline{x} + \int_{\Sigma(S)} [f] \, d\Sigma,$$

entonces $f(\underline{x}) = 0$ para toda \underline{x} en Ω ;

$[f] = 0$ para toda \underline{x} en Σ .

APENDICE B
CARACTERISTICAS

Este apéndice tiene como finalidad contener los conocimientos necesarios e indispensables sobre ecuaciones diferenciales parciales y lo referente a sus curvas características, para el desarrollo de esta tesis.

ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES DE SEGUNDO ORDEN

Del conjunto de las ecuaciones diferenciales parciales, las que interesan para el desarrollo de esta tesis son las ecuaciones diferenciales parciales casi-lineales de segundo orden con variable dependiente u y con dos variables independientes x e y , que tienen la forma

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + \phi(x, y, u_x, u_y) = 0, \quad (B.1)$$

donde A, B y C son funciones de x e y , $A^2 + B^2 + C^2$ nunca se anula y ϕ es una función que indica cantidades.

Una ecuación como (B.1) es llamada lineal si tiene la forma

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu + G = 0, \quad (B.2)$$

donde A, B, C, D, E, F y G son funciones de las variables independientes y $A^2 + B^2 + C^2$ nunca se anula.

Siendo para ambos casos (B.1) y (B.2) la solución, una función u de la forma $u = f(x, y)$ tal que u es de clase C^2 y la función u sus derivadas satisfacen las ecuaciones diferenciales parciales.

PROBLEMA DE VALOR INICIAL

Podemos suponer de una manera geométrica que, un problema de valor inicial para una ecuación diferencial parcial de la forma (B.1) es un problema en el cual se busca una solución

$$u = f(x, y) \text{ de clase } C^2, \quad (B.3)$$

en un conjunto de puntos M en el plano, tal que:

- a") Una curva fija C^* , este en la gráfica de (B.3) y
 b") en cada punto de C^* , la gráfica de (B.3) tenga un plano tangente prescrito.

Una alternativa para la condición a"), es considerar una proyección C_0 de la curva C^* en el plano x-y y prescribir, $u=f(x,y)$ en C_0 . Para la condición b") note que, prescribir un plano tangente en varios puntos de (B.3), es equivalente a prescribir f_x y f_y en esos mismos puntos.

Si tomamos una parametrización de la curva C^* y con esta misma representamos la proyección C_0 , quedaría de la siguiente manera.

Sea N un intervalo de números reales y sea C^* la curva con representación paramétrica:

$$C^* : u = u(t), x = x(t), y = y(t), \text{ con } t \text{ en } N \quad (\text{B.4})$$

sin pérdida de generalidad supondremos que si $t \in N$, implica que $(x(t), y(t)) \in M$, pediremos que la curva C^* , "se comporte bien", es decir, que $u(t)$, $x(t)$, $y(t)$ sean de clase C^2 y que

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 + \left(\frac{du}{dt}\right)^2 \neq 0; \quad t \in N$$

Así, la proyección C_0 de C^* , tiene una representación paramétrica

$$C : x = x(t), y = y(t), u = 0; \quad x(t) \text{ e } y(t) \in C^2 \text{ y} \quad (\text{B.5})$$

$$\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 \neq 0; \quad t \in N$$

De esta manera un problema de valor inicial para una ecuación diferencial parcial casi-lineal de segundo orden, de la forma (B.1) es un problema en el que se busca una solución

$$u = f(x,y) \text{ de clase } C^2,$$

en un conjunto M de puntos en el plano, tal que, si N es un intervalo de números reales, C^* es una curva dada como en (B.4), C_0 es la proyección de C^* como en (B.5) en el plano x-y e $t \in N$ implica que $(x(t), y(t)) \in M$, entonces

- a) f toma valores prescritos en cada punto de C_0 y
 b) f_x , f_y toman valores prescritos en cada punto de C_0 .

