

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA**

**MÉTODOS DE DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIOS Y SU
APLICACIÓN A MODELOS DE FLUJO Y TRANSPORTE**

**TESIS
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(MODELACION DE SISTEMAS TERRESTRES)
PRESENTA:**

GUILLERMO DE JESÚS HERNÁNDEZ GARCÍA

DIRECTOR:

DR. ISMAEL HERRERA REVILLA

MÉXICO, D. F.

FEBRERO DE 2007



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 esta 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.

A mi madre y a mi padre
A mi esposa y a mis hijas
A mis hermanas y hermanos

Agradecimientos

Un buen número de personas han contribuido, en varias formas, a la culminación de este trabajo. Mi agradecimiento va en especial para el Dr. Ismael Herrera Revilla por su valioso apoyo y dirección. He sido beneficiado por su conocimiento y experiencia, que ha compartido desinteresadamente. Su amistad y apoyo me han ayudado en momentos difíciles. Esta tesis ha sido ampliamente influida por sus ideas.

También deseo agradecer al Dr. Robert A. Yates, su asesoría y opiniones en los objetivos de este trabajo, al Dr. Martín Díaz Viera, por sus comentarios y por insistir en sus sugerencias, al Dr. Alfredo Nicolás Carrizosa por su amistad y revisión minuciosa, al Dr. Pedro Gonzalez Casanova Henríquez por sus acertadas preguntas, al Dr. Vladimir Tchijov Tchijova, por su atención profesional en toda ocasión, al Dr. Humberto Carrillo Calvet, por sus comentarios valiosos sobre los objetivos del trabajo: a todos ellos, además, les agradezco su revisión como parte de mi Comité Doctoral.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, y a sus funcionarios en el Instituto de Geofísica y su Posgrado en Ciencias de la Tierra, por su valioso apoyo al que le retribuyo con mi mejor esfuerzo.

Deseo agradecer a mi familia su apoyo y cariño en todo momento, a mi madre ya mi padre, Guillermo y Olivia, por sus palabras de aliento, a mi esposa, Carolina, compañera de esta y mil batallas más, a mis hijas, Meztli y Xóchitl, a quienes las tengo siempre en mi mente, a mis hermanas y hermanos, Olivia del Carmen, Pedro Arnulfo, Juan Pablo, Leticia y Silvia Alicia, siempre pendientes de mis actos.

ÍNDICE

Agradecimientos.....	iii
Resumen	v
Abstract	vii
Índice	ix
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Generalidades	1
1.2. Trabajos previos	2
1.3. Objetivos	7
1.4. Organización de la tesis.....	7
1.5. Metodología aplicada	9
1.6. Nociones preliminares y notación	11
2. FORMULACIÓN TREFFTZ HERRERA	15
2.1. Fórmulas Green-Herrera.	15
2.2. Formulación Variacional del problema con saltos prescritos	18
2.3 Formulación Variacional de la información de las fronteras internas	19
3. APLICACIÓN A ECUACIONES ELÍPTICAS.	21
3.1 Definición del problema.....	21
3.2 Formulación TH	22
3.3 Alternativas de procedimientos TH.....	24
4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL	27
4.1 Definición del problema en una dimensión.....	27
4.2 Formulación	28
4.3 Formulación con polinomios cuadráticos	32
4.3.1 Construcción de funciones de peso.	32
4.3.2 Resultados numéricos.....	34
4.3.3 Formulación para elementos finitos con funciones óptimas	35
4.3.4 Análisis del error	39
4.3.5 Experimentos Numéricos	40

4.4	Formulación con polinomios de Hermite.....	42
4.4.1	Construcción de funciones de peso.....	42
4.4.2	Resultados numéricos.....	44
4.5	Función de prueba W analítica y su comparación.....	46
4.6	Modelo para el problema de frente de combustión, 1D.....	50
5.	IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES	53
5.1	Formulación del sistema global de ecuaciones.....	55
5.2	Construcción de funciones de peso cuadráticas en el interior.....	56
5.2.1.	Método con funciones de peso lineales en Σ	56
5.2.2.	Método con funciones de peso cúbicas en Σ	57
5.3	Construcción de funciones de peso cúbicas en el interior.....	58
5.3.1	Método con funciones de peso lineales en Σ	58
5.3.2	Método con funciones de peso cúbicas en Σ	59
5.4	Implantación numérica para un punto de colocación.....	61
5.4.1	Un punto de colocación con funciones de peso lineales en Σ	61
5.4.2	Evaluación del operador Adjunto.....	64
5.4.3	Evaluación de la integral con lineales en Σ	65
5.4.4.	Un punto de colocación con funciones de peso cúbicas en Σ ...	66
5.4.5.	Evaluación de la integral con cúbicas en Σ	67
5.5	Implantación numérica para cuatro puntos de colocación.....	68
5.5.1	Cuatro puntos de colocación y funciones de peso lineales en Σ	68
5.5.2	Evaluación de la integral para funciones lineales en Σ	69
5.5.3	Cuatro puntos de colocación y funciones de peso cúbicas en Σ .	69
5.5.4	Evaluación del operador Adjunto.....	70
5.5.5.	Evaluación de la integral.....	71
5.6.	Formulación TH para elementos finitos con funciones óptimas.....	72
5.6.1.	Método con funciones de peso cuadráticas en el interior.....	74
5.6.2.	Método con funciones cúbicas en el interior.....	70
5.6.3.	Formulación TH para elementos finitos.....	75

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS	77
6.1. Ecuación de Flujo	78
6.2. Flujo con coeficientes variables	81
6.2.1 Caso homogéneo	81
6.2.2 Caso no – homogéneo	81
6.3. Ecuación de Transporte	83
6.3.1 Transporte puramente difusivo	85
6.3.2 Transporte con advección – difusión	86
6.3.3 Advección dominante	87
6.4. Problema con saltos prescritos	89
6.5. Aplicación del método de colocación TH a mallas cuadriláteras en regiones irregulares	90
6.5.1. Problemas de Flujo y Transporte	90
6.5.2. Problemas de Transporte con Advección	91
6.5.3. Problema con saltos prescritos	97
6.6. Validación cuando la solución exacta no es conocida	101
6.6.1. Metodología	101
6.7. Resultados para elementos finitos con funciones óptimas	104
6.8. Evaluación del orden del error para diferentes mallas	106
7. CONCLUSIONES	109
7.1. Métodos de colocación TH	109
7.2. Aplicación a Modelos de Flujo y Transporte	110
7.3. Desarrollo futuro	112
BIBLIOGRAFÍA	113
APÉNDICES	121

MÉTODOS DE DESCOMPOSICIÓN DE DOMINIOS Y SU APLICACIÓN A MODELOS DE FLUJO Y TRANSPORTE

Tesis Doctoral de Guillermo de Jesús Hernández García

RESUMEN:

El objetivo de esta tesis es contribuir con nuevos procedimientos a la aplicación de los métodos de descomposición de dominios en la modelación de sistemas continuos en las Ciencias de la Tierra. Los resultados principales consisten en el desarrollo de métodos para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales, con superconvergencia y con capacidad para incorporar nuevas opciones tales como: abordar funciones de peso cuadráticas y cúbicas en el interior. Los resultados también se aplican a problemas de flujo y transporte, se incorpora una nueva metodología de construcción de las funciones óptimas de peso y de base con aplicación tanto del método de elementos finitos como de colocación. Las aplicaciones presentadas aquí se realizan en regiones tanto cuadriláteras como en otras regiones irregulares. Éstas últimas se subdividen en cuadriláteros irregulares utilizando una metodología debida a Pablo Barrera y sus colaboradores.

Los métodos investigados en esta tesis tienen ventajas significativas con respecto a los convencionales. En particular, reducen el número de grados de libertad de los sistemas de ecuaciones que intervienen en los modelos. Con base en las formulaciones de Herrera, se aplican fórmulas de Green generalizadas (fórmulas de Green Herrera), que permiten la aplicación de funciones discontinuas, tanto de base como de peso. Por otra parte, esta tesis constituye una aportación a la implementación numérica dentro del programa de investigación del grupo de modelación matemática y computacional de Herrera y colaboradores.

ABSTRACT

The objective of this thesis is to contribute with new procedures to the application of the domain decomposition methods in the modeling of continuous systems in Earth Sciences. The main results consist of the development of methods for the numerical solution of equations partial differentials, with super convergence and the capacity of incorporate new options such as: to approach quadratic and cubical of weighting functions in the interior. The results also are applied to flow problems and transport, also it is incorporated a new construction methodology for weighting and base optimal functions with application to the collocation method and the finite element method. The applications presented here are made as much in quadrilateral regions as in other irregular regions. These last ones are subdivided in irregular quadrilaterals using a methodology due to Pablo Barrera and his collaborators.

The methods investigated in this thesis have significant advantages with respect to the conventional ones. They particularly reduce the number of degrees of freedom at the equations system that take part in the models. On the basis of the formulations of Herrera, generalized Green formulas are applied (Green Herrera formulas), that allow the application of discontinuous base and weighting functions. On the other hand, this thesis constitutes a contribution to the numerical implementation within the research program of the group of mathematical and computational modeling of Herrera and collaborators.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1. Generalidades

El presente trabajo de tesis doctoral es una contribución a nuevos procedimientos Trefftz-Herrera de descomposición de dominios para la modelación de sistemas continuos de las Ciencias de la Tierra. El objetivo de esta tesis se centra en la formulación y desarrollo de algoritmos para métodos de descomposición de dominios y su aplicación a problemas de tipo elíptico y se enfoca en el desarrollo de métodos numéricos con capacidad para incorporar muchas de las nuevas opciones. Se abordan funciones de peso cuadráticas y cúbicas en el interior, que dan lugar a métodos con uno y cuatro puntos de colocación. Incorpora una nueva metodología de construcción de las funciones óptimas de peso y de base con aplicación del método de elementos finitos. Se desarrollan y aplican los métodos mencionados, primero en regiones representadas por cuadriláteros regulares o rectangulares y luego con cuadriláteros irregulares.

Herrera y colaboradores han propuesto una teoría general de los métodos de Trefftz, (Herrera, 1985; Herrera, Chargoy y Alduncin, 1985) que ha dado lugar a formas novedosas de abordar los modelos de los sistemas continuos usados en Ciencias de la Tierra. Desde el punto de vista de sus aplicaciones numéricas, la teoría constituye una formulación sistemática y general de los *Problemas de Contornos y Saltos Prescritos*, PCSP, o también BVPI, del inglés *boundary value problem with prescribed jumps*. En particular, la colocación TH (Herrera y Yates, 2001; Herrera y Díaz, 1999) es un procedimiento general nuevo para aplicar colocación ortogonal a la discretización de los PCSP en la frontera interna que separa los subdominios de la partición y tiene la posibilidad de aplicarse a operadores con coeficientes discontinuos; es asimismo una forma general del método de Galerkin discontinuo. También introducen nuevos

1. INTRODUCCIÓN

métodos de descomposición de dominios (DDM) y de paralelización de dichos modelos (Herrera y Yates, 2005, Herrera, Díaz y Yates, 2004). Con base en la formulación del algoritmo de descomposición de dominios, se obtiene el algoritmo de simulación numérica donde la condición de salto es dato prescrito. Si las ecuaciones diferenciales elípticas son discretizadas por colocación TH, se obtienen matrices globales simétricas y positivas definidas, cuando el operador diferencial también lo es, algo que no es posible con otros métodos de colocación. Con base en la formulación se logran códigos de simulación numérica que conducen a restricciones a subdominios donde la condición de interfaz es dato prescrito.

1.2. Trabajos previos

De acuerdo con Celia (1983), las primeras evidencias de la aplicación de la colocación en general se deben tanto a Slater (1934) como a Kantorovich (1934); este último llamó a su procedimiento “método de interpolación.” El concepto de colocación ortogonal aparece cuando Lanczos (1938), en una importante contribución, propone su “método de puntos selectos,” donde usó un polinomio de n ésimo orden y escogió sus puntos de colocación en los n ceros del polinomio de Chebyshev de grado n . Años después, Lanczos repitió el mismo desarrollo en su libro de texto (Lanczos, 1956). En la misma época aparecieron trabajos significativos en el ámbito de Rusia. Karpilovskaja (1963) mostró la convergencia del método de colocación usando las raíces de los polinomios de Chebyshev o de Legendre como puntos de colocación. Vainikko (1965), con argumentos que incluían funciones de Green, mostró la convergencia para puntos de colocación en las raíces de cualquier polinomio ortogonal. Shindler(1969) propuso el “método de colocación enriquecido,” donde el método de colocación es modificado para usar un mayor número de puntos de colocación de los que son requeridos. Las ecuaciones son resueltas aplicando mínimos cuadrados.

El trabajo de los rusos, de naturaleza teórica, fue simultáneo al de otros de naturaleza más práctica, que aparecieron en la literatura de la ingeniería química; entre ellos el de Villadsen y Stewart(1967), quienes reportaron resultados de colocación de exactitud comparables al de los resultados tipo Galerkin, y a la vez siendo más simples de calcular. Siguiendo a estos trabajos, múltiples aplicaciones y modificaciones aparecieron en el campo de la ingeniería química; entre ellos los de Ferguson y Finlayson (1970) quienes aplicaron colocación ortogonal a la ecuación de difusión lineal (de transporte) y una ecuación con el término de reacción química de primer orden. También incluyeron una breve discusión sobre estabilidad numérica y la convergencia de su esquema. Encontraron que para una solución de exactitud similar, el método de colocación fue de cuatro a cuarenta veces más rápido que el método de diferencias finitas. Entonces Stewart y Villadsen (1969) usaron el procedimiento de colocación para derivar representaciones gráficas en algunos aspectos del comportamiento de catalizadores porosos. Villadsen y Sorensen (1969) usaron colocación tanto en el dominio del espacio como en el del tiempo para resolver una ecuación parabólica unidimensional (la ecuación lineal del calor); ellos llamaron a este “método de doble colocación,” y encontraron que es muy económico. Finlayson (1972) aborda el método de colocación en su libro de texto y en 1975, Carey y Finlayson (1975) introdujeron un importante concepto para la literatura de la ingeniería química: la colocación en elementos finitos.

Mientras los ingenieros químicos aplicaban la idea de colocación, el análisis teórico, que había sido iniciado por los rusos, no recibió suficiente atención hasta la aparición de la publicación de Russel y Shampine (1972), en la que se hizo un análisis similar al de varios autores rusos, usando funciones de Green. Sin embargo, mientras los rusos usaban expansiones polinomiales completa, Russel y Shampine usaron polinomios por pedazos como base para la aproximación espacial. Se estableció que usando bases por tramos la teoría matemática se hace más simple y poderosa y el cálculo numérico da lugar a matrices más fáciles tanto de formular como de resolver.

1. INTRODUCCIÓN

Mientras Russell y Shampine trataban problemas de valores en la frontera con métodos de colocación de orden m ($m =$ puntos de colocación) utilizando puntos de colocación uniformemente espaciados, Douglas(1972), Douglas y Dupont (1973, 1974), y deBoor y Swartz (1973) llevaron a cabo los trabajos teóricos más significativos de ese periodo. En particular deBoor y Swartz analizaron el comportamiento del método de colocación aplicado a problemas de frontera no-lineales en una dimensión. Ellos mostraron que mediante una cuidadosa selección de los puntos de colocación, conocidos como los puntos de Gauss, se puede obtener un incremento en la convergencia. Estos resultados representaron un avance significativo que va más allá de los obtenidos por Russell y Shampine. deBoor y Swartz son reconocidos como los primeros que muestran rigurosamente que el escoger puntos Gaussianos como los puntos de colocación conduce a una convergencia óptima. Mientras eso se desarrollaba, Douglas y Dupont aplicaban colocación a ecuaciones diferenciales parciales de tipo parabólico. Douglas mostró que para la ecuación parabólica del modelo simple $u_t = u_{xx}$, convergencia de orden cuarto ($O(h^4)$, $h =$ distancia entre nodos) podía ser obtenida usando polinomios cúbicos por tramos C^1 (polinomios de Hermite) como bases y con colocación en los puntos Gaussianos (las raíces del polinomio de Legendre de segundo grado) sobre cada sub-intervalo. Douglas y Dupont (1973) analizaron una ecuación parabólica más general (una dimensión espacial) de la forma $c(x,t,u)u_t = a(x,t,u)u_{xx} + b(x,t,u)u_x$. Nuevamente obtuvieron $O(h^4)$ con colocación en los puntos Gaussianos y usando polinomios de Hermite cúbicos por tramos. Prenter y Russel (1976) analizaron el método de colocación aplicado a la ecuación elíptica lineal (en dos dimensiones) $-[p(x,y)u_x]_x - [p(x,y)u_y]_y + c(x,y)u_x = f(x,y)$. Aplicaron polinomios de Hermite bi-cúbicos por tramos sobre dominios rectangulares y mostraron que con colocación de la ecuación en puntos Gaussianos resultaba un esquema que de nuevo convergía con $O(h^4)$. El cálculo de las operaciones mostró ahorros de cincuenta por ciento en la construcción de las ecuaciones con respecto al método de Galerkin. Una más general forma de colocación en geometrías deformadas ha sido presentadas por Pinder, Frind, y Celia(1978) y por Frind y Pinder(1979).

Un método de *Upwinding* o de *Upstream* (a contracorriente) con esquema de colocación fue desarrollado por Pinder y Shapiro (1979), aplicando funciones de base modificadas de Hermite de forma análoga a la de los métodos de Galerkin (Huyakorn, 1976). Shapiro y Pinder (1982) aplicaron su método de *upwinding* con colocación para la simulación de flujo de dos fluidos inmiscibles a través de un medio poroso y dieron solución al problema planteado por Sincovec (1977), donde reportó problema en la obtención de una solución con colocación estándar. Allen (1982) y Allen y Pinder (1983) también desarrollaron técnicas de colocación con *upstream* ponderado en los puntos de colocación, e induciendo disipación numérica análoga al *upstream* en diferencias finitas: con esto obtuvieron éxito en la simulación de flujo multifásico en medios porosos. Celia (1983) desarrolla su método de colocación en elementos finitos deformados y los métodos de colocación con dirección alternante.

Para aplicaciones en problemas donde pueden existir discontinuidades en las fronteras que separan subregiones, Herrera (1985) usa fórmulas de Green aplicables a situaciones en las que las funciones de peso y las de base pueden ser discontinuas (fórmulas de *Green – Herrera*). Siguiendo una sugerencia de Pinder, Herrera (1987) aplicó colocación ortogonal en el marco de su teoría algebraica. En Herrera (1988), Herrera y Hernández (1988) y Herrera, Celia y Martínez (1989) se aplicó el método (denominado *Método Adjunto Localizado*, *LAM* por sus siglas en inglés) a flujo con advección dominante, obteniendo superconvergencia. Posteriormente surgen los métodos Euleriano-Lagrangianos del Adjunto Localizado (ELLAM) para abordar problemas de transporte dominados por el término de primer orden o de advección tanto en espacio como en tiempo (Herrera, 1990, 1992a, 1992b, 1992c, 1993; Herrera, et al., 1993; Herrera y Herrera, 1994).

Herrera y sus colaboradores también desarrollaron aplicaciones a problemas en Ciencias de la Tierra en relación con modelación de la Cuenca de México en las que se abordan problemas de simular numéricamente el flujo la discontinuidad de un acuífero en contacto con una arcilla y la consolidación de la arcilla lacustre del

1. INTRODUCCIÓN

subsuelo (Herrera y Rodarte, 1973; Herrera y Yates, 1977), así como el modelo numérico del flujo en un acuífero con capas de arcilla en la zona metropolitana de la Ciudad de México (Herrera, Hennart, Yates, 1980) con una versión de varias capas y tridimensional, (Herrera, Martínez y Hernández, 1989) y una unidimensional para el tratamiento de la arcilla y su subsidencia (Hernández y Carrillo, 1997).

Un nuevo y más efectivo método, aplicando descomposición de dominios, denominado Trefftz – Herrera (TH), para la aplicación de colocación ortogonal, fue introducido (Herrera, 2000; Herrera y Yates, 2001), y ha mostrado importantes ventajas sobre los previos métodos. Actualmente el método de colocación es conocido como un procedimiento de solución numérica para ecuaciones diferenciales parciales eficiente y altamente exacto y su formulación es simple. Un precedente importante a este trabajo es la contribución de Díaz (2001), que trabajando en el grupo de Herrera aborda en su tesis el desarrollo de métodos de colocación Trefftz – Herrera y la aplicación a problemas de transporte en las Geociencias.

Recientemente Herrera y colaboradores han desarrollado una teoría sistemática y general de métodos de Galerkin discontinuo, o por sus siglas del inglés dG, que han sido conocidos bajo varios nombres: en una primera etapa de su desarrollo corresponde con el nombre de LAM (Localized adjoint Method), que proporciona la base teórica con la que ELLAM fue desarrollada. Un resumen de la teoría de Herrera fue presentado en una conferencia magistral en el Congreso Nacional de Mecánica Computacional de los Estados Unidos (Herrera, 2005).