CARACTERISTICAS

Como hemos visto, un problema de valor inicial tiene una única solución $u = f(x, y)$ en un conjunto de puntos M en el plano. Para algún valor del parámetro $t = \bar{t}$, el punto (\bar{x}, \bar{y}) , donde $\bar{x} = x(\bar{t})$ e $\bar{y} = y(\bar{t})$, no solamente es un punto de C_0 , sino que (\bar{x}, \bar{y}) también es un punto interior de M ; y que $u = f(x, y)$ tiene un desarrollo en series de Taylor en alguna vecindad circular de (\bar{x}, \bar{y}) , es decir,

$$\begin{aligned}
 f(x, y) = & f(\bar{x}, \bar{y}) + \left[(x - \bar{x}) \frac{\partial f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x} + (y - \bar{y}) \frac{\partial f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y} \right] \\
 & + \frac{1}{2!} \left[(x - \bar{x})^2 \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x^2} + 2(x - \bar{x})(y - \bar{y}) \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x \partial y} + (y - \bar{y})^2 \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y^2} \right] \\
 & + \dots \\
 & + \frac{1}{n!} \left[(x - \bar{x})^n \frac{\partial^n f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x^n} + C_{n,1} (x - \bar{x})(y - \bar{y}) \frac{\partial^n f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x^{n-1} \partial y} + \dots \right. \\
 & \left. + C_{n,n} (y - \bar{y})^n \frac{\partial^n f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y^n} \right] + \dots \quad (B.6).
 \end{aligned}$$

Si pudiéramos determinar los coeficientes de Taylor en (B.6), el problema de valor inicial sería resuelto. De la información dada en un problema de valor inicial, se sigue que

$$f(\bar{x}, \bar{y}), \frac{\partial f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x}, \frac{\partial f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y},$$

son fácilmente determinadas, de esta manera, podemos decir que los primeros términos de (B.6) son conocidos. Calculando los siguientes tres coeficientes de Taylor en función de los términos conocidos, podemos obtener una expresión que sirva para solucionar la ecuación (B.1), es decir: $Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} = -\phi(x, y, u_x, u_y)$, si $t = \bar{t}$, entonces

$$A \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y^2} = -\phi(x, y, u_x, u_y) \quad (B.7).$$

Por la regla de la Cadena, tenemos que

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \frac{dx}{dt} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \frac{dy}{dt} \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \frac{dx}{dt} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \frac{dy}{dt}$$

si $\bar{t} = \bar{t}$, entonces

$$\left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) \right)_{t=\bar{t}} = \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x^2} \frac{dx(\bar{t})}{dt} + \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y \partial x} \frac{dy(\bar{t})}{dt} \quad (\text{B.9})$$

$$\left(\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \right)_{t=\bar{t}} = \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y^2} \frac{dy(\bar{t})}{dt} + \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y \partial x} \frac{dx(\bar{t})}{dt}$$

Sin embargo, todos los términos presentes en las ecuaciones de (B.7) a las (B.9), son conocidos excepto

$$\frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial x \partial y}, \quad \frac{\partial^2 f(\bar{x}, \bar{y})}{\partial y^2},$$

Por lo tanto, las ecuaciones (B.7) a las (B.9) forman un sistema lineal de ecuaciones, para las tres derivadas de segundo orden desconocidas. Si pedimos una única solución al problema de valor inicial, los coeficientes de Taylor deben de ser únicos. Con respecto al sistema lineal, es pedir que el determinante del sistema nunca se anule, es decir

$$\begin{vmatrix} A & B & C \\ \frac{dx}{dt} & \frac{dy}{dt} & 0 \\ 0 & \frac{dx}{dt} & \frac{dy}{dt} \end{vmatrix} \neq 0$$

Por lo tanto, si queremos una solución del tipo (B.6), se debe de evitar escoger la curva C_0 que permita que

$$\begin{vmatrix} A & B & C \\ \frac{dx}{dt} & \frac{dy}{dt} & 0 \\ 0 & \frac{dx}{dt} & \frac{dy}{dt} \end{vmatrix} = 0$$

o equivalentemente que permita

$$A(dy)^2 - B(dy)(dx) + C(dx)^2 = 0.$$

La ecuación diferencial característica asociada a la ecuación diferencial parcial de segundo orden casi-lineal, de la forma (B.1) es

$$A(dy)^2 - B(dy)(dx) + C(dx)^2 = 0. \quad (B.10)$$

Las curvas características o características asociadas con la ecuación diferencial parcial de segundo orden casi-lineal, de la forma (B.1), son las soluciones de la ecuación diferencial característica asociada.

Para visualizar la solución de la ecuación (B.10) y por lo tanto las curvas características, dividamos la ecuación entre $(dx)^2$, para obtener

$$A(dy/dx)^2 - B(dy/dx) + C = 0 \quad (4.3)$$

Así tenemos que

$$(dy/dx) = \frac{-B \pm (B^2 - 4AC)^{1/2}}{2A} \quad (B.11)$$

es la ecuación que deben satisfacer las curvas características, para la ecuación diferencial parcial de la forma (B.1).

Una clasificación de las ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden es de forma análoga como en geometría analítica se hace con la ecuación general de segundo grado. De esta manera Tomando la forma de la ecuación (B.2):

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yx} + Du_x + Eu_y + Fu + G = 0,$$

se dice que la ecuación es:

a).- elíptica si $B^2 - 4AC < 0$;

b).- parabólica si $B^2 - 4AC = 0$;

a).- hiperbólica si $B^2 - 4AC > 0$.

APPENDICE C

ELLAM

La finalidad de este apéndice es el de mostrar la forma en que se obtiene el operador adjunto formal $\mathcal{L}^* w$ y la función bilineal $\mathcal{D}(u, w)$, asociados al operador diferencial general de segundo orden $\mathcal{L}u$; así como la identidad algebraica de el salto de la función:

$$[\mathcal{D}(u, w)] = \mathcal{D}([u], \dot{w}) + \mathcal{D}(\dot{u}, [w]),$$

que se utilizan en este trabajo de tesis.

OBTENCION DEL OPERADOR ADJUNTO FORMAL

Sea el operador diferencial general de segundo orden definido en una región Ω :

$$\mathcal{L}u \equiv \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} + b_i u \right) + cu, \quad \text{en } \Omega \quad (\text{c.1a})$$

donde Ω es continuo.

La obtención de su operador adjunto $\mathcal{L}^* w$ es de la siguiente manera: El operador adjunto formal de $\mathcal{L}u$ debe satisfacer la siguiente definición:

$$w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^* w = \nabla \cdot \mathcal{D}(u, w), \quad (\text{c.1b})$$

donde $\mathcal{D}(u, w)$ es una función bilineal y el operador adjunto es $\mathcal{L}^* w$.

Sea

$$w\mathcal{L}u = w \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} + b_i u \right) + cu \right\}, \quad (\text{c.2})$$

$$w\mathcal{L}u = w \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + w \frac{\partial}{\partial x_i} (b_i u) + w cu, \quad (\text{c.3})$$

$$\text{como } \frac{\partial}{\partial x_i} \left(w a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = w \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) + a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \left(\frac{\partial w}{\partial x_i} \right),$$

entonces el primer término derecho de la ecuación (c.3) es:

$$w \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(w a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) - a_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} \left(\frac{\partial w}{\partial x_i} \right), \quad (\text{c.4})$$

como

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u \right) = a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) + u \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} \right),$$

el último término de la derecha de la ecuación (c.4) es:

$$a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u \right) - u \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} \right). \quad (c.5)$$

Así, al substituir la ecuación (c.5) en la ecuación (c.4) obtenemos que el primer término de la derecha de la ecuación (c.3) es:

$$w \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(w a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u \right) + u \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} \right). \quad (c.6)$$

Para obtener una identidad para el segundo término de la derecha de la ecuación (c.3) se procede de forma analoga, como:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} (w b_1 u) = w \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1 u) + b_1 u \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right), \quad (c.7)$$

entonces, por (c.7) el segundo término derecho de la ecuación (c.3)

$$\text{es: } w \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1 u) = \frac{\partial}{\partial x_1} (w b_1 u) - b_1 u \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right), \quad (c.8)$$

Así, por las ecuaciones (c.6) y (c.8) tenemos que:

$$w \mathcal{L}u = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(w a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u \right) + u \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_1} (w b_1 u) - b_1 u \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) + w c u,$$

agrupando términos tenemos que

$$w \mathcal{L}u = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(w \left(a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} + b_1 u \right) \right) - \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u \right) + u \left(a_{1j} \frac{\partial^2 w}{\partial x_j \partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \right) \frac{\partial w}{\partial x_1} - b_1 \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) \right) + w c, \quad (c.9)$$

porque:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} \right) = a_{1j} \frac{\partial^2 w}{\partial x_j \partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_j} (a_{1j}) \frac{\partial w}{\partial x_1}.$$