1.3. Objetivos

Los objetivos de este trabajo son:

- Contribución a nuevos procedimientos de solución de *Problemas de Contornos con Saltos Prescritos* basados en métodos de Trefftz - Herrera, haciendo énfasis en la versatilidad del método aplicándolo a modelos flujo y transporte con advección.
- Obtener códigos de simulación numérica aplicados a subdominios donde la condición de interfaz es dato prescrito, con colocación en uno o cuatro puntos, su aplicación con funciones de prueba lineales y cúbicas en el interior.
- Obtención de funciones óptimas de peso y base con base en elementos finitos, en vez de colocación, que basados en el método de Trefftz – Herrera reduce el número de grados de libertad.
- Desarrollar y aplicar los métodos mencionados primero en regiones regulares y luego su extensión a regiones formadas por cuadriláteros irregulares campo que no se había explorado y que abre el panorama de aplicaciones para el Método.

1.4. Organización de la tesis

En este primer capítulo se da una introducción a la tesis. Se presentan en forma breve algunos conceptos básicos de los métodos de colocación así como la notación básica para los siguientes capítulos.

En el capítulo 2 se introducen detalladamente las fórmulas de Green – Herrera, la aplicación del teorema generalizado de la divergencia la formulación variacional para problemas con saltos prescritos y de la información en la frontera interna.

En el capítulo 3 se presenta la aplicación de la formulación Trefftz - Herrera para las ecuaciones elípticas, su formulación para varios tipos de condiciones de frontera y de

1. INTRODUCCIÓN

condiciones de salto y se presentan las alternativas para la información solicitada quedando lista la base para la descomposición de dominios.

En el capítulo 4 se aborda la implantación numérica del método a modelos en una dimensión, se desarrolla el método de colocación, se incluyen algunas contribuciones, como la formulación para elementos finitos con funciones óptimas, se hace la formulación para los casos con polinomios cuadrático y cúbicos de Hermite, se hace el análisis del error y se dan ejemplos de solución numérica de ejemplos y de un caso real de BVPI, el de un frente de combustión.

En el capítulo 5 se aborda la implantación numérica en dos dimensiones, el desarrollo del método de colocación, para los casos con un punto y dos puntos de colocación por cada lado, o un punto y cuatro puntos en el interior de cada elemento. A su vez se presenta el desarrollo para funciones de peso y de base, tanto lineales como cúbicas. Se presenta la formulación del método para elementos finitos con funciones óptimas.

En el capítulo 6 se presentan soluciones para diferentes casos, que incluyen contribuciones al tratamiento numérico de problemas de flujo y transporte de regiones regulares e irregulares, problemas con saltos prescritos con regiones regulares e irregulares, un caso con el tratamiento cuando la solución no es conocida y resultados para casos resueltos con elementos finitos con funciones óptimas.

En el capítulo 7 se incluyen las conclusiones, que se presentan tanto para el marco teórico, como para la aplicación a modelos de flujo y transporte, así como para el desarrollo futuro.

1.5. Metodología aplicada

A partir del modelo físico del fenómeno tanto de flujo como de transporte, se obtienen los campos de interés, como son velocidad, presión y concentración. Para esto se determinan los parámetros y principios físicos que gobiernan el fenómeno. Se hace también una delimitación del sistema, y se determina la extensión del sistema, dando lugar a las condiciones de frontera. En aplicaciones a Hidrología Subterránea, los parámetros son propiedades de los acuíferos.

Se considerará una región Ω , con frontera $\partial\Omega$ y una partición $\{\Omega_1, \dots, \Omega_E\}$ una descomposición de dominios, figura 1.1, con una partición $\Pi \equiv \{\Omega_1, \dots, \Omega_E\}$:

$$\Sigma \equiv \bigcup_{i \neq j} (\bar{\Omega}_i \cap \bar{\Omega}_j); \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset \quad (1.1)$$

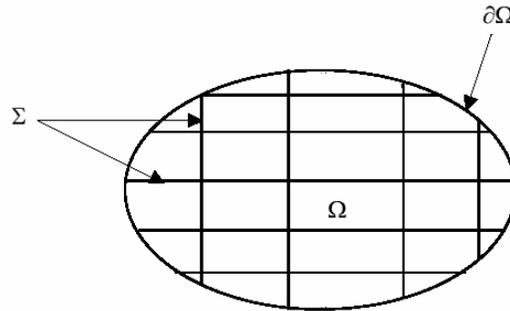


Figura 1.1: El dominio Ω y su partición

Entonces Σ es llamada ‘*frontera interna*’ y $\partial\Omega$ ‘*frontera externa*’. Con el enfoque de los métodos de descomposición de dominios, un primer paso es convertir el problema global en un grupo de problemas locales. Para lograr esto se establece un procedimiento que permite construir la solución global, definida en el dominio entero, mediante la solución exclusiva de problemas locales en cada uno de los subdominios. La estrategia general consiste en reunir información acerca de la solución en la frontera interna, Σ , de la partición, de manera que sea suficiente para definir

1. INTRODUCCIÓN

problemas bien planteados, que sean satisfechos por la solución exacta, en cada una de los subdominios de la partición por separado. Entonces se define de antemano un objetivo de información en Σ , la *información buscada*, que posee esa propiedad. Los procedimientos de búsqueda que se llevan a cabo conducen a obtener esta *información buscada*. Hay dos amplias categorías de métodos para llevar a cabo la búsqueda: procedimientos de localización *directos* e *indirectos*. (Herrera y Yates, 2005).

En el *método de colocación directo*, las *soluciones locales* del operador diferencial local son usadas para establecer las condiciones de compatibilidad que la *información buscada* debe satisfacer. Éstas son derivadas de la *ecuación de interfase de Stecklov-Poincaré* (Quarteroni y Valli, 1999). Para ese propósito, una clase especial de funciones base son usadas y son llamadas *funciones base óptimas*; son de hecho soluciones locales de la ecuación homogénea asociada al operador diferencial original. El sistema de ecuaciones derivada de esta manera permite obtener la solución buscada.

En el *método de colocación indirecto*, una clase especial de funciones de prueba es desarrollada y aplicada; se la llama funciones de prueba óptimas y tienen la propiedad de producir la información buscada en la frontera interna, exclusivamente. Estas funciones de prueba óptimas son de hecho soluciones locales de la ecuación homogénea asociada al operador diferencial adjunto. La idea de la construcción de tales funciones de prueba óptimas surge de observar que en el método de residuos pesados la información acerca de la solución exacta, que la aproximada contiene, depende del sistema de funciones de peso aplicadas (Herrera, 1985; Herrera et al. 1985). En el método de localización indirecto la base del análisis de tal dependencia son las *fórmulas Green – Herrera*, pueden ser aplicadas aún cuando las funciones de base y de prueba sean completamente discontinuas. Estas funciones de prueba óptimas son aplicadas para derivar condiciones de compatibilidad de las cuales la información buscada es obtenida.

1.6. Nociones preliminares y notación

En este punto se introducen conceptos algebraicos fundamentales, los cuales implantan un marco teórico para una amplia clase de formulaciones débiles de ecuaciones diferenciales parciales. Como parte de la notación, D_1 y D_2 serán usados para dos espacios lineales, los llamados espacios de funciones de *prueba* y de *base*, respectivamente (*test and trial*). Con base en esto se puede decir que:

$$P : D_1 \times D_2 \rightarrow \mathbb{R}^1, \quad B : D_1 \times D_2 \rightarrow \mathbb{R}^1, \dots, \quad (1.2)$$

serán funcionales bilineales, mientras que:

$$P^* : D_2 \times D_1 \rightarrow \mathbb{R}^1, \quad B^* : D_2 \times D_1 \rightarrow \mathbb{R}^1, \dots, \quad (1.3)$$

Serán las transpuestas correspondientes. El valor de cualquier funcional bilineal

$$P : D_1 \times D_2 \rightarrow \mathbb{R}^1, \text{ en } (u, w) \in D_1 \times D_2 \quad (1.4)$$

será denotado por:

$$\langle Pu, w \rangle \equiv \langle P^* w, u \rangle. \quad (1.5)$$

Los espacios lineales D_1^* y D_2^* serán los “duales algebraicos” de D_1 y D_2 , respectivamente, es decir, los elementos de D_1^* y D_2^* son funcionales lineales, valuados en los reales, definidos en D_1 y D_2 , respectivamente. Además, con una funcional bilineal, del las del tipo considerado anteriormente, se asociará, de manera única, un operador valuado en los funcionales el cual es lineal. En efecto, dado $P : D_1 \times D_2 \rightarrow \mathbb{R}^1$ se define $P : D_1 \rightarrow D_2^*$ para cada $u \in D_1$ la funcional lineal $Pu \in D_2^*$ por:

$$Pu(w) = \langle Pu, w \rangle, \quad \forall w \in D_2 \quad (1.6)$$

Lo anterior establece una correspondencia uno-a-uno entre los funcionales bilineales $P : D_1 \times D_2 \rightarrow \mathbb{R}^1$ y los operadores valuados en los funcionales, $P : D_1 \rightarrow D_2^*$, que son lineales

1. INTRODUCCIÓN

Definición 1.1.- *TH-Completo*

Un conjunto $\mathcal{E} \subset D_2$ se dice que es ‘*TH-completo*’ para $P: D_1 \rightarrow D_2^*$ cuando se cumple que

$$\langle Pu, w \rangle = 0, \forall w \in \mathcal{E} \Rightarrow Pu = 0 \Leftrightarrow \langle Pu, w \rangle = 0, \forall w \in D_2 \quad (1.7)$$

Definición 1.2.- *Operador de Frontera*

Sea $N_{B^*} \subset D_2$, entonces un operador $B: D_1 \rightarrow D_2^*$ se dice que es un *operador de frontera* para $P: D_1 \rightarrow D_2^*$ cuando $N_{B^*} \subset D_2$ es *TH-completo* para P .

Definición 1.3.- *Problema de valores en la frontera abstracto (ABVP)*

Sea $B: D_1 \rightarrow D_2^*$ un *operador de frontera* para $P: D_1 \rightarrow D_2^*$, y dado $(f, g) \in P(D_1) \times B(D_1)$, entonces el ABVP consiste en encontrar u tal que:

$$Pu = f \text{ y } Bu = g. \quad (1.8)$$

Frecuentemente las anteriores ecuaciones son referidas como ‘*ecuación diferencial*’ y ‘*condiciones de frontera*’, respectivamente.

Lema 1.1.- *En la definición del ABVP, las ecuaciones pueden ser reemplazadas por:*

$$\langle (P - B)u, w \rangle = \langle f - g, w \rangle, \forall w \in D_2 \quad (1.9)$$

o de forma equivalente:

$$(P - B)u = f - g \quad (1.10)$$

Las notaciones $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ y $\partial\Omega$ serán usadas para un *dominio* del espacio Euclidiano de dimensión n y para su *frontera*, respectivamente. Por *dominio* se quiere decir que es un conjunto abierto, acotado y conexo con una frontera continua en el sentido dado por Lipschitz (Ciarlet, 1978). Se denota como $\Pi = \{\Omega_1, \dots, \Omega_E\}$ a la partición de

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$, donde $\Omega_i, i = 1, \dots, E$, son *subdominios* (Figura 1.1). Dada la partición, las

fronteras de los subdominios son $\partial\Omega_i, i = 1, \dots, E$. Es claro que $\partial\Omega \subset \bigcup_{i=1}^E \partial\Omega_i$ y que la

‘*frontera interna*’ Σ es definida como el complemento cerrado de

$\partial\Omega$ relativo a $\bigcup_{i=1}^E \partial\Omega_i$.

Para cada $i = 1, \dots, E$, $D_1(\Omega_i)$ y $D_2(\Omega_i)$ son dos espacios lineales de funciones definidas en Ω_i ; los espacios de funciones base y de peso son definidos respectivamente como:

$$\hat{D}_1(\Omega) \equiv \hat{D}_1(\Omega_1) \oplus \dots \oplus \hat{D}_1(\Omega_E); \quad (1.11)$$

$$\hat{D}_2(\Omega) \equiv \hat{D}_2(\Omega_1) \oplus \dots \oplus \hat{D}_2(\Omega_E); \quad (1.12)$$

Funciones pertenecientes a $\hat{D}_1(\Omega)$ y $\hat{D}_2(\Omega)$ son secuencias finitas de funciones pertenecientes a cada uno de los subdominios de la partición. Se asumirá que para cada $i=1, \dots, E$ y $\alpha=1,2$ las trazas en Σ de funciones pertenecientes a $D_\alpha(\Omega_i)$ existe, y el salto y el promedio de las funciones de base o de peso son definidos como:

$$\begin{aligned} [u] &\equiv u_+ - u_- \\ \dot{u} &\equiv (u_+ + u_-) / 2; \end{aligned} \quad (1.13)$$

donde u_+ y u_- son las trazas desde cada lado de Σ . Aquí el vector normal unitario es escogido arbitrariamente, y una vez definido, apunta hacia el lado positivo de Σ .

Para cada $i = 1, \dots, E$, y cada $\alpha=1,2$, $D_\alpha(\Omega_i) \equiv H^s(\Omega_i)$, con $s \geq 0$ tiene especial interés, si se considera

$$\hat{H}^s(\Omega) \equiv H^s(\Omega_1) \oplus \dots \oplus H^s(\Omega_E); \quad (1.14)$$

entonces $\hat{D}_1 = \hat{D}_2 \equiv \hat{H}^s(\Omega)$, y esta es la clase especial de espacios de *Sobolev*, considerado en Herrera (1995). Cuando dicho espacio esta equipado con la norma

$$\|\hat{v}\|_{s,\Omega,\Pi} \equiv \left(\sum_{i=1}^E \|v_i\|_{s,\Omega_i}^2 \right)^{1/2}, \quad \forall \hat{v} \equiv (v_1, \dots, v_E) \in \hat{H}^s(\Omega) \quad (1.15)$$

se convierte en un espacio de *Hilbert*.

Se considerará, en adelante, el más general operador elíptico de segundo orden:

$$\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu. \quad (1.16)$$

1. INTRODUCCIÓN

Se asume que \underline{a} es un tensor positivo definido simétrico. Cuando se trabaja con tal ecuación elíptica de segundo orden, se toma $\hat{D}_a(\Omega) \equiv \hat{H}^2(\Omega)$. Por simplicidad se escribirá $\mathcal{L}u = f_\Omega$, en Ω , para expresar

$$\mathcal{L}u = f_\Omega, \text{ en cada } \Omega_i, \quad i = 1, \dots, E. \quad (1.17)$$

De manera similar se escribirá $\int_\Omega w \mathcal{L}u \, dx$ para $\sum_{i=1}^E \int_{\Omega_i} w \mathcal{L}u \, dx$.

También se denotará el producto de un tensor por un vector como producto punto; por ejemplo, aplicado al caso que se plantea, $\underline{a}_n \equiv \underline{a} \cdot \underline{n}$.

Se puede decir que

$$\sum_{i=1}^E \int_{\partial\Omega_i} w \underline{a}_n \cdot \nabla u \, dx = \int_{\partial\Omega} w \underline{a}_n \cdot \nabla u \, dx - \int_\Sigma [w \underline{a}_n \cdot \nabla u] \, dx \quad (1.18)$$

Esta relación es válida aún en condiciones generalizadas, incluyendo el caso en que el coeficiente \underline{a}_n tiene discontinuidades de salto a través de Σ .

CAPÍTULO 2

FORMULACIÓN TREFFTZ-HERRERA

2.1. Fórmulas Green-Herrera.

En ciencias en general y en especial en Ciencias de la Tierra, en problemas para flujo y transporte, se necesita resolver el PCSP, que expresado matemáticamente tiene la forma siguiente:

$$(P) \begin{cases} \mathcal{L}u = f_{\Omega} & \text{en } \Omega \\ u = g_{\partial} & \text{en } \partial\Omega \\ [u] = j_{\Sigma}^0 & \text{en } \Sigma \\ [a \cdot \nabla u] = j_{\Sigma}^1 & \text{en } \Sigma \end{cases}$$

donde \mathcal{L} es el operador diferencial y \mathcal{L}^* su adjunto formal, definidos como:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &\equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla u + \nabla \cdot (\underline{\underline{b}}u) + cu \\ \mathcal{L}^*w &\equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla w - \underline{\underline{b}} \cdot \nabla w + cw \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde son conocidos el tensor $\underline{\underline{a}}$, el vector $\underline{\underline{b}}$, y el escalar c .

Existe entonces una función bilineal valuada como vector $\underline{\underline{\mathcal{D}}}(u, w)$, la cual satisface la siguiente ecuación:

$$w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w = \nabla \cdot \underline{\underline{\mathcal{D}}}(u, w), \quad \forall \underline{\underline{x}} \in \Omega. \quad (2.2)$$

En la teoría estándar de ecuaciones diferenciales parciales (por ejemplo en Lions y Magenes, 1972, p. 114) se aplican la fórmulas de Green y pueden ser escritas como:

$$\int_{\Omega} w\mathcal{L}u dx - \int_{\Omega} u\mathcal{L}^*w dx = \int_{\partial\Omega} \underline{\underline{\mathcal{B}}}(u, w) dx - \int_{\partial\Omega} \underline{\underline{\mathcal{C}}}^*(u, w) dx, \quad (2.3)$$

donde $\underline{\underline{\mathcal{B}}}(u, w)$, $\underline{\underline{\mathcal{C}}}^*(u, w)$ son funciones bilineales, definidas en $\partial\Omega$, y punto a punto, de manera que:

$$\underline{\underline{\mathcal{D}}}(u, w) \cdot \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{\mathcal{B}}}(u, w) - \underline{\underline{\mathcal{C}}}(w, u), \quad \forall \underline{\underline{x}} \in \partial\Omega; \quad (2.4)$$

Las definiciones de $\underline{\underline{\mathcal{B}}}$ y $\underline{\underline{\mathcal{C}}}$ generalmente dependen de la clase de condiciones de frontera del criterio de lisura del problema específico considerado.

2. FORMULACIÓN TREFFTZ-HERRERA

Ahora introducimos la siguiente notación:

$$\langle Pu, w \rangle = \int_{\Omega} w \mathcal{L}u dx \quad (2.5)$$

$$\langle Q^*u, w \rangle = \int_{\Omega} u \mathcal{L}^* w dx \quad (2.6)$$

$$\langle Bu, w \rangle = \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}(u, w) dx \quad (2.7)$$

$$\langle C^*u, w \rangle = \int_{\partial\Omega} \mathcal{C}^*(u, w) dx \quad (2.8)$$

Con estas definiciones, P y Q^* , B y C^* , son funcionales bilineales, valuadas como reales, definidas en $\hat{D}_1 \times \hat{D}_2$, y donde la ecuación (2.3) puede ser escrita como:

$$\langle (P - B)u, w \rangle \equiv \langle (Q^* - C^*)u, w \rangle; \quad \forall (u, w) \in \hat{D}_1 \times \hat{D}_2 \quad (2.9)$$

o más brevemente

$$P - B = Q^* - C^* \quad (2.10)$$

Herrera (Herrera, 1985; Herrera et al., 1985) ha extendido esas fórmulas de Green a operadores definidos en espacios de funciones definidos por tramos, como los introducidos en el capítulo anterior.

Se asumirán las funciones bilineales $\mathcal{J}(u, w)$ y $\mathcal{K}(u, w)$, definidas en Σ , de manera que:

$$-\left[\underline{\mathcal{D}}(u, w)\right] \cdot \underline{n} = \mathcal{J}(u, w) - \mathcal{K}^*(w, u); \quad \text{en } \Sigma. \quad (2.11)$$

$$\mathcal{J}(u, w) \equiv -\underline{\mathcal{D}}([u], \dot{w}) \cdot \underline{n}, \quad (2.12a)$$

$$\mathcal{K}^*(u, w) \equiv -\underline{\mathcal{D}}(\dot{u}, [w]) \cdot \underline{n} \quad (2.12b)$$

la aplicación del teorema generalizado de la divergencia (Herrera, 1995), ha establecido formulas generales para \mathcal{J} y \mathcal{K} las cuales cumplen la ecuación (2.11), implica las siguientes fórmulas de Green-Herrera (Herrera, 1984):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} w \mathcal{L}u dx - \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}(u, w) dx - \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u, w) dx \\ = \int_{\Omega} u \mathcal{L}^* w dx - \int_{\partial\Omega} \mathcal{C}^*(u, w) dx - \int_{\Sigma} \mathcal{K}^*(u, w) dx \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\langle Ju, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u, w) dx \quad (2.14)$$

$$\langle K^*u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{K}^*(u, w) dx; \quad (2.15)$$

Con estas definiciones, P y Q^* , B y C^* , J y K^* , son funcionales bilineales valuadas como reales definidas en $\hat{D}_1 \times \hat{D}_2$, y la ecuación 2.13 puede ser escrita como:

$$\langle (P - B - J)u, w \rangle \equiv \langle (Q^* - C^* - K^*)u, w \rangle; \quad \forall (u, w) \in \hat{D}_1 \times \hat{D}_2 \quad (2.16)$$

o más brevemente

$$P - B - J \equiv Q^* - C^* - K^*; \quad (2.17)$$

El problema general que es considerado en la teoría de Herrera es un problema de contornos con saltos prescritos.

Las funcionales lineales P , Q , B , C , J , y K tienen la propiedad de que para cualquiera de los números reales α , β , y γ , y cualquier función $U \in D_1$, $W \in D_2$, se tiene que:

$$(\alpha P + \beta B + \gamma J)U = 0 \Leftrightarrow \alpha P U = 0, \beta B U = 0, \text{ y } \gamma J U = 0 \quad (2.18)$$

y

$$(\alpha Q + \beta C + \gamma K)W = 0 \Leftrightarrow \alpha Q W = 0, \beta C W = 0, \text{ y } \gamma K W = 0 \quad (2.19)$$

Las ecuaciones obtenidas en este capítulo son la base de los capítulos que vienen a continuación

2.2. Formulación variacional del problema con saltos prescritos

El problema general que es considerado en la teoría de Herrera es el de un problema con saltos prescritos. Una formulación débil del problema de contornos con saltos prescritos es

$$\langle (P - B - J)u, w \rangle \equiv \langle Pu_{\Omega} - Bu_{\partial} - Ju_{\Sigma}, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2 \quad (2.20)$$

Sea $u \in \hat{D}_1$ una función que cumple con (2.20) y se asume que es única. Esta ecuación puede ser escrita como una igualdad entre funcionales lineales, si $f, g, y j \in D_2^*$ son definidas por $f \equiv Pu_{\Omega}, g \equiv Bu_{\partial}, j \equiv Ju_{\Sigma}$:

$$(P - B - J)u = f - g - j; \quad (2.21)$$

esta ecuación es equivalente a

$$(Q^* - C^* - K^*)u = f - g - j; \quad (2.22)$$

Las ecuaciones (2.21) y (2.22) suministran dos diferentes y equivalentes formulaciones variacionales del problema de contornos con saltos prescritos. La primera es llamada '*formulación débil en términos de los datos*', y la segunda es la llamada '*formulación débil en términos de la información complementaria*', del PCSP. El *método directo* es derivado de la primera, mientras que el *método indirecto* es derivado de la segunda.

Las ecuaciones (2.21) y (2.22), alternativamente pueden ser escrita como:

$$\langle (P - B - J)u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2 \quad (2.23)$$

y

$$\langle (Q - C - K)^*u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2 \quad (2.24)$$

2.3. Formulación variacional de la información de las fronteras internas

Se usa la formulación en términos de la *información complementaria* de la ecuación (2.22) para establecer las condiciones que una función de peso debe cumplir para producir información exclusivamente en las fronteras internas Σ . Es el denominado método indirecto y puede abordarse independientemente (Herrera, et al., 2002.) Con base en la ecuación (2.24) tales funciones de peso deben tener la propiedad de anular Q^*u y C^*u en esa ecuación. Una función de peso posee esa habilidad si y solo si $Cw = 0$ y $Qw = 0$, y por lo tanto queda como sigue:

$$-\langle K^*u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in N_Q \cap N_C \subset \hat{D}_2 \quad (2.23)$$

donde $N_Q \subset \hat{D}_2$ y $N_C \subset \hat{D}_2$ son los subespacios nulos de Q y C , y

$$N_Q = \{w \in \hat{D}_2 \mid Qw = 0\} \quad (2.24)$$

$$N_C = \{w \in \hat{D}_2 \mid Cw = 0\} \quad (2.25)$$

El lado izquierdo de la ecuación (2.23) ahora contiene la información complementaria en Σ , K^*u , exclusivamente, la cual generalmente es suficiente para definir un problema bien planteado en cada uno de los subdominios, cuando los datos de frontera son agregados al problema de descomposición de dominios. Sin embargo se pueden encontrar ejemplos específicos para los que la información complementaria K^*u es más de lo que es esencial, y manejar información excesiva en general conduce a manejar muchos grados de libertad, lo cual es inconveniente desde el punto de vista de la computación. Para desarrollar métodos de eficiencia óptima, es necesario eliminar parte de tal información introduciendo una “descomposición fuerte” $\{S, R\}$ de la funcional bilineal K , donde S y R son funcionales bilineales que cumplen con la siguiente definición:

$$K \equiv S + R \quad (2.26)$$

2. FORMULACIÓN TREFFTZ-HERRERA

y la *información solicitada* es definida como S^*u donde $u \in \hat{D}_1$ es la solución del problema de condiciones de borde con saltos prescritos, CBSP.

Dado $\tilde{N} \subset \hat{D}_2$, se define por $\tilde{N} \equiv N_Q \cap N_C \cap N_R$, y un concepto auxiliar muy útil en las formulaciones Trefftz - Herrera para procedimientos de descomposición de dominios es el siguiente.

Definición 2.1. Un subconjunto de funciones de peso, $\mathcal{E} \subset \tilde{N} \equiv N_Q \cap N_C \cap N_R$, se dice que es TH-completo para S^* si cuando $u \in \hat{D}_1$,

$$\langle S^* \hat{u}, w \rangle = 0, \quad \forall w \in \mathcal{E} \Rightarrow S^* \hat{u} = 0 \quad (2.27)$$

Una condición necesaria y suficiente para la existencia de sistemas TH-completos es que $\tilde{N} \equiv N_Q \cap N_C \cap N_R$ sea por sí mismo un sistema TH-completo.

Teorema 2.1. Sea $\mathcal{E} \subset \tilde{N}$ un sistema de funciones de peso TH-completo para S^* , y sea $u \in \hat{D}_1$ la solución del CBSP; entonces una condición necesaria y suficiente para $\hat{u} \in \hat{D}_1$ contenga la información solicitada es que:

$$-\langle S^* \hat{u}, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E}. \quad (2.28)$$

Prueba: Si $u \in \hat{D}_1$ es la solución del CBSP, se tiene que

$$-\langle S^* u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E}. \quad (2.29)$$

y entonces

$$-\langle S^*(\hat{u} - u), w \rangle = 0; \quad \forall w \in \mathcal{E}, \quad (2.30)$$

y, de allí, $S^* \hat{u} = S^* u$.

El teorema 2.1 proporciona una Formulación General de los Métodos Indirectos (o Métodos Trefftz-Herrera) de Descomposición de Dominios, el cual puede ser aplicado a cualquier ecuación lineal o sistema de dichas ecuaciones.

CAPÍTULO 3

APLICACIÓN A ECUACIONES ELÍPTICAS

3.1. Definición del problema

En este capítulo se busca la formulación indirecta para ecuaciones elípticas de segundo orden. La aplicación de la metodología del capítulo anterior será presentada en un espacio de un número arbitrario de dimensiones. El procedimiento es aplicable a cualquier tipo de condiciones de frontera para las que el problema sea bien planteado.

Usando la notación introducida, para cada $i=1, \dots, E$ y $\alpha=1,2$ será asumido que $D_\alpha(\Omega_i) \equiv H^2(\Omega_i)$ y $\hat{D}_1 = \hat{D}_2 \equiv \hat{H}^2(\Omega_i)$.

El operador a ser considerado es:

$$\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu = f_\Omega \quad (3.1)$$

que puede ser sujeto a las condiciones de frontera Dirichlet, Neuman y de Flujo Total:

$$u = u_\partial \quad \text{en } \partial_D \Omega, \quad (3.2a)$$

$$\underline{a} \cdot \nabla u \cdot \underline{n} = q \quad \text{en } \partial_N \Omega, \quad (3.2b)$$

$$(\underline{a} \cdot \nabla u - \underline{b}u) \cdot \underline{n} = F \quad \text{en } \partial_F \Omega, \quad (3.2c)$$

y con las condiciones de salto

$$[u] = [u_\Sigma] \equiv j_\Sigma^0 \quad \text{y} \quad [\underline{a} \cdot \nabla u] \cdot \underline{n} = [\underline{a} \cdot \nabla u_\Sigma] \cdot \underline{n} \equiv j_\Sigma^1 \quad \text{en } \Sigma \quad (3.3)$$

Cuando \mathcal{L} es dado por la ecuación (3.1) el operador adjunto diferencial es

$$\mathcal{L}^* w \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla w) - \underline{b} \cdot \nabla w + cw \quad (3.4)$$

y

$$\mathcal{D}(u, w) \equiv \underline{a} \cdot (u \nabla w - w \nabla u) + \underline{b}uw \quad (3.5)$$

Alternativamente $\underline{a}_n = \underline{a} \cdot \underline{n}$ y $\underline{b}_n = \underline{b} \cdot \underline{n}$

3.2. Formulación Trefftz-Herrera

Para el caso de condiciones de frontera tipo Dirichlet, posibles opciones para \mathcal{E} y \mathcal{E}^* son:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(u, w) &= u(\underline{a} \cdot \nabla w) \cdot \underline{n} = (\underline{a}_n \cdot \nabla w)u \\ \mathcal{E}^*(u, w) &= w(\underline{a} \cdot \nabla u - \underline{b}u) \cdot \underline{n} = w(\underline{a}_n \cdot \nabla u - b_n u)\end{aligned} \quad \text{en } \partial_D \Omega, \quad (3.6)$$

Para el caso de condiciones de frontera tipo Neuman:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(u, w) &= -w(\underline{a} \cdot \nabla u) \cdot \underline{n} = -(\underline{a}_n \cdot \nabla u)w \\ \mathcal{E}^*(u, w) &= -u(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w) \cdot \underline{n} = -u(\underline{a}_n \cdot \nabla w + b_n w)\end{aligned} \quad \text{en } \partial_N \Omega, \quad (3.7)$$

Para el caso de condiciones de frontera tipo Robin o de Flujo Total:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(u, w) &= -w(\underline{a} \cdot \nabla u - \underline{b}u) \cdot \underline{n} = -(\underline{a}_n \cdot \nabla u - b_n u)w \\ \mathcal{E}^*(u, w) &= -u(\underline{a} \cdot \nabla w) \cdot \underline{n} = -(\underline{a}_n \cdot \nabla w)u\end{aligned} \quad \text{en } \partial_F \Omega, \quad (3.8)$$

Usando (2.12),

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(u, w) &\equiv -\mathcal{D}([u], \dot{w}) \cdot \underline{n}, \\ \mathcal{K}^*(u, w) &\equiv -\mathcal{D}(\dot{u}, [w]) \cdot \underline{n}\end{aligned}$$

se definen las siguientes funcionales

$$\begin{cases} \mathcal{J}^0(u, w) \equiv -[u] \overline{(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w)} \cdot \underline{n} \\ \mathcal{J}^1(u, w) \equiv \dot{w} [\underline{a} \cdot \nabla u] \cdot \underline{n} \end{cases} \quad (3.9)$$

$$\begin{cases} \mathcal{K}^0(w, u) \equiv \dot{u} [\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w] \cdot \underline{n} \\ \mathcal{K}^1(w, u) \equiv -[w] \overline{(\underline{a} \cdot \nabla u)} \cdot \underline{n} \end{cases} \quad (3.10)$$

y entonces para el caso de coeficientes constantes, la aplicación de la ecuación (2.12) produce lo siguiente:

$$\begin{cases} \mathcal{J}(u, w) \equiv \mathcal{J}^0(u, w) + \mathcal{J}^1(u, w) \\ \mathcal{K}(w, u) \equiv \mathcal{K}^0(w, u) + \mathcal{K}^1(w, u) \end{cases} \quad (3.11)$$

Para los problemas PCSP de las ecuaciones (3.1)-(3.3), las formulaciones variacionales en términos de los datos y en términos de la información complementaria se hacen disponibles cuando las definiciones (2.5)-(2.8) y (2.14)-(2.15) son introducidas en las ecuaciones (2.23)-(2.24). La siguiente notación es adoptada:

$$\langle J^0 u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}^0(u, w) d\underline{x}, \quad \langle J^1 u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}^1(u, w) d\underline{x}, \quad (3.12)$$

$$\langle K^0 w, u \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{K}^0(w, u) d\underline{x}, \quad \langle K^1 w, u \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{K}^1(w, u) d\underline{x}, \quad (3.13)$$

y entonces $J = J^0 + J^1$ y $K = K^0 + K^1$. De manera similar es conveniente descomponer las funciones bilineales B y C^* en las contribuciones provenientes de $\partial_D \Omega$, $\partial_N \Omega$, y $\partial_F \Omega$: de esta manera se puede escribir:

$B = B_D + B_N + B_F$ y $C^* = C^*_D + C^*_N + C^*_F$, donde:

$$\begin{aligned} \langle B_D u, w \rangle &= \int_{\partial_D \Omega} u(\underline{a} \cdot \nabla w) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \\ \langle B_N u, w \rangle &= - \int_{\partial_N \Omega} w(\underline{a} \cdot \nabla u) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \\ \langle B_F u, w \rangle &= - \int_{\partial_D \Omega} w(\underline{a} \cdot \nabla u - \underline{b}u) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

y

$$\begin{aligned} \langle C^*_D u, w \rangle &= \int_{\partial_D \Omega} w(\underline{a} \cdot \nabla u - \underline{b}u) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \\ \langle C^*_N u, w \rangle &= - \int_{\partial_N \Omega} u(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \\ \langle C^*_F u, w \rangle &= - \int_{\partial_D \Omega} u(\underline{a} \cdot \nabla w) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

Para completar la formulación del problema resta definir los funcionales lineales f , g , y j . Donde $g = g_D + g_N + g_F$:

$$\begin{aligned} \langle g_D, w \rangle &= \int_{\partial_D \Omega} u_{\partial}(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w) \cdot \underline{n} d\underline{x}, \\ \langle g_N, w \rangle &= \int_{\partial_N \Omega} wq \cdot \underline{n} d\underline{x}, \\ \langle g_F, w \rangle &= \int_{\partial_N \Omega} wF \cdot \underline{n} d\underline{x} \end{aligned} \quad (3.16)$$

3.3. Alternativas de procedimientos T-H

Para el procedimiento T-H, o método indirecto, existen varias opciones para la definición de la información solicitada. Para ilustrarlas, dos de las alternativas que son posibles son dadas a continuación.

Alternativa 1. $S = K$ y $R = 0$. En este caso la función $\tilde{u} \in \hat{H}^2(\Omega)$ contiene la información solicitada sí y solo sí

$$\dot{\tilde{u}} \equiv \dot{u} \quad \text{y} \quad \overline{(\underline{a} \cdot \nabla \tilde{u}) \cdot \underline{n}} = \overline{(\underline{a} \cdot \nabla u) \cdot \underline{n}}; \text{ en } \Sigma, \quad (3.17)$$

donde $u \in \hat{H}^2(\Omega)$ es la solución del PCSP. Para coeficientes constantes la segunda ecuación se puede remplazar por

$$\frac{\widehat{\partial \tilde{u}}}{\partial n} = \frac{\widehat{\partial u}}{\partial n}$$

y resulta un procedimiento con la siguiente relación:

$$-\langle K^* u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (3.18)$$

una función $w \in \mathcal{E} \subset N_Q \cap N_C \subset \hat{H}^2(\Omega)$ si se cumple

$$w \in N_Q \Leftrightarrow \mathcal{L}^* w = 0 \text{ en } \Omega \quad (3.19)$$

$$w \in N_C \Leftrightarrow w = 0 \text{ en } \partial\Omega \quad (3.20)$$

Alternativa 2. $S = K^0$ y $R = K^l$. En este caso la información solicitada es el promedio de la función a través de Σ , esto es

$$\dot{\tilde{u}} \equiv \dot{u}, \quad (3.21)$$

entonces una opción para la función bilineal es:

$$-\langle S^* \tilde{u}, w \rangle \equiv - \int_{\Sigma} \tilde{u} [\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w] \cdot \underline{n} \, dx, \quad (3.22)$$

$$-\langle S^* \tilde{u}, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle \quad (3.23)$$

una función $w \in \mathcal{E} \subset N_Q \cap N_C \cap N_R \subset \hat{H}^2(\Omega)$ cumple sí y solo sí

$$w \in N_Q \Leftrightarrow \mathcal{L}^* w = 0 \text{ en } \Omega \quad (3.24)$$

$$w \in N_R \Leftrightarrow [w] = 0 \text{ en } \Sigma \quad (3.25)$$

$$w \in N_C \Leftrightarrow w = 0 \text{ en } \partial\Omega \quad (3.26)$$

En la primera alternativa se obtendrá información del promedio de la solución y de su derivada en la frontera interior, Σ ; en la segunda alternativa se obtiene información solo del promedio de u en Σ .

En la primera alternativa se obtiene información redundante, ya que es suficiente el promedio de u en Σ ; para problemas bien planteados en cada elemento de la partición de Ω , Ω_e para $e=1, \dots, E$. Como el salto, $[u]$, es dato, para obtener los valores de la información buscada en ambos lados de Σ , se pueden aplicar las identidades

$$\begin{aligned} u_+ &= \dot{u} + \frac{1}{2}[u] \\ u_- &= \dot{u} - \frac{1}{2}[u] \end{aligned} \text{ en } \Sigma \quad (3.27)$$

La segunda alternativa resultan más eficiente al involucrar menos información y en consecuencia matrices de menor tamaño. Por sus ventajas, en adelante se considerará a la alternativa 2 como el método T-H. A las funciones que caracterizan a esta alternativa también se les llaman *funciones de prueba óptimas* (Herrera, Yates, 2005.) Para la segunda alternativa presentada del método, cuando la información buscada es el promedio de u a través de Σ , las funciones de peso son continuas, se anulan en $\partial\Omega$ y cumplen con:

$$\mathcal{L}^* w \equiv -\nabla \cdot (\underline{\underline{a}} \cdot \nabla w) - \underline{b} \cdot \nabla w + cw = 0; \text{ en } \Omega - \Sigma \quad (3.28)$$

tomando el método T-H para un problema con condiciones de frontera tipo Dirichlet, y definiendo los funcionales f , g , y j el problema tiene la formulación siguiente:

$$-\langle S^* \tilde{u}, w \rangle \equiv -\int_{\Sigma} \dot{\tilde{u}} [\underline{\underline{a}} \cdot \nabla w + \underline{b}w] \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (3.29)$$

$$\langle f, w \rangle = \int_{\Omega} wf_{\Omega} d\underline{x} \quad (3.30)$$

$$\langle g_D, w \rangle = \int_{\partial_D \Omega} u_{\partial} (\underline{\underline{a}} \cdot \nabla w + \underline{b}w) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (3.31)$$

$$\langle j, w \rangle = -\int_{\Sigma} [u_{\Sigma}] \overline{(\underline{\underline{a}} \cdot \nabla w + \underline{b}w)} \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\Sigma} \dot{w} [\underline{\underline{a}} \cdot \nabla u_{\Sigma}] \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (3.32)$$

3. APLICACIÓN A ECUACIONES ELÍPTICAS

y sustituyendo en la formulación T-H

$$\begin{aligned}
 -\int_{\Sigma} \tilde{u} [\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w] \cdot \underline{n} \, d\underline{x} &= \int_{\Omega} w f_{\Omega} \, d\underline{x} \\
 &\quad - \int_{\partial_D \Omega} u (\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w) \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \\
 &\quad + \int_{\Sigma} [u_{\Sigma}] \overline{(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w)} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} \dot{w} [\underline{a} \cdot \nabla u_{\Sigma}] \cdot \underline{n} \, d\underline{x}
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

$\forall w \in \mathcal{E}$

Para coeficientes definidos como continuos, con base en que $[w] = 0$ debido a que es continua en Σ por pertenecer a N_R , se cumple

$$\mathcal{S}^*(u, w) = \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot [\nabla w] \dot{u} \tag{3.34}$$

y con base en que $w = 0$, es decir que se anula en $\partial\Omega$, debido a que pertenece a N_C

$$\mathcal{E}(u, w) = (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w) u_{\partial} \tag{3.35}$$

Entonces la formulación T-H cambia a

$$\begin{aligned}
 -\int_{\Sigma} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot [\nabla w] \dot{u} \, d\underline{x} &= \int_{\Omega} w f_{\Omega} \, d\underline{x} \\
 &\quad - \int_{\partial_D \Omega} u \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w \, d\underline{x} \\
 &\quad + \int_{\Sigma} j_{\Sigma}^0 \overline{(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w)} \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} \dot{w} j_{\Sigma}^1 \, d\underline{x}
 \end{aligned} \tag{3.36}$$

$$\forall w \in \mathcal{E}$$

Es importante notar la relación

$$\begin{aligned}
 -\langle \mathcal{S}^* u, w \rangle &\equiv -\int_{\Sigma} u [\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w] \cdot \underline{n} \, d\underline{x} \\
 &= \sum_{i=1}^E \int_{\Omega_i} \{ \nabla u \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + \nabla \cdot (\underline{b}u) w + c u w \} \, d\underline{x} \quad \forall (u, w) \in N \times N
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

La expresión última del lado derecho ha sido usada en múltiples aplicaciones tales como los Métodos de Elemento Finito.

CAPÍTULO 4

IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

4.1. Definición del problema en una dimensión

Para abordar la aplicación del método, y como una primera aproximación, en este capítulo se abordará la implantación numérica del caso unidimensional: Se asumirá un dominio consistente en un segmento de recta que, normalizado, es el intervalo $[0,1]$ según la figura 4.1. Para los propósitos de ilustrar la convergencia de los modelos se adoptará una distribución equidistante de los nodos, entonces se pueden asociar con cada nodo interno x_i dos segmentos contiguos de tamaño h según la figura 4.2, y las notaciones adoptadas en el interior de esa unión de segmentos son las indicadas en la figura tanto para el interior de la unión de los segmentos, como la frontera de dicha unión y la intersección correspondiente de la unión. El PCSP queda así:

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u \text{ tal que:} \\ \mathcal{L}u \equiv -\frac{d}{dx} \left(a \frac{d}{dx} u \right) + \frac{d}{dx} bu + cu = f \quad \text{en } \Omega \\ u(0) = g_{\partial 0} \quad u(1) = g_{\partial 1} \quad \text{en } \partial\Omega \\ [u] = j_{0i} \quad i = 1, \dots, E-1 \quad \text{en } \Sigma \\ \left[a \frac{d}{dx} u \right] = j_{1i} \quad i = 1, \dots, E-1 \quad \text{en } \Sigma \end{array} \right.$$

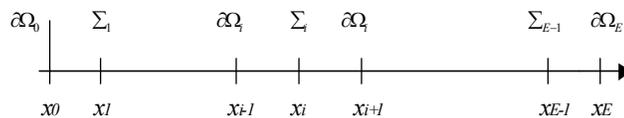


Figura 4.1: Partición del dominio $\Omega = [x_0, x_E]$ en E elementos.