De la ecuación (c.9) identificamos a la divergencia de la función bilineal $\mathcal{D}(u,w)$ como la parte

$$\nabla \cdot \mathcal{D}(u,w) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(w \left(a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} + b_1 u \right) \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u \right). \quad (\text{c.10})$$

Así

$$\left(\mathcal{D}(u,w) \right)_1 = w \left(a_{1j} \frac{\partial u}{\partial x_j} + b_1 u \right) - a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} u, \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots$$

También de la ecuación (c.9) identificamos a la parte que corresponde a $u \mathcal{L}^* w$ por

$$u \mathcal{L}^* w = u \left(a_{1j} \frac{\partial^2 w}{\partial x_j \partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_j} (a_{1j}) \frac{\partial w}{\partial x_1} - b_1 \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) + wc \right), \quad (\text{c.11})$$

de donde

$$\mathcal{L}^* w = a_{1j} \frac{\partial^2 w}{\partial x_j \partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_j} (a_{1j}) \frac{\partial w}{\partial x_1} - b_1 \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) + wc, \quad (\text{c.12})$$

$$\text{como: } \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1 w) = b_1 \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) + w \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1),$$

$$\text{se tiene que: } b_1 \left(\frac{\partial w}{\partial x_1} \right) = \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1 w) - w \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1). \quad (\text{c.13})$$

Al sustituir (c.13) en (c.12) tenemos que:

$$\mathcal{L}^* w = a_{1j} \frac{\partial^2 w}{\partial x_j \partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_j} (a_{1j}) \frac{\partial w}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1 w) + w \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1)$$

+ wc,

$$\mathcal{L}^* w = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_1} \right) - \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1 w) + w \frac{\partial}{\partial x_1} (b_1) + wc, \quad \therefore$$

$$\mathcal{L}^* w = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(a_{1j} \frac{\partial w}{\partial x_j} - b_1 w \right) + w \left(\frac{\partial}{\partial x_1} (b_1) + c \right). \quad (\text{c.14})$$

De esta manera se ha obtenido el adjunto formal de $\mathcal{L}u$ y la función bilineal $\mathcal{D}(u,w)$, que satisfacen la definición (c.1b), es decir, $w \mathcal{L}u = u \mathcal{L}^* w + \nabla \cdot \mathcal{D}(u,w)$.

Hay que notar que el operador diferencial

$$\mathcal{L}u \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} + Vu \right) + Ru = f_{\Omega} \quad \text{en } \Omega \quad (7.1)^*$$

es un caso particular de (C.1a), por lo tanto la función bilineal $\underline{D}(u, w)$ y el operador adjunto formal de (7.1) están definidos por

$$\underline{D}(u, w) = \left\{ u \left(D \frac{\partial w}{\partial x} + Vw \right) - w D \frac{\partial u}{\partial x} \right\},$$

$$\mathcal{L}^* w \equiv - \frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial w}{\partial x} \right) - V \frac{\partial w}{\partial x} + R w,$$

respectivamente.

IDENTIDAD ALGEBRAICA

La siguiente identidad algebraica

$$[\underline{D}(u, w)] = \underline{D}([u], \dot{w}) + \underline{D}(\dot{u}, [w]),$$

donde $[u] = u_+ - u_-$ y $\dot{u} = (u_+ + u_-)/2$, tal que $u_+ = \lim u$ y $u_- = \lim u$ cuando u tiende a Σ por el lado positivo y por el lado negativo respectivamente, la definición de $[w]$ y \dot{w} son análogas a las de la variable u . Representa el salto de la función bilineal $\underline{D}(u, w)$, y es obtenida de la siguiente manera.