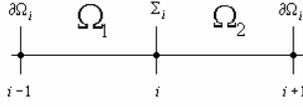


Figura 4.2: Subregión Ω_i asociada con el nodo x_i del dominio.

4.2. Formulación

De acuerdo con la formulación Trefftz – Herrera, en una dimensión una función

$w \in \mathcal{E} \subset \tilde{N} \equiv N_Q \cap N_C \cap N_R \subset \hat{H}^2(\Omega)$ cumple con lo siguiente:

$$w \in N_Q \Leftrightarrow \mathcal{L}^* w = 0 \text{ en } \Omega = [1, 0] \quad (4.1)$$

$$w \in N_R \Leftrightarrow [w] = 0 \text{ en } \Sigma \quad (4.2)$$

$$w \in N_C \Leftrightarrow w = 0 \text{ en } \partial\Omega = \{0, 1\} \quad (4.3)$$

$$-\langle S^* \tilde{u}, w \rangle \equiv - \int_{\Sigma} \tilde{u} \left[a \frac{dw}{dx} + bw \right] \cdot n \, dx, \quad (4.4)$$

$$-\langle S^* \tilde{u}, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle \quad (4.5)$$

$$\mathcal{L}^* w \equiv - \frac{d}{dx} \left(a \frac{d}{dx} w \right) - b \frac{d}{dx} w + cw = 0; \text{ en } \Omega - \Sigma. \quad (4.6)$$

Para la implantación numérica para este trabajo se construirá una familia de funciones de prueba. La familia se construye resolviendo problemas de valores en la frontera locales en cada una de las subregiones $\{\Omega_i^1, \Omega_i^2\}$, separadamente. En la siguiente sección, se ve un ejemplo de esta construcción. Suponiendo que se cuenta esta familia $\{w^{\hat{\alpha}}\}$, utilizando (4.4) y (4.5) se tiene:

$$- \sum_{\gamma=-1}^{\gamma=+1} \left[a \frac{dw^i}{dx} + bw^i \right]_{i+\gamma} \quad u_{i+\gamma} = \langle f - g - j, w^i \rangle \quad i = 2, \dots, E-2 \quad (4.7)$$

$$- \sum_{\gamma=0}^{\gamma=+1} \left[a \frac{dw^1}{dx} + bw^1 \right]_{1+\gamma} \quad u_{1+\gamma} = \langle f - g - j, w^1 \rangle; \quad i = 1 \quad (4.8)$$

$$- \sum_{\gamma=-1}^{\gamma=0} \left[a \frac{dw^{E-1}}{dx} + bw^{E-1} \right]_{E-1+\gamma} \quad u_{E-1+\gamma} = \langle f - g - j, w^{E-1} \rangle; \quad i = E-1 \quad (4.9)$$

En este punto es de utilidad adoptar la siguiente notación:

$$\begin{aligned}\rho_i^- &= - \left[a \frac{dw^i}{dx} + b w^i \right]_{x=i-1} \\ \rho_i &= - \left[a \frac{dw^i}{dx} + b w^i \right]_{x=i} \\ \rho_i^+ &= - \left[a \frac{dw^i}{dx} + b w^i \right]_{x=i+1}\end{aligned} \quad i = 1, \dots, E-1 \quad (4.10)$$

y el sistema de ecuaciones resultante es:

$$\begin{aligned}\rho_1 u_1 + \rho_1^+ u_2 &= \langle f - g - j, w^1 \rangle \\ \rho_i^- u_{i-1} + \rho_i u_i + \rho_i^+ u_{i+1} &= \langle f - g - j, w^i \rangle \quad i = 2, \dots, E-2. \\ \rho_{E-1}^- u_{E-2} + \rho_{E-1} u_{E-1} &= \langle f - g - j, w^{E-1} \rangle\end{aligned} \quad (4.11)$$

Las formas explícitas de f , g , y j se deducen, para una dimensión, a continuación:

$$\mathfrak{E}(u, w) = \left(a \frac{dw}{dx} \right) u; \quad \mathcal{E}^*(u, w) = w \left(a \frac{du}{dx} - b_n u \right); \quad \text{en } \partial_D \Omega, \quad (4.12)$$

como $w \in N_C \Leftrightarrow w = 0$ en $\partial_D \Omega$, $C^*(u, w) = 0$, y solo quedan los siguientes valores

$$\begin{aligned}\mathfrak{E}(u, w^1) &= \left(a \frac{dw^1}{dx} \right) u_0 \quad \text{en } x = x_0 \\ \mathfrak{E}(u, w^{E-1}) &= \left(a \frac{dw^{E-1}}{dx} \right) u_E \quad \text{en } x = x_E\end{aligned} \quad (4.13)$$

y al integrar y evaluar:

$$\begin{aligned}\langle g, w^1 \rangle &= -u_{\partial 0} \left(a \frac{dw^1}{dx} \right)_{x=x_0} \\ \langle g, w^{E-1} \rangle &= u_{\partial 1} \left(a \frac{dw^{E-1}}{dx} \right)_{x=x_E}\end{aligned} \quad (4.14)$$

para j el análisis a partir de (3.9)

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(u, w) &= \mathcal{J}^0(u, w) + \mathcal{J}^1(u, w) \\ \mathcal{J}^0(u, w) &\equiv -[u] \left(a \frac{dw}{dx} + bw \right) \cdot \underline{n} \quad \text{y} \quad \mathcal{J}^1(u, w) \equiv \dot{w} \left[a \frac{du}{dx} \right] \cdot \underline{n},\end{aligned} \quad (4.15)$$

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

incorporando los saltos prescritos:

$$\varrho(u, w) = -j_0 \overline{\left(a \frac{dw}{dx} + bw \right)} \cdot \underline{n} + \dot{w} j_1. \quad (4.16)$$

la integración produce:

$$\langle j, w^j \rangle = \langle Ju, w^j \rangle = \sum_{i=1}^{E-1} \varrho(u, w^i) \quad (4.17)$$

y más específicamente, como $w^i(x_i) = 1$

$$\begin{aligned} \langle j, w^j \rangle &= j_i^1 - j_i^0 \dot{b}(x_i) - \sum_{\gamma=-1}^{\gamma=+1} j_{i+\gamma}^0 \overline{\left(a \frac{d w^j}{dx} \right)}_{i+\gamma} \\ \langle j, w^1 \rangle &= j_1^1 - j_1^0 \dot{b}(x_1) - \sum_{\gamma=-1}^{\gamma=+1} j_{1+\gamma}^0 \overline{\left(a \frac{d w^1}{dx} \right)}_{1+\gamma} \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\langle j, w^{E-1} \rangle = j_{E-1}^1 - j_{E-1}^0 \dot{b}(x_{E-1}) - \sum_{\gamma=-1}^{\gamma=+1} j_{E-1+\gamma}^0 \overline{\left(a \frac{d w^{E-1}}{dx} \right)}_{E-1+\gamma}$$

Un ejemplo del sistema resultante, para ilustración, con $j_0 = j_1 = 0$ es:

$$\begin{aligned} \rho_1 u_1 + \rho_1^+ u_2 &= \int_{x=0}^{x_2} w_1 f_\Omega dx - \int_{\partial\Omega} u_0 a \frac{dw_1}{dx} dx \\ \rho_i^- u_{i-1} + \rho_i u_i + \rho_i^+ u_{i+1} &= \int_{x-1}^{x+1} w_i f_\Omega dx \quad i = 2, \dots, E-2 \quad (4.19) \\ \rho_{E-1}^- u_{E-2} + \rho_{E-1} u_{E-1} &= \int_{x_{E-2}}^{x_E} w_{E-1} f_\Omega dx + \int_{\partial\Omega} u_1 a \frac{dw_{E-1}}{dx} dx \end{aligned}$$

o también:

$$\begin{aligned} \rho_1 u_1 + \rho_1^+ u_2 &= \int_{x=0}^{x_2} w_1 f_\Omega dx - u_{\partial 0} \rho_1^- \\ \rho_i^- u_{i-1} + \rho_i u_i + \rho_i^+ u_{i+1} &= \int_{x-1}^{x+1} w_i f_\Omega dx \quad i = 2, \dots, E-2 \quad (4.20) \\ \rho_{E-1}^- u_{E-2} + \rho_{E-1} u_{E-1} &= \int_{x_{E-2}}^{x_E} w_{E-1} f_\Omega dx + u_{\partial 1} \rho_{E-1}^+ \end{aligned}$$

Para la implantación de las funciones, término este último que incluye a las funciones de base y a las funciones de prueba, éstas son caracterizadas por sus trazas en Σ , que son tomadas como $w \in \mathcal{E} \subset \tilde{N} \equiv N_Q \cap N_C \cap N_R \subset \hat{H}^2(\Omega)$. Es conveniente para propósitos teóricos asumir que las funciones son la exactas. Sin embargo la

colocación ortogonal aplicada en cada subdominio de la partición será aplicado para obtener aproximaciones convenientes.

Para cada caso es necesario un procedimiento previo de construcción de la función de peso a utilizar. Como se observa en la figura 4.2, a cada nodo se asocia el correspondiente soporte o subregión, formada por dos elementos, la frontera interior Σ une a los elementos Ω_1 y Ω_2 de la subregión: para la subregión Ω_i la frontera es $\partial\Omega_i$ y en cada subregión se construye una función continua, que se anula en $\partial\Omega_i$ y que satisface la ecuación adjunta homogénea, ecuaciones (4.1)-(4-3). Dos tipos de posibles aproximaciones del método serán ilustradas por ser de interés:

- El primer caso corresponde a la aplicación de funciones que se definirán por funciones que están generadas por subespacios lineales de polinomios cuadráticos por tramos, que se anulan en $\partial\Omega$ y pertenecen a $C^0(\Sigma)$.
- El segundo caso corresponde a funciones que generan subespacios lineales de polinomios cúbicos por tramos, que se anulan en $\partial\Omega$ y pertenecen a $C^1(\Sigma)$.

Para el primer caso, el caso con cuadráticas, solo un punto de colocación será usado en cada partición. Para el segundo caso, el caso con cúbicas, serán usados dos puntos de colocación.

Entonces para cada caso presentado las familias de funciones exactas serán reemplazadas por funciones aproximadas.

Para el caso con cuadráticas, se usan interpolaciones cuadráticas en el interior de cada una de los subdominios de la partición; las funciones serán construidas usando funciones cuadráticas, del tipo de las que se construyen con polinomios de Lagrange, con un punto de colocación en cada uno de ellos. En este caso se establece una correspondencia uno-a-uno entre los nodos internos y cada una de las funciones de la familia.

Para el caso con cúbicas, se usan interpolaciones cúbicas en el interior de cada una de los subdominios de la partición; las funciones serán construidas usando funciones cúbicas, del tipo de las que se construyen con polinomios de Hermite, con dos puntos de colocación en cada uno de ellos. En este caso se establece una correspondencia uno-a-uno entre los nodos internos y cada una de las funciones de la familia.

4.3. Formulación con polinomios cuadráticos

4.3.1. Construcción de funciones de peso

Para construcción de las funciones de peso (o de prueba) especializadas se considerará su aproximación usando polinomios de segundo grado que permitirán un punto de colocación en cada elemento (x_{i-1}, x_i) . Se requiere obtener las funciones w_i^1 y w_i^2 asociadas al primero y segundo nodo de cada elemento $i = 1, \dots, E$ siendo E el número de elementos total y los nodos con numeración de $0, \dots, E$ y las funciones de peso correspondientes w_i ($i = 1, \dots, E-1$). Aplicando la notación usada por Herrera y Díaz (1999):

$$l_{i,i-1}(x) = \frac{(x - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})}$$

$$l_{i-1,i}(x) = \frac{(x - x_i)}{(x_{i-1} - x_i)} \quad (4.21)$$

$$m_{i-1,i}(x) = l_{i-1,i}(x)l_{i,i-1}(x) \quad (4.22)$$

Entonces se define a las aproximaciones de w_i^1 y w_i^2 como:

$$w_i^1(x) = l_{i-1,i} + m_{i-1,i}(x)\lambda_i^1$$

$$w_i^2(x) = l_{i,i-1} + m_{i-1,i}(x)\lambda_i^2 \quad (4.23)$$

donde λ_i^1 y λ_i^2 son constantes que son determinados para cada polinomio por colocación ortogonal, es decir se requiere resolver:

$$\mathcal{L}^* w_i^\alpha(x) = 0; \quad (\alpha = 1, 2; x = \text{punto Gaussiano al centro}) \quad (4.24)$$

Para w_i la expresión corresponde a los elementos contiguos a cada nodo i , para un punto de colocación

$$w_i = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{h_i} + \lambda_i^- \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h_i h_{i+1}} \\ \frac{x - x_{i+1}}{h_{i+1}} + \lambda_i^+ \frac{(x - x_{i+1})(x - x_i)}{h_i h_{i+1}} \end{cases} \quad (4.25)$$

donde $h_i = x_i - x_{i-1}$ es la medida del elemento, considerando un sólo valor en todo el dominio, tanto para simplicidad como para la evaluación de convergencia, más adelante. Los signos $-$ y $+$ como superíndices indican la evaluación de la constante para el elemento que precede, por la izquierda, o que sucede, por la derecha, al nodo i , respectivamente.

Para coeficientes continuos, los elementos de la matriz, dados por la ecuación (4.10), se pueden evaluar con las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \rho_i^- &= - \left[a \frac{dw^j}{dx} \right]_{x=i-1} = -a \left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_i} \lambda^- \right) \\ \rho_i &= - \left[a \frac{dw^j}{dx} \right]_{x=i} = -a \left(-\frac{1}{h_{i+1}} + \frac{1}{h_{i+1}} \lambda^+ - \frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_i} \lambda^- \right) \quad i = 1, \dots, E-1 \\ \rho_i^+ &= - \left[a \frac{dw^j}{dx} \right]_{x=i+1} = -a \left(\frac{1}{h_{i+1}} + \frac{1}{h_{i+1}} \lambda^+ \right) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Para la evaluación de la convergencia del método con las diferentes funciones de peso y para ejemplos evaluados, se compara la solución obtenida numéricamente con la solución exacta. Esta comparación es evaluada con base en la norma a infinito, $\|\bullet\|_\infty$, y su valor es denominado *error*:

$$error = \|e\|_\infty = \max |u_i - \tilde{u}_i|; \quad i = 1, \dots, E-1 \quad (4.27)$$

el orden de error con respecto a h , es el exponente r en la función $O(h^r)$ del error, y es estimado mediante la pendiente de la regresión lineal evaluada en la gráfica $-\log error$ versus $\log E$, donde E es el numero de elementos de la partición.

En las evaluaciones de los experimentos numéricos escogidos se normaliza el intervalo para el dominio del problema al $[1,0]$, con condiciones de frontera en los extremos: el conjunto $\{1,0\}$.

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

El sistema de ecuaciones resultante es representado en forma matricial por $\underline{A}u = \underline{b}$ donde la matriz tiene dimensión $(E-1) \times (E-1)$, es tridiagonal y es posible resolverla por el algoritmo de Thomas.

En resumen, el código necesario para abordar el problema (P) de la primera sección, discretiza el problema para varias cantidades de elementos, 10, 20, ... y evalúa el error en cada etapa para así tener la gráfica de $-\log \text{error}$ versus $\log E$ y a su vez la pendiente, con el fin de evaluar el orden de la convergencia del modelo.

4.3.2. Resultados numéricos

Para los experimentos numéricos que se presentan se desarrolló un código que resuelve las ecuaciones (P) de la sección 4.1 sujetas a las condiciones de frontera. Se considera resolver la ecuación para el problema de transporte con advección en una dimensión:

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \text{Encontrar } u : \\ \mathcal{L}u = -u'' + \alpha u' = 0 \quad \Omega = (0,1), \\ u(0) = u_{\partial 0} = 1, \\ u(1) = u_{\partial 1} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega, \\ [u] = [u_{\Sigma}] \equiv j_{\Sigma}^0 = 0 \quad y \\ \left[\frac{du}{dx} \right] = \left[\frac{du_{\Sigma}}{dx} \right] \equiv j_{\Sigma}^1 = 0 \quad \text{en } \Sigma \end{array} \right. \quad (4.28)$$

es decir:

$$a = -1; b = -\alpha; c = 0; f_{\Omega} = 0 \quad (4.29)$$

La solución exacta correspondiente es:

$$u = \frac{e^{\alpha x} - e^{\alpha}}{1 - e^{\alpha}}; \quad \alpha = 20, 40, 60, 80, 100. \quad (4.30)$$

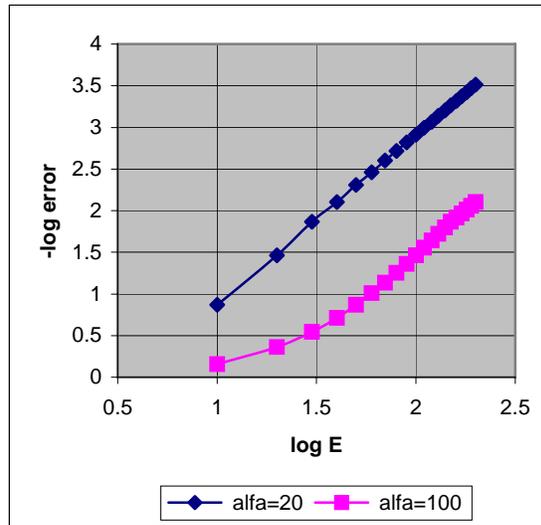


Figura 4.3: Gráficas gráfica de $-\log error$ versus $\log E$ de la convergencia para $\alpha = 20$, con pendiente de 2.01 y para $\alpha = 100$, con pendiente de 2.09, indicando $=O(h^2)$.

4.3.3. Formulación para elementos finitos con funciones óptimas

Como se indicó en los primeros capítulos, hay dos versiones de la colocación Trefftz – Herrera: los métodos directo e indirecto. Como parte de una dualidad existente entre ambos, en el primero se desarrollan funciones de base óptimas y en el segundo se desarrollan funciones de peso óptimas. En teoría cuando las funciones óptimas son exactas usar unas u otras es equivalente. En los métodos numéricos, en los que se utilizan aproximaciones de funciones de base y de peso, esta equivalencia no se cumple y el utilizar simultáneamente funciones de base y de peso óptimas tiene características atractivas. El análisis del error muestra que esta práctica mejora la precisión de los algoritmos. En la literatura el uso de sistemas de funciones diferentes para la de peso y la de base es conocido como método de Petrov-Galerkin.

Considerando ahora resolver la ecuación para el problema de transporte con advección:

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

$$(P) \begin{cases} -u'' + \alpha u' = 0 & \Omega = (0,1), \\ u(0) = u_{\partial 0} = 1, \\ u(1) = u_{\partial 1} = 0 & \text{en } \partial\Omega, \\ [u] = [u_{\Sigma}] \equiv j_{\Sigma}^0 = 0 & \text{y} \\ \left[\frac{du}{dx} \right] = \left[\frac{du_{\Sigma}}{dx} \right] \equiv j_{\Sigma}^1 = 0 & \text{en } \Sigma \end{cases} \quad (4.31)$$

Aquí \mathcal{L} , el operador diferencial y \mathcal{L}^* y su adjunto formal se definen como:

$$\mathcal{L} u \equiv -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4.32)$$

$$\mathcal{L}^* w \equiv -\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial w}{\partial x} \quad (4.33)$$

existe entonces una función bilineal $\mathcal{D}(u,w)$, la cual satisface la siguiente ecuación:

$$w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w = \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{D}(u,w); \quad (4.34)$$

donde

$$\mathcal{D}(u,w) \equiv u \frac{\partial w}{\partial x} - w \frac{\partial u}{\partial x} + \alpha u w \quad (4.35)$$

Para el caso de condiciones de frontera tipo Dirichlet:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(u,w) &= u \frac{\partial w}{\partial x} \cdot n; & \text{en } \partial\Omega \\ n &= 1 & \text{en } x=0, \\ n &= -1 & \text{en } x=1, \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\langle Bu, w \rangle = \int_{\partial_D \Omega} u \frac{dw}{dx} dx = u \frac{dw}{dx} \Big|_0^1, \quad (4.37)$$

Usando (2.4) se define lo siguiente

$$\mathcal{J}^0(u,w) \equiv -[u] \overline{\left(\frac{dw}{dx} + \alpha w \right)} \quad \text{y} \quad \mathcal{J}^1(u,w) \equiv w \left[\frac{du}{dx} \right] \quad (4.38)$$

$$\langle \mathcal{J}^0 u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}^0(u,w) d\underline{x}, \quad (4.39)$$

$$\langle \mathcal{J}^1 u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}^1(u,w) d\underline{x}, \quad (4.40)$$

y entonces $J = J^0 + J^1$.

De los anteriores términos, al hacer las evaluaciones respectivas, usando $[w] = 0$ queda lo siguiente:

$$\langle Ju, w \rangle = \int_{\Sigma} \dot{w} \left[\frac{du}{dx} \right] dx = \sum_{i=1}^{E-1} \dot{w} \left[\frac{du}{dx} \right]_i \quad (4.41)$$

Para el operador P se procede con la expresión siguiente:

$$\langle Pu, w \rangle = \int_{\Omega} w \mathcal{L}u dx; = \int_0^1 w \left(-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx. \quad (4.42)$$

Aplicando integración por partes del primer término:

$$\langle Pu, w \rangle = \int_0^1 \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} dx - w \frac{du}{dx} \Big|_0^1 + \sum_{i=1}^{E-1} w \left[\frac{du}{dx} \right]_i + \int_0^1 \alpha w \frac{\partial u}{\partial x} dx. \quad (4.43)$$

Para completar la formulación del problema resta definir los funcionales lineales f , g , y j . De estos sólo sobrevive g :

$$\langle g_D, w \rangle = \int_{\partial\Omega} u_{\nu} \left(\frac{dw}{dx} \right) d\underline{x} = u(1) \frac{dw(1)}{dx} - u(0) \frac{dw(0)}{dx}, \quad (4.44)$$

Aplicando la “formulación variacional en términos de los datos”

$$\langle (P - B - J)u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad (4.45)$$

y sustituyendo cada término, al reducir términos semejantes lo que queda es la siguiente forma bilineal:

$$\int_0^1 \left\{ \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} w \right\} dx = 0 \quad (4.46)$$

donde w es la función de peso que cumple con:

$$w \in N_Q \Leftrightarrow \mathcal{L}^* w = 0 \text{ en } \Omega \quad (4.47)$$

puede tomarse a w como φ_i resultante de resolver para x en un punto de colocación:

$$\varphi_i = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \lambda_i^- \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h^2} \\ \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + \lambda_i^+ \frac{(x - x_{i+1})(x - x_i)}{h^2} \end{cases} \quad (4.48)$$

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

A continuación se establecen las funciones u aproximadas por las funciones de base correspondientes. Se parte de la aproximación por el método directo:

$$u(x) = u_p(x) + \sum_{j=1}^{E-1} u_j \psi_j(x); \quad (4.49)$$

donde

$$\begin{aligned} u_j &= u(x_j) \\ \mathcal{L}\hat{u} &= f_\Omega = 0; \\ u_p(0) &= u_{\partial 0}; \quad u_p(1) = u_{\partial 1} \end{aligned} \quad (4.50)$$

ψ es una base para u y es resultante de resolver para un punto de colocación:

$$\psi_i = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \mu_i^- \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h^2} \\ \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + \mu_i^+ \frac{(x - x_{i+1})(x - x_i)}{h^2} \end{cases} \quad (4.51)$$

Una vez hecha la formulación de las funciones de base y de peso, el problema es ahora equivalente a encontrar los N coeficientes desconocidos (u_1, \dots, u_{E-1}) tales que:

$$\sum_{i=1}^{E-1} u(x_i) \int_0^1 (\psi_i' \varphi_j' + \alpha \psi_i' \varphi_j) dx = - \int_0^1 (u_p' \varphi_j' + \alpha u_p' \varphi_j) dx; \quad j = 1, \dots, E-1 \quad (4.52)$$

En lo anterior se identifican una matriz y un vector con los elementos siguientes:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \int_0^1 (\psi_i' \varphi_j' + \alpha \psi_i' \varphi_j) dx \\ b_j &= - \int_0^1 (u_p' \varphi_j' + \alpha u_p' \varphi_j) dx; \quad j = 1, \dots, E-1 \end{aligned} \quad (4.53)$$

Y el sistema lineal a resolver:

$$A_{ij} u_i = b_j. \quad (4.54)$$

4.3.4. Análisis del error

Para la prueba de la superconvergencia el resultado anterior obtenido se puede describir, para el valor exacto, así:

$$\int_0^l \frac{\partial u}{\partial x} \left\{ \frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right\} dx = 0 \quad \forall w \in N \supset \tilde{N}, \quad (4.55)$$

y para la aproximación, así:

$$\int_0^l \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} \left\{ \frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right\} dx = 0 \quad \forall w \in \tilde{N}. \quad (4.56)$$

Ahora se busca $e = u - \hat{u}$, y dado que en la frontera $e(0) = e(l) = 0$:

$$\int_0^l \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right) dx = \int_0^l \left(\frac{\partial e}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right) dx = 0 \quad \forall w \in \tilde{N}, \quad (4.57)$$

integrando por partes:

$$\int_0^l \frac{\partial}{\partial x} \left\{ e \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right) \right\} dx - \int_0^l e \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial w}{\partial x} \right) dx = 0, \quad (4.58)$$

arreglando:

$$\sum_{i=1}^{E-1} \left\{ e \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right) \right\}_i = \int_0^l e \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \alpha \frac{\partial w}{\partial x} \right) dx, \quad (4.59)$$

analizando el producto del lado izquierdo de la ecuación se tiene que:

$$e = O(h^2); \quad \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \alpha w \right) = O(h^2). \quad (4.60)$$

La integración aumenta un orden de magnitud el exponente de h en el producto, la sumatoria en cambio disminuye un orden el exponente por lo que el resultado es que el orden global del producto es $O(h^4)$. El resultado anterior se extiende, por interpolación óptima al interior de los elementos.

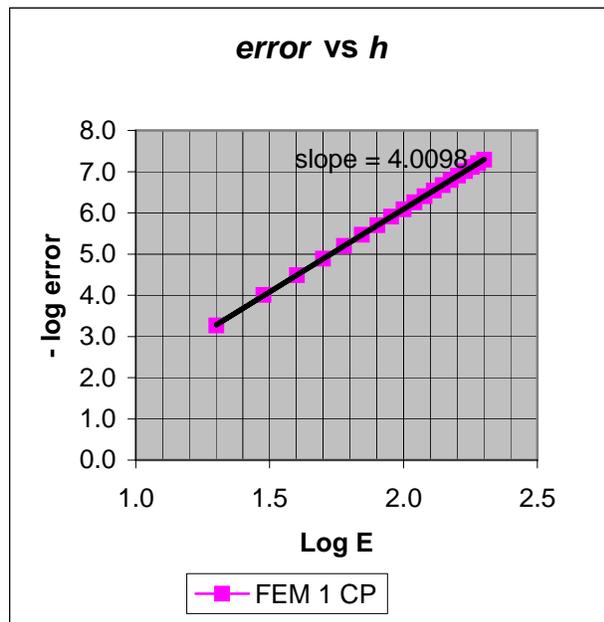
4.3.5. Experimentos Numéricos

Aplicando el algoritmo para el problema de transporte con advección dominante se obtuvo una pendiente de 4 en la evaluación del error (ver figura):

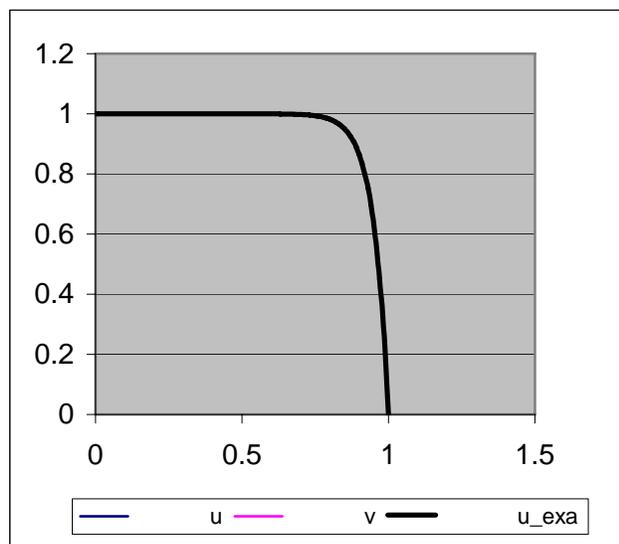
$$-\frac{d^2u}{dx^2} + \alpha \frac{du}{dx} = 0 \quad \alpha = 20 \quad (4.61)$$

$$\varphi_i = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \lambda_i^- \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h^2} \\ \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + \lambda_i^+ \frac{(x - x_{i+1})(x - x_i)}{h^2} \end{cases} \quad (4.62)$$

$$\psi_i = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \mu_i^- \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h^2} \\ \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + \mu_i^+ \frac{(x - x_{i+1})(x - x_i)}{h^2} \end{cases} \quad (4.63)$$



(a)



(b)

Figura 4.4: Graficas para $\alpha = 20$. (a) gráfica de E vs. error con pendiente de 4, indicando $=O(h^4)$, (b) gráfica de la solución.

4.4. Formulación con polinomios de Hermite

4.4.1. Construcción de las funciones de peso

En esta sección la construcción de las funciones de peso especializadas se aproximarán con funciones de peso cúbicas del tipo de Hermite. La siguiente notación será empleada: $H_i^0(x)$ es el polinomio cúbico de Hermite unidimensional con soporte en el intervalo (x_{i-1}, x_{i+1}) , el cual toma el valor de 1 en el nodo x_i y cero en los nodos x_{i-1} y x_{i+1} , y su derivada es cero en todos los nodos x_{i-1} , x_{i+1} y x_i . Asimismo, H_i^1 es el polinomio cúbico de Hermite unidimensional con soporte en el intervalo (x_{i-1}, x_{i+1}) , cuya derivada es 1 en el nodo x_i y cero en los nodos x_{i-1} y x_{i+1} . Sus propiedades son enumeradas a continuación (Reddy, 1997):

- 1) Las funciones de peso globales comprenden dos conjuntos denotados por $H_i^0 (i = 0, \dots, E)$ y $H_i^1 (i = 0, \dots, E)$; estas funciones son acotadas y continuamente diferenciables, es decir: $H_i^0, H_i^1 \in C^1(\bar{\Omega})$;
- 2) Cada una de las funciones es diferente de cero solo en los elementos conectados al nodo i (en el soporte):

$$\left. \begin{array}{l} H_i^0(x)|_{\Omega_e} \\ H_i^1(x)|_{\Omega_e} \end{array} \right\} \equiv 0 \text{ si } x \notin \Omega_e \quad (4.64)$$

- 3) Las funciones tienen las propiedades

$$\begin{aligned} H_i^0(x_j) &= \frac{dH_i^1}{dx}(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \\ H_i^1(x_j) &= \frac{dH_i^0}{dx}(x_j) = 0 \end{aligned} \quad (4.65)$$

- 4) Las restricciones de H_i^0 y H_i^1 al elemento Ω_e son polinomios.

En términos de ξ de -1 a +1:

$$\begin{aligned}
 H_{-1}^0 &= \frac{1}{4}(1-\xi)^2(2+\xi) \\
 H_{-1}^1 &= \frac{1}{4}(1-\xi)^2(\xi+1) \\
 H_{+1}^0 &= \frac{1}{4}(1+\xi)^2(2-\xi) \\
 H_{+1}^1 &= \frac{1}{4}(1+\xi)^2(\xi-1)
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

Para un elemento $\Omega_1 = (x_0, x_1)$ con los nodos 0 y 1 en cada extremo:

$$\begin{aligned}
 H_0^0(x) &= \left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 \left(1-2\frac{x-x_0}{x_0-x_1}\right) \\
 H_0^1(x) &= \left(\frac{x-x_1}{x_0-x_1}\right)^2 (x-x_0) \\
 H_1^0(x) &= \left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 \left(1-2\frac{x-x_1}{x_1-x_0}\right) \\
 H_1^1(x) &= \left(\frac{x-x_0}{x_1-x_0}\right)^2 (x-x_1)
 \end{aligned} \tag{4.67}$$

Entonces se define a las aproximaciones de un nodo i w_i^1 y w_i^2 como:

$$w_i^1(x) = H_i^0(x) + H_{i-1}^1(x)\lambda_{i-1}^1 + H_i^1(x)\lambda_i^1 \tag{4.68}$$

$$w_i^2(x) = H_i^0(x) + H_i^1(x)\lambda_i^2 + H_{i+1}^1(x)\lambda_{i+1}^2 \tag{4.69}$$

donde λ_i^1 y λ_{i+1}^1 son constantes que son determinados para el elemento Ω_1 del nodo i y

λ_i^2 y λ_{i+1}^2 son constantes que son determinados para el elemento Ω_1 del nodo i , todas

por colocación ortogonal, es decir se requiere resolver:

$$\mathcal{L}^* w_i^\alpha(x_p) = 0; \quad (\alpha = 1, 2; x_p \in 2 \text{ puntos Gaussianos}) \tag{4.70}$$

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

Para coeficientes continuos, los elementos de la matriz, dados por la ecuación (4.10), se pueden evaluar con las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}\rho_i^- &= -\left[a \frac{dw^i}{dx} \right]_{x=i-1} = -a(\lambda_{i-1}^1) \\ \rho_i &= -\left[a \frac{dw^i}{dx} \right]_{x=i} = -a(-\lambda_i^2 - \lambda_i^1) \quad i=1, \dots, E-1 \\ \rho_i^+ &= -\left[a \frac{dw^i}{dx} \right]_{x=i+1} = -a(\lambda_{i+1}^2)\end{aligned}\tag{4.71}$$

El sistema de ecuaciones resultante es representado en forma matricial por $\underline{\underline{A}}\underline{\underline{u}} = \underline{\underline{b}}$ donde la matriz tiene dimensión $(E-1) \times (E-1)$ es tridiagonal y es posible resolverla por el algoritmo de Thomas.

En resumen, el código necesario para abordar el problema (P) discretiza el problema para varias cantidades de elementos, 10, 20, ... y evalúa el error en cada etapa para así tener la gráfica de $-\log error$ versus $\log E$ y a su vez la pendiente, con el fin de evaluar el orden de la convergencia del modelo.

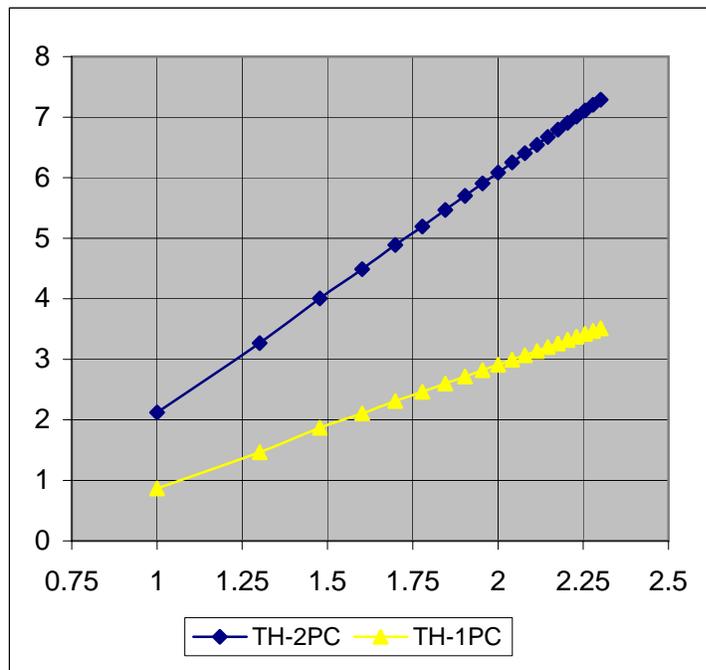
4.4.2. Resultados numéricos

Una ecuación para prueba del método se escogió del problema de transporte con advección dominante:

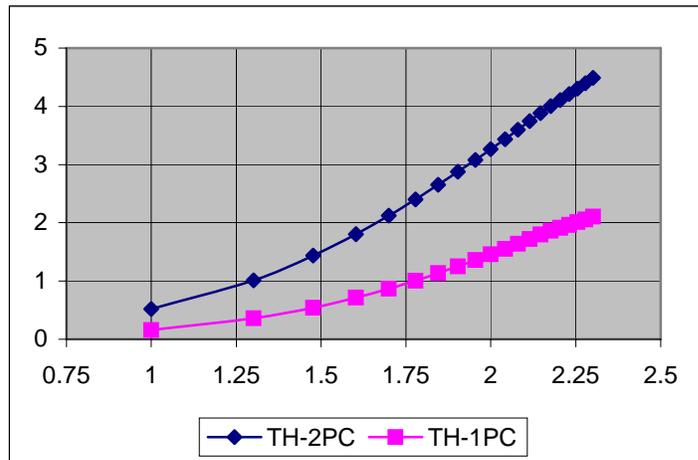
$$-\frac{d^2u}{dx^2} + \alpha \frac{du}{dx} = 0; \quad \alpha = 20, \dots, 100\tag{4.72}$$

Se obtuvieron gráficas comparativas de $-\log error$ versus $\log E$ en el dominio para convergencia para la ecuación con alfa 20 y 100, así como la comparación entre método T-H con cuadráticas, con un punto de colocación, y método T-H con cúbicas, con dos puntos de colocación, ver figura 4.4.

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL



a)



b)

Figura 4.5: $-\log_{10} error$ vs $\log_{10} E$.

a) $\alpha=20$, pendientes 3.9720 y 2.03255

b) $\alpha=100$, pendientes 3.840 y 1.98793

4.5. Función de prueba w analítica y su comparación

Se hace aquí el análisis cuando la función es exacta. Este análisis es posible si se conoce la solución analítica, como base para la formulación de la función de prueba, o de peso. El problema que se conoce es el de transporte con advección dominante:

$$-\frac{d^2u}{dx^2} + \alpha \frac{du}{dx} = 0 \quad (4.73)$$

La ecuación que se está resolviendo por el método indirecto es:

$$\mathcal{L}^* w \equiv -\frac{d}{dx} \left(a \frac{d}{dx} w \right) - b \frac{d}{dx} w + cw = 0; \quad \text{en } \Omega - \Sigma \quad (4.74)$$

donde $a = 1$; $b = \alpha$; $c = 0$; $f = 0$.

Con base en la solución analítica para w , la base de soluciones es $1, e^{\alpha x}$: y entonces la solución analítica, es combinación de las funciones de la base, y puede ser expresada para un nodo i y sus intervalos previo y posterior conforme a la siguiente formulación:

$$w = \begin{cases} 1 - \frac{(1 - e^{\alpha(x_i - x)})}{(1 - e^{\alpha h})}; & x_{i-1} < x < x_i \\ 1 - \frac{(1 - e^{\alpha(x_i - x)})}{(1 - e^{-\alpha h})}; & x_i < x < x_{i+1} \end{cases} \quad (4.75)$$

Para las gráficas que muestran los perfiles de las funciones w analíticas evaluadas para varios valores de alfa, se muestra simultáneamente la obtenida con el método numérico para funciones w basadas en polinomios de Hermite cúbicos. Se puede observar que conforme el valor de alfa aumenta el correspondiente valor del número de Péclet, $\mathbb{P}e$, aumenta y el perfil de la función aproximada se deforma con oscilaciones fuertes para valores altos del $\mathbb{P}e$ y si el valor de h se mantiene fijo.

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

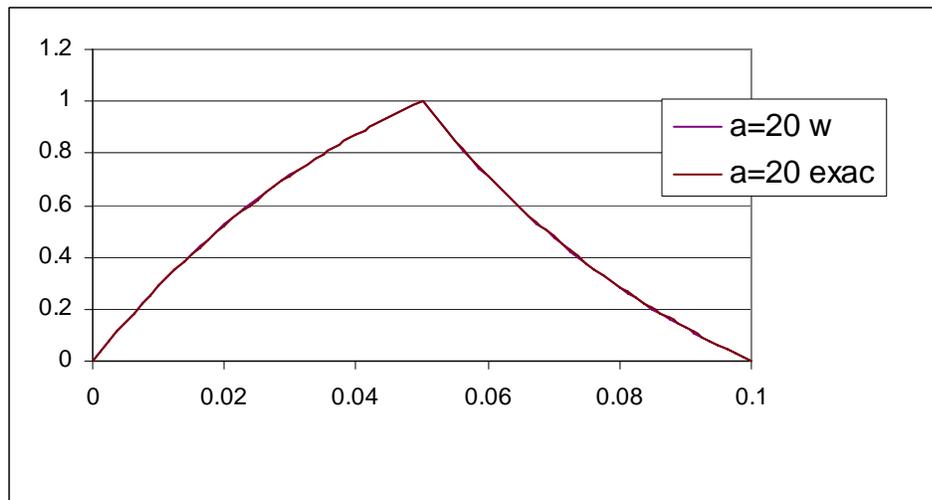


Figura 4.6: $\mathbb{P}e = \nu h / 2D = \alpha h / 2 = 0.5$; $\alpha = 20$, $h = .05$.