Como hipótesis supongamos que los coeficientes del operador diferencial con el que se asocia la función bilineal \underline{D} son continuos, así, por definición

$$u_+ = [u] - u_- \quad \text{y} \quad u_- = 2\dot{u} - u_+$$

$$u_+ = [u] + 2\dot{u} - u_+ \Rightarrow u_+ = 1/2([u] + \dot{u}) \quad \text{y} \quad u_- = 2\dot{u} - ([u] - u_-) \Rightarrow u_- = \dot{u} - 1/2([u]$$

Se Tienen representaciones análogas para la variable w , es decir, $w_+ = 1/2([w] + \dot{w})$ y $w_- = \dot{w} - 1/2([w]$

De esta manera, sí:

$$\begin{aligned} [\underline{D}(u, w)] &= \underline{D}_+(u, w) - \underline{D}_-(u, w) = \underline{D}(u_+, w_+) - \underline{D}(u_-, w_-), \\ &= \underline{D}(1/2([u] + \dot{u}), 1/2([w] + \dot{w})) - \underline{D}(\dot{u} - 1/2([u]), \dot{w} - 1/2([w])), \\ &= \underline{D}(\dot{u}, \dot{w}) + 1/2 \underline{D}(\dot{u}, [w]) + 1/2 \underline{D}([u], \dot{w}) + 1/4 \underline{D}([u], [w]) \\ &\quad - (\underline{D}(\dot{u}, \dot{w}) - 1/2 \underline{D}(\dot{u}, [w]) - 1/2 \underline{D}([u], \dot{w}) + 1/4 \underline{D}([u], [w])), \\ &= \underline{D}(\dot{u}, [w]) + \underline{D}([u], \dot{w}). \end{aligned}$$

*.- ECUACION DEL CAPITULO 7.

FIGURAS

Figura 1

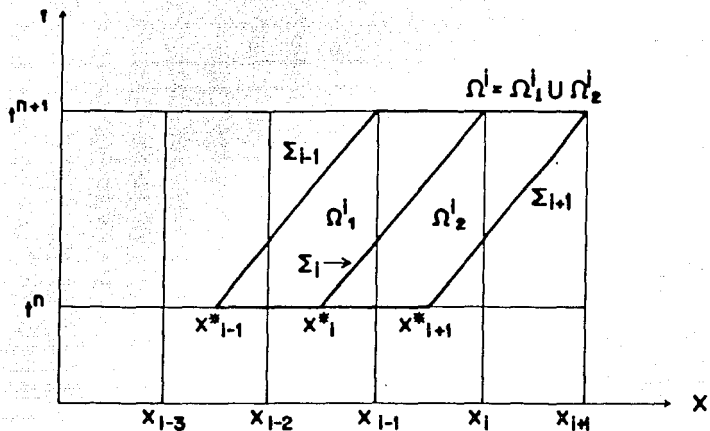
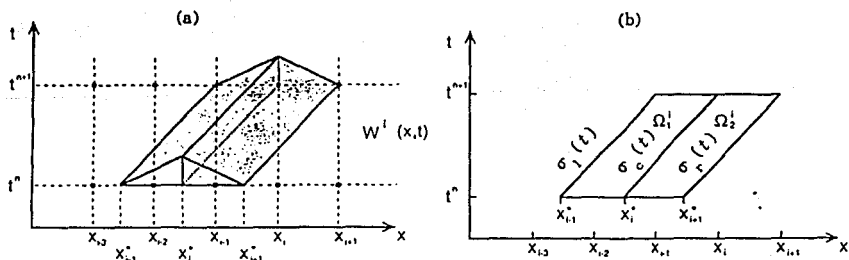
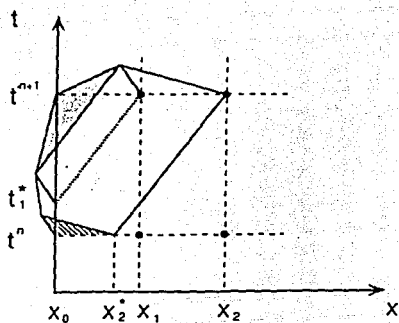


Figura 2

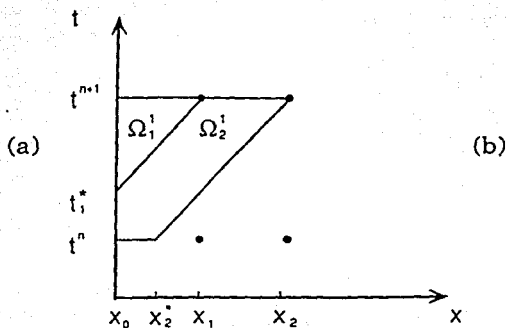


Función de peso w^i para nodos interiores. Soporte de las funciones de peso w^i .