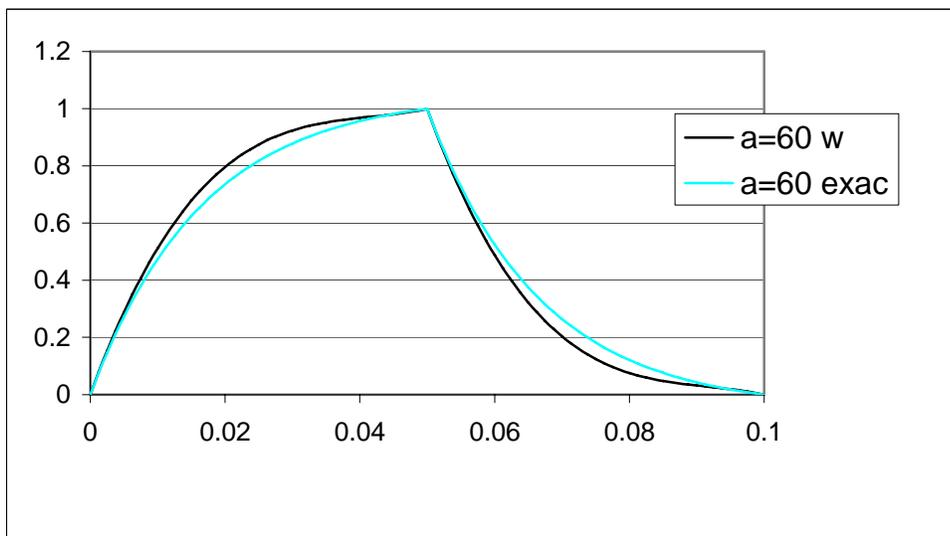


Figura 4.7: $\mathbb{P}e = \nu h / 2D = \alpha h / 2 = 1.5$; $\alpha = 60$, $h = .05$

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

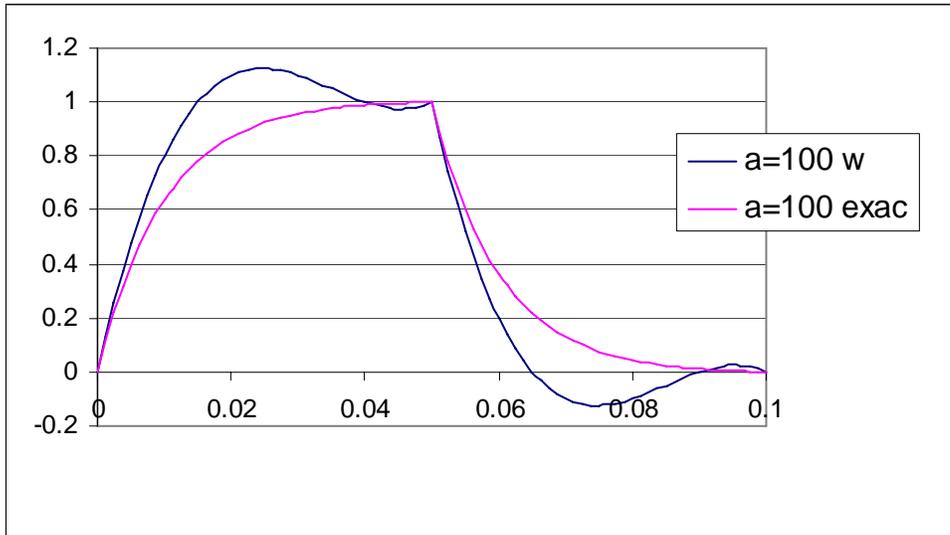


Figura 4.8: $\mathbb{P}e = vh/2D = \alpha h/2 = 2.5$; $\alpha = 100$, $h = .05$

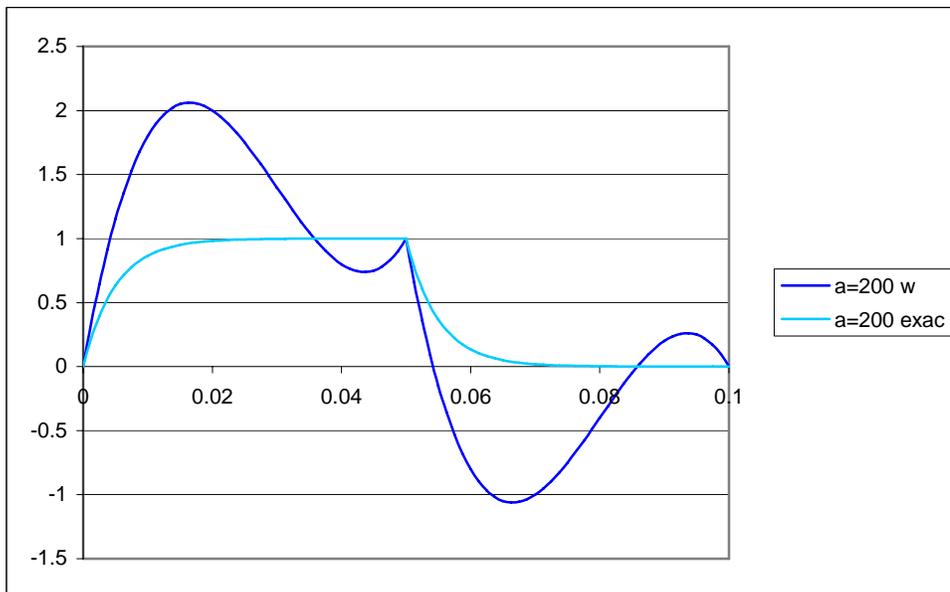


Figura 4.9: $\mathbb{P}e = \alpha h/2 = vh/2D = 5.0$; $\alpha = 200$, $h = .05$

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

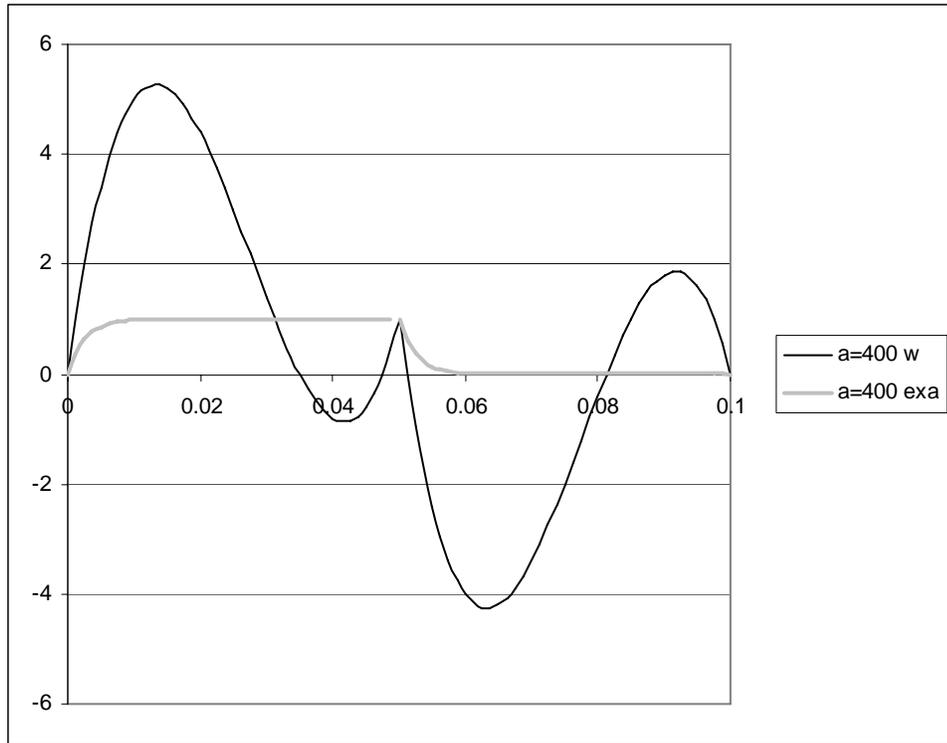


Figura 4.10: $Pe = \alpha h / 2 = v h / 2D = 10$; $\alpha = 400$, $h = .05$

4.6. Modelo para el Problema de Frente de Combustión, 1D

A continuación se presenta el modelo matemático de transporte con advección dominante, con salto de la derivada prescrito, para el problema de Combustión de un yacimiento (Díaz-Viera, M., et al., 2006).

El problema de estado estacionario correspondiente es el siguiente:

$$\begin{cases} -\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + (\phi c^g \rho^g v_g - (1-\phi) c^s \rho^s v_\Sigma) \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0 \\ T_{-\infty} = T_f \quad y \quad T_{+\infty} = T_0 \\ \llbracket T \rrbracket_{\xi=0} = 0 \quad y \quad \lambda \llbracket \frac{\partial T}{\partial \xi} \rrbracket_{\xi=0} = -Q \rho_f^0 v_\Sigma \end{cases} \quad (4.76)$$

o también expresado como:

$$\begin{cases} -\frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + A_T \frac{\partial T}{\partial \xi} = 0 \\ T_{-\infty} = T_f \quad y \quad T_{+\infty} = T_0 \\ \llbracket T \rrbracket_{\xi=0} = 0 \quad y \quad \llbracket \frac{\partial T}{\partial \xi} \rrbracket_{\xi=0} = \frac{-Q \rho_f^0 v_\Sigma}{\lambda} \end{cases} \quad (4.77)$$

donde $A_T = -2.6026E+01$ y $j_1 = -1.0163E+04$ y

$$A_T = \frac{\phi c^g \rho^g v_g - (1-\phi) c^s \rho^s v_\Sigma}{\lambda} \quad (4.78)$$

La solución exacta está dada por:

$$T(\xi) = \begin{cases} T_f & \xi < 0 \\ T_0 - \frac{Q \rho_f^0 v_\Sigma}{\lambda A_T} \exp(A_T \xi) & \xi > 0 \end{cases} \quad (4.79)$$

Aplicando el método Trefftz-Herrera con dos puntos de colocación y funciones de base cúbicas se llegó a obtener una buena solución numérica para $A_T = -2.6026E+01$ y $j_1 = -1.0163E+04$. El resultado de la aproximación numérica es mostrado en las figuras siguientes: se observa primero la solución calculada sin diferencia aparentes con la exacta (figura 4.11), y luego la evaluación del error para la convergencia con una pendiente cercana a seis (figura 4.12).

Tabla 4.1 Parámetros aplicados al problema de frente de combustión en un yacimiento.

Parametro	Valor	Unidades
$c^g \rho^g$	= 1.2339	kJ/m ³ K
ϕ	= 0.3	0.7
λ	= 8.6540E-04	kW/mK
$(1-\phi)c^s \rho^s$	= 2.0200E+03	kJ/m ³ K
Q	= 39542	kJ/kg
ρ_f^0	= 19.2182	kg/m ³
ρ^g	= 1.22516	kg/m ³
μ_g	= 1	
μ	= 3.018	
D_M	= 2.0140E-06	m ² /s
v_g	= 200	m/day
	2.3148E-03	m/seg
v_Σ	= 1	m/day
	1.1574E-05	m/seg
$\phi c^g \rho^g v_g$	= 8.5688E-04	
$(1-\phi)c^s \rho^s v_\Sigma$	= 2.3380E-02	
A_T	$A_T = \frac{\phi c^g \rho^g v_g - (1-\phi)c^s \rho^s v_\Sigma}{\lambda}$	
A_T	= -2.6026E+01	
T_0	= 3.7315E+02	K
T_f	= 7.6500E+02	K
\dot{J}_1	= -1.0163E+04	

4. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL

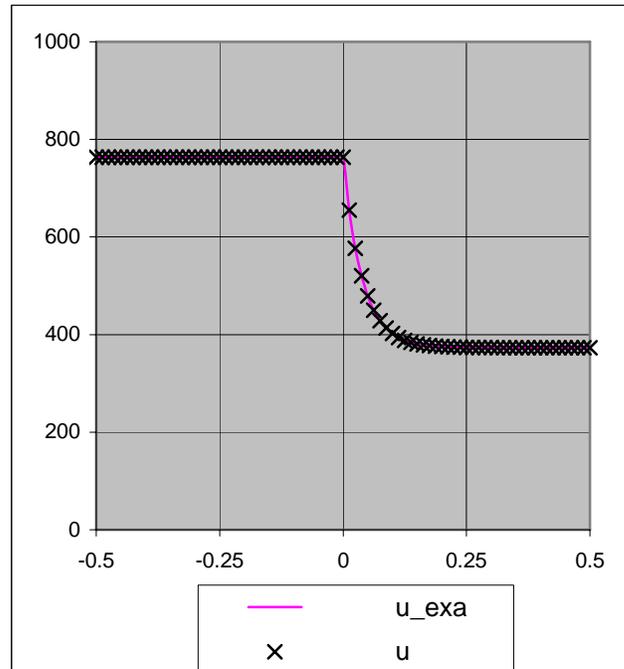


figura 4.11 Gráfica de solución exacta y solución calculada

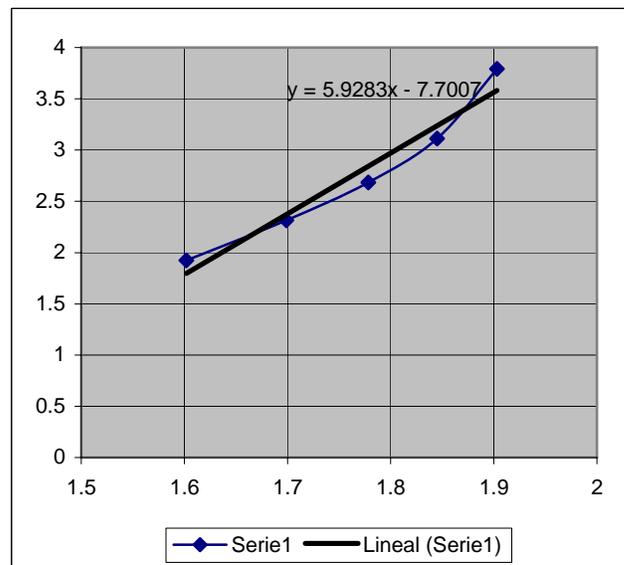


Figura 4.12. Gráfica del error para la convergencia con una pendiente cercana a seis

CAPÍTULO 5

IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

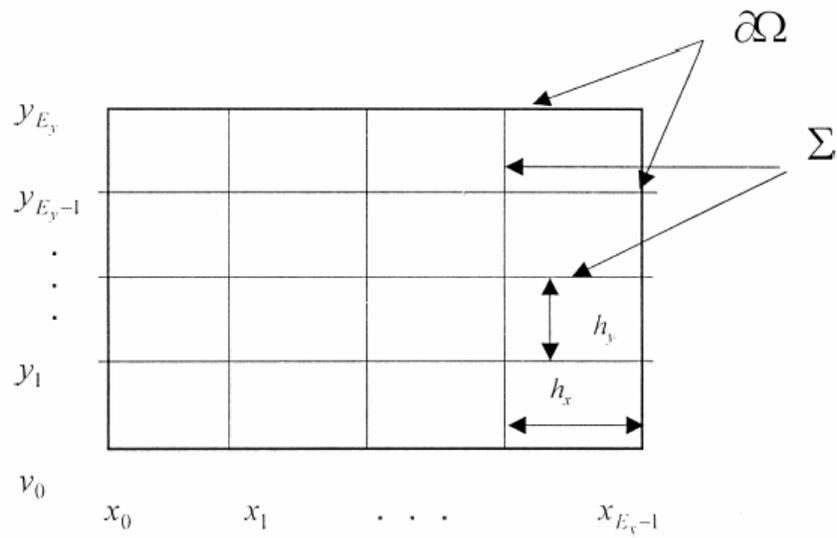
Se aplica la formulación Trefftz-Herrera para métodos de descomposición de dominios, basada en las fórmulas de Green aplicables a funciones discontinuas, así como el uso de funciones de peso las cuales producen información acerca de la solución buscada en la frontera interna, de la descomposición de dominios en dos dimensiones.

El *Problema de Contornos con Saltos Prescritos* es planteado de la forma siguiente:

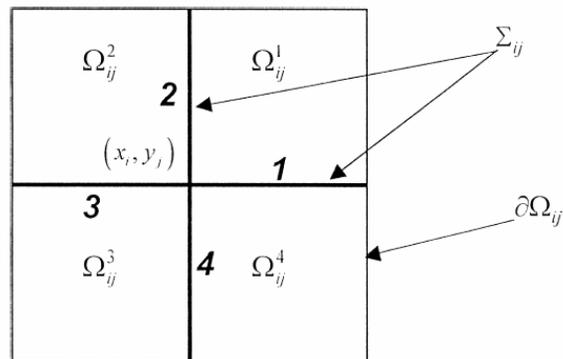
$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Encontrar } u \text{ tal que:} \\
 \mathcal{L} u \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla u + \nabla \cdot (\underline{\underline{b}} u) + c u \\
 \text{cuyos los parámetros son} \\
 \underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} a_{11}(x, y) & a_{12}(x, y) \\ a_{21}(x, y) & a_{22}(x, y) \end{pmatrix}, \underline{\underline{b}} = \begin{pmatrix} b_1(x, y) \\ b_2(x, y) \end{pmatrix}, c = c(x, y), \\
 \text{sujeto a las condiciones de frontera} \\
 u = u_\partial \text{ en } \partial\Omega_1, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = g_N \text{ en } \partial\Omega_2 \\
 \text{y con las condiciones de salto} \\
 [u] = [u_\Sigma] \equiv j_\Sigma^0 \text{ y } [\underline{\underline{a}} \nabla u] \cdot \underline{\underline{n}} = [\underline{\underline{a}} \nabla u_\Sigma] \cdot \underline{\underline{n}} \equiv j_\Sigma^1 \text{ en } \Sigma
 \end{array} \right. \quad (5.1)$$

En la primera parte este capítulo se aborda el caso en que número de puntos de colocación para el método de colocación es de uno solo punto, con base en el uso de funciones cuadráticas en el interior. En la siguiente parte se abordará el caso para el que el método de colocación se aplica con cuatro puntos de colocación, con base en el uso de funciones cúbicas en el interior. A su vez cada caso puede ser formulado para funciones de peso tanto lineales como cúbicas en Σ . En la parte final se aborda la construcción de las funciones con el método de elementos finitos.

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES



(a)



(b)

Figura 5.1: (a) Partición del dominio $\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ en $E_x \times E_y$ elementos. (b) Subregión Ω_{ij} asociada con el nodo (x_i, y_j) del dominio.

5.1. Formulación del sistema global de ecuaciones

El dominio para cada caso y sus funciones de peso puede ser rectangular con regiones elementales también rectangulares para las que el soporte de un nodo es comprendido por cuatro elementos en el caso de nodos interiores como se ilustra en las figuras 5.1a y 5.1b o puede ser más general, y se abordan dominios formados por cuadriláteros, con regiones elementales como las de la figura 5.2.

La ecuación que se resuelve numéricamente es la forma bilineal siguiente:

$$\langle S^* u, w \rangle \equiv - \int_{\Sigma} \dot{u} [\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w] \cdot \underline{n} \, ds \equiv \sum_{K=1}^E \int_{\partial \Omega_K} u (\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w) \cdot \underline{n} \, dx \quad (5.2)$$

Nótese el cambio en la evaluación de la integral en Σ por la evaluación de la integral en $\partial \Omega_K$. El dominio Ω del tipo de la figura 5.1, es subdividido en elementos globales enumerados: $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_E$. Con base en la formulación propuesta en la ecuación (5.5), es posible plantear el desarrollo de las funciones en un elemento rectangular, Ω_e , el cual es definido por cuatro nodos, parte de una numeración global, $(x_l, y_l)^{(e)}$, $l = i, j, k, l$; y que se asocian a los correspondientes nodos locales (ξ, η) , $l = 1, 2, 3, 4$, en el elemento de referencia $\hat{\Omega} = (-1, +1) \times (-1, +1)$, de modo que se relacionan $i \leftrightarrow 1, j \leftrightarrow 2, k \leftrightarrow 3, l \leftrightarrow 4$ (ver figura 5.2).

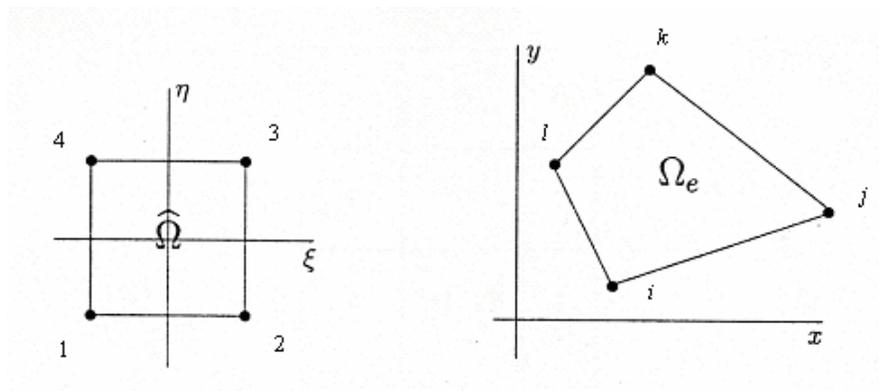


Figura 5.2: Mapeo isoparamétrico desde un elemento cuadrado de referencia.

5.2. Construcción de funciones de peso cuadráticas en el interior

Para el cálculo de las funciones óptimas utilizando colocación ortogonal se formula el método con una aproximación utilizando funciones cuadráticas en el interior de cada subdominio de la partición. Para esta aproximación es necesario y suficiente un punto de colocación. Para la implantación de las llamadas funciones de peso óptimas, éstas son caracterizadas por sus trazas en Σ . Es conveniente para propósitos teóricos asumir que las funciones óptimas son la exactas. Sin embargo se aplicarán aproximaciones con polinomios definidos convenientemente con colocación ortogonal aplicada en cada subdominio de la partición.

5.2.1. Método con funciones de peso lineales en Σ

Las funciones w de peso que se aplican en cada nodo I , tienen una expresión general, para cada elemento, de la forma siguiente:

$$w_I(x, y) = B_I(x, y) + \lambda_I N^{(e)}(x, y) \quad (5.3)$$

donde

$$\begin{aligned} B_I(x, y) &= l_I(x)l_I(y) & I = i, j, k, l \\ N^{(e)}(x, y) &= q(x)q(y) & e = 1, \dots, E \end{aligned}$$

Por cada nodo interno la función bilineal $B_I(x, y)$ continua en Ω pero su derivada normal tiene discontinuidades de salto a través de Σ .

Por otra parte $N(x, y)$ es una función cuadrática continua por tramos, con soporte en $\bar{\Omega}$ que se anula en $\partial\Omega$ y toma el valor de uno en el punto de colocación (en el centro) de Ω_I . Entonces N es una traslación afín de la función $x(1-x)y(1-y)$.

Los parámetros λ_I son cuatro y pueden determinarse aplicando colocación al centro a las ecuaciones diferenciales

$$\mathcal{L}^* w_I = 0, \quad I = i, j, k, l; \quad \text{en } \Omega \quad (5.4)$$

También es de notarse que se puede determinar utilizando FEM, como se verá en una sección mas adelante.

5.2.2. Método con funciones de peso cúbicas en Σ

Aquí conviene aplicar funciones de peso de Hermite con su propiedad de ser continuas por tramos en su primera derivada. La siguiente notación será empleada: $h_i^0(x)$ o $h_j^0(y)$ son los polinomios cúbicos de Hermite unidimensionales con soporte en el intervalo (x_{i-1}, x_{i+1}) o (y_{j-1}, y_{j+1}) respectivamente, y toman el valor de uno en el nodo (x_i, y_j) y cero en los nodos con x_{i-1} y x_{i+1} o y_{j-1} y y_{j+1} , y su derivada es cero en todos los nodos. Asimismo, $h_i^1(x)$ o $h_j^1(y)$ son polinomios cúbicos de Hermite unidimensional con soporte en el intervalo (x_{i-1}, x_{i+1}) o (y_{j-1}, y_{j+1}) respectivamente, cuya derivada es uno en el nodo (x_i, y_j) , y cero en los demás nodos.

Las funciones de peso que se aplican en cada nodo I , tienen una expresión general, para cada elemento, de la forma siguiente:

$$w_I^\alpha(x, y) = B_I(x, y) + \lambda_I N^{(e)}(x, y) \quad (5.5)$$

donde

$$B_I^\alpha(x, y) = \begin{cases} h_i^0(x)h_j^0(y); & \text{para } \alpha = 0 \\ h_i^1(x)h_j^0(y); & \text{para } \alpha = 1 \\ h_i^0(x)h_j^1(y); & \text{para } \alpha = 2 \end{cases} \quad \text{para } I = i, j, k, l \quad (5.6)$$

$$N^{(e)}(x, y) = q(x)q(y) \quad e = 1, \dots, E$$

Las funciones $B_I^\alpha(x, y)$ cumplen con las condiciones de frontera en cada elemento.

Por cada nodo interno la función bilineal B_I^α es continua en Ω y su derivada normal tiene continuidad de salto a través de Σ .

Por otra parte $N(x, y)$ es una función cuadrática, continua por tramos, con soporte en $\bar{\Omega}$ que se anula en $\partial\Omega$ y toma el valor de uno en el punto de colocación (en el centro) de Ω_I . Entonces N es una traslación afin de la función $x(1-x)y(1-y)$. Los parámetros λ_I son ahora doce y son determinados aplicando colocación al centro al operador adjunto:

$$\mathcal{L}^* w_I^\alpha = 0, \quad I = i, j, k, l; \quad \text{en } \Omega \quad (5.7)$$

5.3. Construcción de funciones de peso cúbicas en el interior

Para el cálculo de las funciones óptimas utilizando colocación ortogonal se formula el método con una aproximación utilizando funciones cúbicas en el interior de cada subdominio de la partición. Para esta aproximación es necesario y suficiente cuatro puntos de colocación. Para la implantación de las llamadas funciones de peso óptimas, éstas son caracterizadas por sus trazas en Σ .

5.3.1. Método con funciones de peso lineales en Σ

Se formula el método con funciones cúbicas en el interior. Las funciones w que se aplicaron en cada nodo I , tienen una expresión general, para cada elemento, de la forma siguiente:

$$w_I(x, y) = B_I(x, y) + \sum_{J=1}^4 C_{IJ} N_J(x, y) \quad (5.8)$$

Las funciones del tipo $B_I(x, y)$ cumplen con la propiedad de resolver problemas con condiciones de frontera locales, y las funciones tipo $N_J(x, y)$ forman una combinación lineal que cumple con la propiedad de anularse en las fronteras de cada elemento para satisfacer la ecuación diferencial.

Para el caso de la construcción de funciones de peso lineales, $B(x, y)$ es una función bilineal por tramos es decir:

$$B_I(x, y) = l_I(x) l_I(y) \quad I = i, j, k, l; \quad (5.9)$$

Las funciones N_J , se aplican a tanto al caso lineal como al cúbico y son funciones bi-cúbicas por tramos formadas por el producto de traslaciones de polinomios de Hermite:

$$N_I(x, y) = h_I^1(x) h_I^1(y); \quad \text{para } I = i, j, k, l \quad (5.10)$$

Las funciones N_j cumplen la condición las que la función w_I^α se anula en la frontera y se adicionan como una combinación lineal donde los coeficientes C_{IJ} son constantes por elemento.

Para construir las funciones de peso se aplica el método de colocación. Las funciones de peso deben ser soluciones del operador adjunto homogéneo. Entonces se parte del sistema de ecuaciones siguiente:

$$\mathcal{L}^* w_I(x^p, y^p) = 0; I = i, j, k, l; p = 1, \dots, 4 \text{ puntos de colocación} \quad (5.11)$$

Sustituyendo la expresión de las funciones de peso en la ecuación y evaluando en los puntos de colocación se obtiene:

$$\sum_J^4 \mathcal{L}^* C_{IJ} N_J(x^p, y^p) = -\mathcal{L}^* B_I(x^p, y^p); I = i, j, k, l; p = 1, \dots, 4 \quad (5.12)$$

Lo anterior produce cuatro constantes por nodo y en total 16. Su tratamiento se verá en una sección sobre la implantación numérica, más adelante.

5.3.2. Método con funciones de peso cúbicas en Σ

De nuevo, las funciones w que se aplicaron en cada nodo I , tienen una expresión general, para cada elemento, de la forma siguiente:

$$w_I^\alpha(x, y) = B_I^\alpha(x, y) + \sum_{J=1}^4 C_{IJ} N_J(x, y) \quad (5.13)$$

Para el caso de la construcción de funciones de peso cúbicas, $B^\alpha(x, y)$ es una función bicúbica por tramos formada por traslaciones afines apropiadas de polinomios del Hermite, de es decir:

$$B_I^\alpha(x, y) = \begin{cases} h_I^0(x) h_I^0(y); & \text{para } \alpha = 0 \\ h_I^1(x) h_I^0(y); & \text{para } \alpha = 1 \\ h_I^0(x) h_I^1(y); & \text{para } \alpha = 2 \end{cases} \text{ para } I = i, j, k, l \quad (5.14)$$

Las funciones B_I^α cumplen con las condiciones de frontera en cada elemento.

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

Para construir las funciones de peso se aplica el método de colocación. Las funciones de peso deben ser soluciones del operador adjunto homogéneo. Entonces se parte de sistema de ecuaciones siguiente:

$$\mathcal{L}^* w_I^\alpha(x^p, y^p) = 0; I = i, j, k, l; p = 1, \dots, 4 \text{ puntos de colocación} \quad (5.15)$$

Sustituyendo la expresión de las funciones de peso en la ecuación y evaluando en los puntos de colocación se obtiene:

$$\sum_J^4 \mathcal{L}^* C_{IJ} N_J(x^p, y^p) = -\mathcal{L}^* B_I^\alpha(x^p, y^p); I = i, j, k, l; p = 1, \dots, 4 \quad (5.16)$$

Lo anterior produce doce constantes por nodo y en total 48. Su tratamiento se verá en la sección sobre la implantación numérica, más adelante.

5.4. Implantación numérica para un punto de colocación

Ahora se requiere construir un mapeo F_e que transformará el elemento de referencia $\widehat{\Omega}$ al elemento Ω_e . Las funciones definidas de forma local en elemento de referencia, \widehat{w}_I , en $\widehat{\Omega}$ permiten obtener las funciones en el elemento Ω_e o sea:

$$w_I^{(e)}(x, y) = \widehat{w}_I(\xi, \eta), I=1, 2, 3, 4 \quad (5.17)$$

5.4.1. Un punto de colocación con funciones de peso lineales en Σ

Estableciendo las funciones bilineales locales que satisfacen la función de peso en el elemento de referencia $(-1,+1) \times (-1,+1)$, con base en el producto de funciones de referencia de elementos unidimensionales obtenemos:

$$\widehat{B}_I(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi_I \xi)(1 + \eta_I \eta), I = 1, \dots, 4 \quad (5.18)$$

donde (ξ_I, η_I) son las coordenadas del nodo I en el elemento de referencia; E , y el total de funciones bilineales se presenta a continuación:

$$\begin{aligned} \widehat{B}_1(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ \widehat{B}_2(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ \widehat{B}_3(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \\ \widehat{B}_4(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \end{aligned} \quad (5.19)$$

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

Para cualquier punto del elemento global, por una combinación lineal de las funciones base, la relación entre (x, y) y (ξ, η) está dada por:

$$\begin{aligned} (x, y) &\equiv F_e(\xi, \eta) \\ x &= \sum_{I=1}^4 x_I^{(e)} \widehat{B}_I(\xi, \eta) \\ y &= \sum_{I=1}^4 y_I^{(e)} \widehat{B}_I(\xi, \eta) \end{aligned} \quad (5.20)$$

o de otra manera

$$\begin{aligned} x &= x_1 \widehat{B}_1(\xi, \eta) + x_2 \widehat{B}_2(\xi, \eta) + x_3 \widehat{B}_3(\xi, \eta) + x_4 \widehat{B}_4(\xi, \eta) \\ y &= y_1 \widehat{B}_1(\xi, \eta) + y_2 \widehat{B}_2(\xi, \eta) + y_3 \widehat{B}_3(\xi, \eta) + y_4 \widehat{B}_4(\xi, \eta) \end{aligned} \quad (5.21)$$

que sustituyendo se ve de la siguiente forma

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{4} \left[(x_1 + x_2 + x_3 + x_4) + (-x_1 + x_2 + x_3 - x_4) \xi \right. \\ &\quad \left. + (-x_1 - x_2 + x_3 + x_4) \eta + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \xi \eta \right] \\ y &= \frac{1}{4} \left[(y_1 + y_2 + y_3 + y_4) + (-y_1 + y_2 + y_3 - y_4) \xi \right. \\ &\quad \left. + (-y_1 - y_2 + y_3 + y_4) \eta + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \xi \eta \right] \end{aligned} \quad (5.22)$$

De las ecuaciones (5.15) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \sum_{I=1}^4 x_I^{(e)} \frac{\partial \widehat{B}_I}{\partial \xi} = \frac{1}{4} \left[(-x_1 + x_2 + x_3 - x_4) + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \eta \right] \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} &= \sum_{I=1}^4 y_I^{(e)} \frac{\partial \widehat{B}_I}{\partial \xi} = \frac{1}{4} \left[(-y_1 + y_2 + y_3 - y_4) + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \eta \right] \end{aligned} \quad (5.23)$$

Similarmente,

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \eta} &= \sum_{I=1}^4 x_I^{(e)} \frac{\partial \widehat{B}_I}{\partial \eta} = \frac{1}{4} \left[(-x_1 - x_2 + x_3 + x_4) + (x_1 - x_2 + x_3 - x_4) \xi \right] \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} &= \sum_{I=1}^4 y_I^{(e)} \frac{\partial \widehat{B}_I}{\partial \eta} = \frac{1}{4} \left[(-y_1 - y_2 + y_3 + y_4) + (y_1 - y_2 + y_3 - y_4) \xi \right] \end{aligned} \quad (5.24)$$

Estableciendo las funciones cuadráticas locales que satisfacen la función de peso en el elemento de referencia $(-1, +1) \times (-1, +1)$, con base en el producto de funciones de referencia de elementos unidimensionales obtenemos:

$$\widehat{N}_I(\xi, \eta) = (1 - \xi^2)(1 - \eta^2), \quad I = 1, \dots, 4 \quad (5.25)$$

Para la transformación considérese una función $\phi = \phi[x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)]$. Por la regla de la cadena para diferenciación se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial \xi} &= \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi}{\partial \eta} &= \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta}\end{aligned}\tag{5.26}$$

En forma matricial,

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{Bmatrix}\tag{5.27}$$

donde

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}\tag{5.28}$$

es llamada *matriz Jacobiana*.

De aquí se deduce

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{Bmatrix} = [J]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \end{Bmatrix}\tag{5.29}$$

La inversa de la matriz Jacobiana se puede expresar en términos de las derivadas conocidas:

$$[J]^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix}\tag{5.30}$$

donde el J , conocido como el *Jacobiano*, es el determinante de $[J]$ y puede ser expresado como

$$J = \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \eta)} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} = \alpha_0 + \alpha_1 \xi + \alpha_2 \eta\tag{5.31}$$

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

donde (Rathod and Islam, 2001):

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \frac{1}{8}[(x_4 - x_2)(y_1 - y_3) + (x_3 - x_1)(y_4 - y_2)], \\ \alpha_1 &= \frac{1}{8}[(x_4 - x_3)(y_2 - y_1) + (x_1 - x_2)(y_4 - y_3)], \\ \alpha_2 &= \frac{1}{8}[(x_4 - x_1)(y_2 - y_3) + (x_3 - x_2)(y_4 - y_1)].\end{aligned}\quad (5.32)$$

5.4.2. Evaluación del operador Adjunto

Las funciones de peso deben ser soluciones del operador adjunto homogéneo. Entonces se parte de sistema de ecuaciones siguiente:

$$\sum_J^4 \mathcal{L}^* C_{IJ} N_J(x^p, y^p) = -\mathcal{L}^* B_I^\alpha(x^p, y^p); \quad I = i, \dots, l; \quad p = 1, \dots, 4 \quad (5.33)$$

para los propósitos de aplicar el operador adjunto a las funciones del tipo B_I o N_J , se suponen representadas por $\phi = \phi[x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)]$

$$\mathcal{L}^* \phi \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla \phi - \underline{\underline{b}} \cdot \nabla \phi + c \phi = 0 \quad (5.34)$$

Empezando por el término más simple, el **tercer** término se evalúa con las funciones mismas de acuerdo a la siguiente igualdad

$$c\phi^{(e)} = \hat{c}\hat{\phi} \quad (5.35)$$

En la evaluación del **segundo** término aparece la aplicación del inverso de la matriz Jacobiana, $[J]$, con su versión incluyendo el Jacobiano, J :

$$\begin{aligned}b \cdot \nabla \phi^{(e)} &= \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \cdot [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \eta} \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (5.36)$$

La evaluación del **primer** término, de segundo orden, implica la aplicación doble del inverso de la matriz Jacobiana

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (\underline{a} \nabla \phi^{(e)}) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix} \\
 &= [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (5.37) \\
 &= \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \eta} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Aplicando estas fórmulas en la evaluación del operador adjunto en los cuatro puntos de colocación, se obtienen las constantes C_{IJ} , que son cuatro por cada uno de los cuatro nodos, y que permiten evaluar las cuatro funciones de peso w_I^0 correspondientes. Con base en esta posibilidad, el siguiente paso es evaluar las integrales que contribuyen a una matriz local debida al elemento y que se suman a la matriz global del dominio.

5.4.3. Evaluación de la integral con lineales en Σ

Cada elemento contribuye con una matriz local de 4x4 a la construcción de una global para resolver las incógnitas en los nodos. Cada componente de la matriz resulta de la evaluación del operador bilineal S^* , que consiste en la integral en la que se combinan las funciones de peso y las base del elemento:

$$\langle S^* u, w \rangle \equiv \int_{\Sigma} u \left[\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w \right] \cdot \underline{n} \, ds \equiv \sum_{K=1}^E \int_{\partial \Omega_K} u \left(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w \right) \cdot \underline{n} \, dx \quad (5.38)$$

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

Cada entrada de la matriz elemental puede ser definida por

$$A_{ij} \equiv \int_{\partial\Omega_K} B^j (\underline{a}_n \cdot \nabla w^i + b_n w^i) ds \quad (5.39)$$

donde $\underline{a}_n = \underline{a} \cdot \underline{n}$, $b_n = \underline{b} \cdot \underline{n}$, y $\partial\Omega_K = \partial\Omega_{12} \cup \partial\Omega_{23} \cup \partial\Omega_{34} \cup \partial\Omega_{41}$.

La integración incluyendo la transformación al elemento local queda así

$$\int_{\partial\hat{\Omega}} \hat{B}^j \left\{ \begin{bmatrix} a_{11}n_x + a_{12}n_y \\ a_{21}n_x + a_{22}n_y \end{bmatrix} [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{w}^j}{\partial \xi} & \frac{\partial \hat{w}^j}{\partial \eta} \end{bmatrix}^T + (b_1 n_x + b_2 n_y) \hat{w}^j \right\} d\sigma \quad (5.40)$$

Las ideas presentadas en esta sección pueden utilizarse para derivar elementos cuadriláteros a partir de elementos cuadrados como el de la figuras 5.1b. Por ejemplo las funciones dadas en las ecuaciones (5.19) pueden utilizarse para transformar el cuadrado de la figura 5.2a en el cuadrilátero de la figura 5.2b estando la transformación dada por la ecuación (5.20)-(5.24). Nótese que esta no es una transformación lineal, a menos que el cuadrilátero sea un paralelogramo, ya que incluye términos $\xi\eta$. Sin embargo todas las líneas rectas paralelas a los ejes ξ , η , se transforman en líneas rectas en el plano x , y . La transformación de cuatro nodos es suficiente para cualquier cuadrilátero de lados rectos.

5.4.4. Un solo punto de colocación con funciones de peso cúbicas en Σ

Estableciendo las funciones bicúbicas locales que satisfacen lo anterior en el elemento de referencia $(-1,+1) \times (-1,+1)$ como el producto de funciones de referencia de elementos unidimensionales obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{B}_I^0(\xi, \eta) &\equiv h_I^0(\xi) h_I^0(\eta), \\ \hat{B}_I^1(\xi, \eta) &\equiv h_I^0(\xi) h_I^1(\eta), \quad I = 1, \dots, 4 \\ \hat{B}_I^2(\xi, \eta) &\equiv h_I^1(\xi) h_I^0(\eta), \end{aligned} \quad (5.41)$$

donde

$$\begin{aligned} h_{-1}^0(\xi) &= \frac{1}{4}(1-\xi)^2(2+\xi) & \text{o} & \quad \frac{1}{4}(2-3\xi+\xi^3) \\ h_{+1}^0(\xi) &= \frac{1}{4}(1+\xi)^2(2-\xi) & \text{o} & \quad \frac{1}{4}(2+3\xi-\xi^3) \end{aligned} \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} h_{-1}^1(\xi) &= \frac{1}{4}(1-\xi)^2(\xi+1) & o & \quad \frac{1}{4}(1-\xi-\xi^2+\xi^3) \\ h_{+1}^1(\xi) &= \frac{1}{4}(1+\xi)^2(\xi-1) & o & \quad \frac{1}{4}(-1-\xi+\xi^2+\xi^3) \end{aligned} \quad (5.43)$$

para η solo se sustituyen las ξ en cada función correspondiente.

5.4.5. Evaluación de la integral con cúbicas en Σ

Cada elemento contribuye con una matriz local para 3x3 incógnitas y para de 4x4 nodos, o sea 12x12, a la construcción de una global para resolver las incógnitas en los nodos. Cada componente de las matrices resulta de la evaluación del operador bilineal S^* , que consiste en la integral en la que se combinan las funciones de peso y las base del elemento:

$$A_{IJ}^{\mu\nu} U_J^\nu = F_I^\mu \quad I, J \in \eta, I, J = 1, 2, 3, 4, \mu\nu = 0, 1, 2 \quad (5.44)$$

donde η es el conjunto de los nodos con función de peso, o incógnita. Cada entrada de la matriz elemental, para condiciones de frontera tipo Dirichlet, puede ser definida por

$$A_{IJ} = \int_{\partial\Omega_k} B_J^\nu (\underline{a}_n \cdot \nabla w_I^\mu + b_n w_I^\mu) d\underline{x} \quad (5.45)$$

$$\begin{aligned} F_I^\mu &= \int_{\Omega} w_I^\mu f \, d\underline{x} - \int_{\partial_D\Omega} \underline{u} \cdot \underline{n} \cdot \underline{a} \nabla w_I^\mu \, d\underline{x} \\ &+ \int_{\Sigma} j_{\Sigma}^0 (\underline{a} \nabla w_I^\mu + \underline{b} w_I^\mu) \cdot \underline{n} \, d\underline{x} - \int_{\Sigma} \dot{w}_I^\mu j_{\Sigma}^1 \, d\underline{x} \end{aligned} \quad (5.46)$$

5.5. Implantación numérica para cuatro puntos de colocación

5.5.1. Cuatro puntos de colocación y funciones de peso lineales en Σ

Para funciones de peso lineales se tiene solamente una función de peso para cada nodo del elemento Ω_e y con base en lo anterior su expresión es:

$$w_I^0(x, y) = B_I^0(x, y) + \sum_{J=1}^4 C_{IJ} N_J(x, y) \quad (5.47)$$

Donde las funciones B_I^0 son polinomios bilineales cuyo valor es igual a uno en el nodo I , e igual a cero en los otros nodos. Las funciones N_J se anula (son cero) en todos los nodos y en los segmentos de Σ , y su derivada es igual a uno en el nodo I , y cero en los otros nodos. Estableciendo las funciones bilineales locales que satisfacen lo anterior en el elemento de referencia $(-1,+1) \times (-1,+1)$ como el producto de funciones de referencia de elementos unidimensionales obtenemos (omitiendo el superíndice 0):

$$\widehat{B}_I(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi_I \xi)(1 + \eta_I \eta), \quad I = 1, \dots, 4 \quad (5.48)$$

donde (ξ_I, η_I) son las coordenadas del nodo I en el elemento de referencia; E .