Figura 3

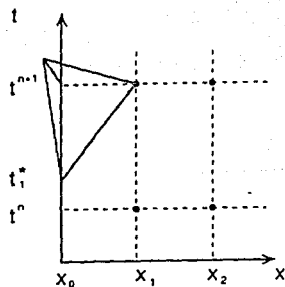


Función de peso w^1 .

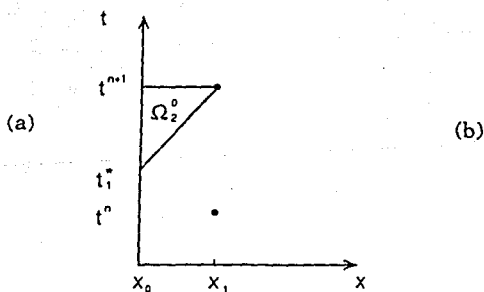


Soporte de la función de peso w^1 .

Figura 4

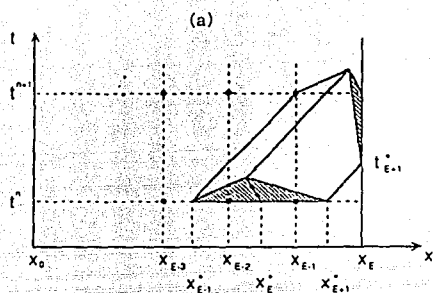


Función de peso w^0 .

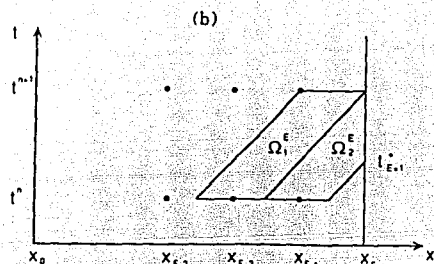


Soporte de la función de peso w^0 .

Figura 5

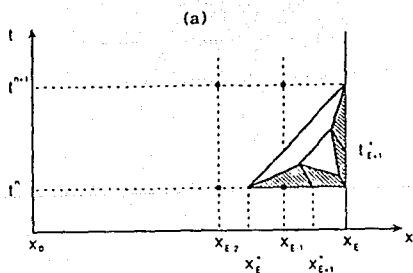


Función de peso w^E .

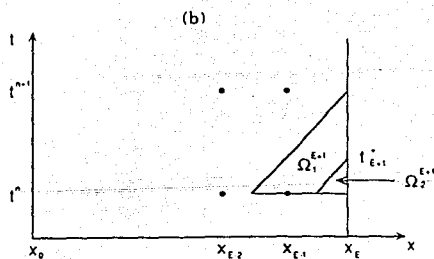


Soporte de la función de peso w^E .

Figura 6

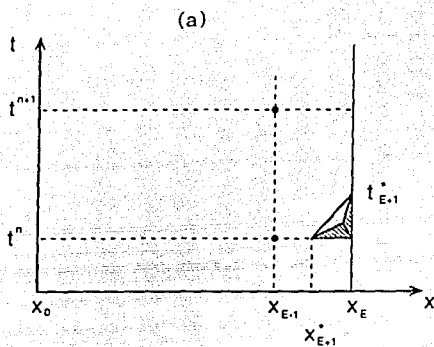


Función de peso w^{E+1} .

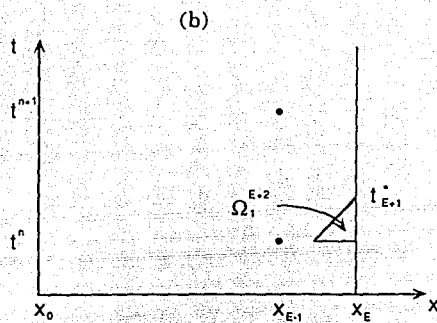


Soporte de la función de peso w^{E+1} .

Figura 7



Función de peso w^{E+2} .



Soporte de la función de peso w^{E+2} .