Las funciones N_J en el elemento de referencia son funciones bilineales resultado del producto de funciones unidimensionales de Hermite:

$$\widehat{N}_I(\xi, \eta) = h_I^1(\xi) h_I^1(\eta) \quad (5.49)$$

Con base en las funciones de peso construidas, surge ahora una opción para escoger el conjunto de funciones bases. Puesto que necesitamos que sean funciones definidas en los segmentos de Σ , se pueden aplicar funciones de peso restringidas a Σ , es decir, las funciones $B_I^{(e)}(x, y) = \widehat{B}_I(\xi, \eta)$ son las funciones base para el elemento.

La relación entre (x, y) y (ξ, η) esta dada por $(x, y) \equiv F_e(\xi, \eta)$.

5.5.2. Evaluación de la integral para funciones lineales en Σ

Como en el caso de lineales con un punto de colocación, cada elemento contribuye con una matriz local de 4x4 a la construcción de una global para resolver las incógnitas en los nodos. Cada componente de la matriz resulta de la evaluación del operador bilineal S^* , que consiste en la integral en la que se combinan las funciones de peso y las base del elemento:

$$\langle S^* u, w \rangle \equiv \int_{\Sigma} u \left[\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w \right] \cdot \underline{n} \, ds \equiv \sum_{K=1}^E \int_{\partial\Omega_K} u \left(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w \right) \cdot \underline{n} \, dx \quad (5.50)$$

Cada entrada de la matriz elemental puede ser definida por

$$A_{ij} \equiv \int_{\partial\Omega_K} B^j \left(\underline{a}_n \cdot \nabla w^i + b_n w^i \right) ds \quad (5.51)$$

donde $\underline{a}_n = \underline{a} \cdot \underline{n}$, $b_n = \underline{b} \cdot \underline{n}$, y $\partial\Omega_K = \partial\Omega_{12} \cup \partial\Omega_{23} \cup \partial\Omega_{34} \cup \partial\Omega_{41}$.

La integración incluyendo la transformación al elemento local queda así

$$\int_{\hat{\partial\Omega}} \hat{B}^j \left\{ \begin{bmatrix} a_{11}n_x + a_{12}n_y \\ a_{21}n_x + a_{22}n_y \end{bmatrix} [J]^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{w}^i}{\partial \xi} & \frac{\partial \hat{w}^i}{\partial \eta} \end{bmatrix}^T + (b_1 n_x + b_2 n_y) \hat{w}^i \right\} d\sigma \quad (5.52)$$

5.5.3. Cuatro puntos de colocación y funciones de peso cúbicas en Σ

Para funciones de peso cúbicas se tienen tres funciones de peso para cada nodo del elemento Ω_e y con base en lo anterior su expresión es, para $\mu = 0, 1, 2$:

$$w_I^\mu(x, y) = B_I^\mu(x, y) + \sum_{J=1}^4 C_{IJ}^\mu N_J(x, y) \quad (5.53)$$

Donde las funciones B_I^μ son polinomios cúbicos definidos, para los nodos $I = 1, 2, 3$ y 4

$$\begin{aligned} B_I^0(x, y) &\equiv h_I^0(x) h_I^0(y), \\ B_I^1(x, y) &\equiv h_I^0(x) h_I^1(y), \quad I = i, j, k, l \\ B_I^2(x, y) &\equiv h_I^1(x) h_I^0(y), \end{aligned} \quad (5.54)$$

Estableciendo las funciones bicúbicas locales que satisfacen lo anterior en el elemento de referencia $(-1,+1) \times (-1,+1)$ como el producto de funciones de referencia de elementos unidimensionales obtenemos

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

$$\begin{aligned}
 \hat{B}_I^0(\xi, \eta) &\equiv h_I^0(\xi)h_I^0(\eta), \\
 \hat{B}_I^1(\xi, \eta) &\equiv h_I^0(\xi)h_I^1(\eta), \quad I = 1, \dots, 4 \\
 \hat{B}_I^2(\xi, \eta) &\equiv h_I^1(\xi)h_I^0(\eta),
 \end{aligned} \tag{5.55}$$

Las funciones N_j en el elemento de referencia son funciones bicúbicas, resultado del producto de funciones cúbicas unidimensionales de Hermite:

$$\hat{N}_I(\xi, \eta) = h_I^1(\xi)h_I^1(\eta). \tag{5.56}$$

Con base en las funciones de peso construidas, ahora surge una opción para escoger el conjunto de funciones bases. Puesto que necesitamos que sean funciones definidas en los segmentos de Σ , se pueden aplicar funciones de peso restringidas a Σ , es decir, las funciones $B_I^{\mu(e)}(x, y) = \hat{B}_I^\mu(\xi, \eta)$ son las funciones base para el elemento; la relación entre (x, y) y (ξ, η) esta dada por $(x, y) \equiv F_e(\xi, \eta)$.

5.5.4. Evaluación del operador Adjunto

Las funciones de peso deben ser soluciones del operador adjunto homogéneo. Entonces se parte de sistema de ecuaciones siguiente:

$$\sum_J^4 \mathcal{L}^* C_{IJ}^\mu N_J(x^p, y^p) = -\mathcal{L}^* B_I^\mu(x^p, y^p); \quad I = i, j, k, l; \quad p = 1, \dots, 4 \tag{5.57}$$

Para los propósitos de aplicar el operador adjunto a las funciones del tipo B_I o N_J , se suponen representadas por $\phi = \phi[x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)]$

$$\mathcal{L}^* \phi \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla \phi - \underline{\underline{b}} \cdot \nabla \phi + c \phi = 0 \tag{5.58}$$

Aplicando las fórmulas descritas en la sección de las funciones lineales, a la evaluación del operador adjunto en los cuatro puntos de colocación, se obtienen las constantes C_{IJ}^μ , que son cuatro por cada uno de los cuatro nodos, y que permiten evaluar las cuatro funciones de peso w_I^μ correspondientes.

5.5.5. Evaluación de la integral

De la misma manera que con un punto de colocación, cada elemento contribuye con una matriz local de 12x12, a la construcción de una global para resolver las incógnitas en los nodos. Cada componente de las matrices resulta de la evaluación del operador bilineal S^* , que consiste en la integral en la que se combinan las funciones de peso y las base del elemento:

$$A_{IJ}^{\mu\nu} U_J^\nu = F_I^\mu \quad I, J \in \eta, I, J = 1, 2, 3, 4, \mu\nu = 0, 1, 2 \quad (5.59)$$

donde η es el conjunto de los nodos con función de peso, o incógnita. Cada entrada de la matriz elemental, para condiciones de frontera tipo Dirichlet, puede ser definida por

$$\begin{aligned} A_{IJ} &= \int_{\partial\Omega_k} B_J^\nu (\underline{a}_n \cdot \nabla w_I^\mu + b_n w_I^\mu) d\underline{x} \\ F_I^\mu &= \int_{\Omega} w_I^\mu f d\underline{x} - \int_{\partial_D\Omega} \underline{u} \underline{n} \cdot \underline{a} \nabla w_I^\mu d\underline{x} \\ &\quad + \int_{\Sigma} j_{\Sigma}^0 (\underline{a} \nabla w_I^\mu + \underline{b} w_I^\mu) \cdot \underline{n} d\underline{x} - \int_{\Sigma} \dot{w}_I^\mu j_{\Sigma}^1 d\underline{x} \end{aligned} \quad (5.60)$$

5.6. Formulación T-H para elementos finitos con funciones óptimas

Este método formula las funciones de peso con el fin de aplicar una formulación de elementos finitos tipo Petrov-Galerkin. La función de prueba se aplica como en elementos finitos y la, o las, constantes que definen el polinomio, cuadrático o cúbico, se obtienen de aplicar una formulación débil a la ecuación para el operador homogéneo, para obtener las constantes que definen la función de prueba.

5.6.1. Método con funciones de peso cuadráticas en el interior

Las funciones w de peso que se definen en cada nodo I , tienen una expresión general, para cada elemento, de la forma siguiente:

$$w_I(x, y) = B_I(x, y) + \lambda_I N^{(e)}(x, y) \quad (5.61)$$

donde

$$\begin{aligned} B_I(x, y) &= l_I(x)l_I(y) & I = i, j, k, l \\ N^{(e)}(x, y) &= q(x)q(y) & e = 1, \dots, E \end{aligned} \quad (5.62)$$

El adjunto formal se definió como sigue:

$$\mathcal{L}^*v \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla v) - \underline{b} \cdot \nabla v + cv \quad (5.63)$$

Los parámetros λ_I son cuatro y son determinados aplicando a la ecuación homogénea del adjunto y una formulación débil:

$$\int_{\Omega_e} \mathcal{L}^* w_I w_K d\underline{x} = 0, \quad I = i, j, k, l; \quad \text{en } \Omega_e \quad (5.64)$$

si w_K se toma como $N^{(e)}(x, y)$ y se sustituyen w_I, w_K :

$$\int_{\Omega_e} \mathcal{L}^* (B_I(x, y) + \lambda_I N^{(e)}(x, y)) N_K d\underline{x} = 0, \quad I = i, j, k, l; \quad \text{en } \Omega_e \quad (5.65)$$

$$\lambda_I \int_{\Omega_e} \mathcal{L}^* (N^{(e)}(x, y)) N_K d\underline{x} = - \int_{\Omega_e} \mathcal{L}^* (B_I(x, y)) N_K d\underline{x}, \quad I = i, j, k, l; \quad (5.66)$$

entonces

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_e} \mathcal{L}^*(B_l) N_k &= \int_{\Omega_e} \left(-\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla B_l) - \underline{b} \cdot \nabla B_l + c B_l \right) N_k d\underline{x} \\ \int_{\Omega_e} \mathcal{L}^*(N_l) N_k &= \int_{\Omega_e} \left(-\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla N_l) - \underline{b} \cdot \nabla N_l + c N_l \right) N_k d\underline{x}\end{aligned}\quad (5.67)$$

como en la frontera del elemento se anula la función, al aplicar el teorema de Green:

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_e} \mathcal{L}^*(B_l) N_k d\underline{x} &= \int_{\Omega_e} \left((\underline{a} \cdot \nabla B_l) \nabla N_k - \underline{b} \cdot \nabla B_l N_k + c B_l N_k \right) d\underline{x} \\ \int_{\Omega_e} \mathcal{L}^*(N_l) N_k d\underline{x} &= \int_{\Omega_e} \left((\underline{a} \cdot \nabla N_l) \nabla N_k - \underline{b} \cdot \nabla N_l N_k + c N_l N_k \right) d\underline{x}\end{aligned}\quad (5.68)$$

y definiendo las formas bilineales $a^*(\cdot, \cdot)$:

$$\begin{aligned}a^*(B_l, N_k) &\equiv \int_{\Omega_e} \left((\underline{a} \cdot \nabla B_l) \nabla N_k - \underline{b} \cdot \nabla B_l N_k + c B_l N_k \right) d\underline{x} \\ a^*(N_l, N_k) &\equiv \int_{\Omega_e} \left((\underline{a} \cdot \nabla N_l) \nabla N_k - \underline{b} \cdot \nabla N_l N_k + c N_l N_k \right) d\underline{x}\end{aligned}\quad (5.89)$$

$$\lambda_l = -\frac{a^*(B_l, N_k)}{a^*(N_l, N_k)}, \quad I = i, j, k, l; \quad (5.70)$$

Para obtener la función base se aplica el método a la función

$$w_l(x, y) = B_l(x, y) + \mu_l N^{(e)}(x, y) \quad (5.61)$$

con el operador original

$$\mathcal{L}v \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla v) + \nabla \cdot (\underline{b}v) + cv \quad (5.78)$$

Definiendo

$$\int_{\Omega_e} \mathcal{L}w_l w_k d\underline{x} = 0, \quad I, K = i, j, k, l; \text{ en } \Omega_e \quad (5.79)$$

y sustituyendo w_l, w_k :

$$\mu_l \int_{\Omega_e} \mathcal{L}(N^{(e)}) N_k d\underline{x} = -\int_{\Omega_e} \mathcal{L}(B_l) N_k d\underline{x}, \quad (5.80)$$

o con las formas bilineales $a(\cdot, \cdot)$

$$a(N_l, N_k) = \int_{\Omega_e} \left\{ \nabla N_l \cdot \underline{a} \cdot \nabla N_k + \nabla \cdot (\underline{b} N_l) N_k + c N_l N_k \right\} d\underline{x} \quad (5.81)$$

$$\mu_l a(N^{(e)}, N_k) = -a(B_l, N_k) \quad (5.82)$$

5.6.2. Método con funciones cúbicas en el interior

Las funciones que se aplican a cada nodo I , tienen una expresión general, en el elemento, de la forma

$$w_I(x, y) = B_I(x, y) + \sum_{J=1}^4 C_{IJ} N_J(x, y) \quad (5.71)$$

donde

$$B_I(x, y) = l_I(x) l_I(y) \quad I = i, j, k, l; \quad (5.72)$$

$$N_I(x, y) = h_I^1(x) h_I^1(y); \quad I = i, j, k, l \quad (5.73)$$

definiendo w_K como $N_I(x, y)$ y aplicando una formulación débil

$$\int_{\Omega_e} \mathcal{L}^* w_I w_K d\underline{x} = 0, \quad I, K = i, j, k, l; \text{ en } \Omega_e \quad (5.74)$$

y sustituyendo w_I, w_K :

$$\sum_J C_{IJ} \int_{\Omega_e} \mathcal{L}^*(N_J) N_K d\underline{x} = - \int_{\Omega_e} \mathcal{L}^*(B_I) N_K d\underline{x}, \quad (5.75)$$

o con las formas bilineales $a^*(\cdot, \cdot)$

$$\sum_J C_{IJ} a^*(N_J, N_K) = -a^*(B_I, N_K) \quad (5.76)$$

el cual es un sistema lineal de 4x4 que se resuelve fácilmente.

Por el lado de la función base se aplica el método a la función

$$w_I(x, y) = B_I(x, y) + \sum_{J=1}^4 D_{IJ} N_J(x, y) \quad (5.77)$$

con el operador original definiendo

$$\int_{\Omega_e} \mathcal{L} w_I w_K d\underline{x} = 0, \quad I, K = i, j, k, l; \text{ en } \Omega_e \quad (5.78)$$

y sustituyendo w_I, w_K :

$$\sum_J D_{IJ} \int_{\Omega_e} \mathcal{L}(N_J) N_K d\underline{x} = - \int_{\Omega_e} \mathcal{L}(B_I) N_K d\underline{x}, \quad (5.79)$$

o con las formas bilineales $a(\cdot, \cdot)$

$$a(N_I, N_K) = \int_{\Omega_i} \left\{ \nabla N_I \cdot \underline{a} \cdot \nabla N_K + \nabla \cdot (\underline{b} N_I) N_K + c N_I N_K \right\} d\mathbf{x} \quad (5.80)$$

$$\sum_J^4 D_{IJ} a(N_J, N_K) = -a(B_I, N_K) \quad (5.81)$$

el cual es un sistema lineal de 4x4 que se resuelve fácilmente.

Las expresiones obtenidas para la función de prueba y de base se aplican a una discretización tipo elemento finito y con las siguientes definiciones de los funcionales bilineales y funcional lineal

$$-\langle S^* \tilde{u}_h, w_h \rangle = a(u_h, w_h) \quad (5.83)$$

$$\langle f, w_h \rangle = \int_{\Omega} f w_h d\mathbf{x} \quad (5.84)$$

$$\langle g_D, w_h \rangle = a(u_{\partial}, w_h) \quad (5.85)$$

y el sistema a resolver es:

$$a(u_h, w_h) = \langle f, w_h \rangle - a(u_{\partial}, w_h) \quad (5.86)$$

5.6.3. formulación T-H para elementos finitos

Al final del capítulo 3 se indicó la formulación con elementos finitos. Con base en la formulación T-H se establece la relación última que ha sido usada en múltiples aplicaciones tales como los Métodos de Elemento Finito.

$$\begin{aligned} -\langle S^* u, w \rangle &= -\int_{\Sigma} u \left[\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w \right] \cdot \underline{n} d\mathbf{x} \\ &= \sum_{i=1}^E \int_{\Omega_i} \left\{ \nabla u \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + \nabla \cdot (\underline{b} u) w + c u w \right\} d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} w f d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\partial_D \Omega} u_{\partial} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Sigma} j_{\Sigma}^0 \left(\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b} w \right) \cdot \underline{n} d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} w j_{\Sigma}^1 d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (5.87)$$

$$\forall w \in \mathcal{E}$$

5. IMPLANTACIÓN NUMÉRICA EN DOS DIMENSIONES

CAPÍTULO 6

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

El problema general que se ha planteado resolver ha sido representado hasta este punto con el operador diferencial para ecuaciones de segundo orden que usa la forma con divergencia:

$$\mathcal{L} u \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla u + \nabla \cdot (\underline{\underline{b}} u) + c u = f_{\Omega} \quad (6.1a)$$

donde los parámetros son

$$\underline{\underline{a}} = \begin{pmatrix} a_{11}(x, y) & a_{12}(x, y) \\ a_{21}(x, y) & a_{22}(x, y) \end{pmatrix}; \quad \underline{\underline{b}} = \begin{pmatrix} b_1(x, y) \\ b_2(x, y) \end{pmatrix}; \quad c = c(x, y) \quad (6.1b)$$

sujeto a las condiciones de frontera Dirichlet y Neumann

$$u = u_{\delta} \quad \text{en } \partial\Omega_D, \quad \frac{\partial u}{\partial n} = g_N \quad \text{en } \partial\Omega_N \quad (6.1c)$$

y de salto prescritos

$$[u] = [u_{\Sigma}] \equiv j_{\Sigma}^0 \quad \text{y} \quad [\underline{\underline{a}} \nabla u] \cdot \underline{\underline{n}} = [\underline{\underline{a}} \nabla u_{\Sigma}] \cdot \underline{\underline{n}} \equiv j_{\Sigma}^1 \quad \text{en } \Sigma \quad (6.1d)$$

Sin perder generalidad abordamos los casos con condiciones Dirichlet y para saltos prescritos cero o diferentes de cero. El operador abarca las ecuaciones que en ciencias de la tierra describen los problemas de flujo y transporte de contaminantes en un fluido, como el agua subterránea, en un medio poroso, en estado estacionario. En este capítulo se aplica el método a problemas de flujo y transporte estables algunos de los cuales cuentan con una solución conocida y otros para los cuales no se conoce la solución. Se abordan también casos reales para los que se muestra el método aplicado.

Se desarrollaron códigos en Fortran 90 para modelos en una dimensión, en Java 2 y en C++, para dos dimensiones. Para dos dimensiones se abordaron ejemplos con nodos dispuestos en mallas en forma de cuadrícula para la evaluación de la convergencia y que por cada eje de coordenadas, tienen el mismo número E de nodos. Con base en esta geometría se evaluó el error evaluando la pendiente de la recta asociada a la curva del los puntos de la gráfica donde el eje vertical es el negativo del

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

logaritmo base 10 (\log_{10}) del error y el eje horizontal es el \log_{10} del número de nodos E . A continuación se presentan varios ejemplos de la aplicación del método.

6.1. Ecuación de Flujo

Por su lado para modelos de **flujo estable o flujo estacionario** en acuíferos confinados la ecuación diferencial parcial que inicialmente se aborda, para propósitos de probar el método, para dos dimensiones, es la expresada por la siguiente ecuación:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = R(x, y) \quad \text{en } \Omega \quad (6.2)$$

donde h es el nivel piezométrico, K_{xx} y K_{yy} son las conductividades hidráulicas en las direcciones x e y , y la expresión en el lado derecho de la ecuación es la distribución espacial de la recarga vertical por infiltración de masa de agua. Las condiciones de frontera obedecen a la expresión

$$h(x, y) = h_0, \quad \text{en } \partial\Omega. \quad (6.3)$$

Si se adopta la forma de (6.1), entonces el problema equivale a:

encontrar $u = h(x, y)$ tal que

- Parámetros:

$$\underline{\underline{\mathbf{a}}} = \begin{pmatrix} K_{xx}(x, y) & 0 \\ 0 & K_{yy}(x, y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\mathbf{K}}};$$

$$\underline{\underline{\mathbf{b}}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (6.4)$$

$$c = 0;$$

- Operador:

$$\mathcal{L}h \equiv -\nabla \cdot (\underline{\underline{\mathbf{K}}} \nabla h) = R \quad (6.5)$$

- Tomando el caso donde

$$R(x, y) = -2e^{-(x+y)} \quad (6.6)$$

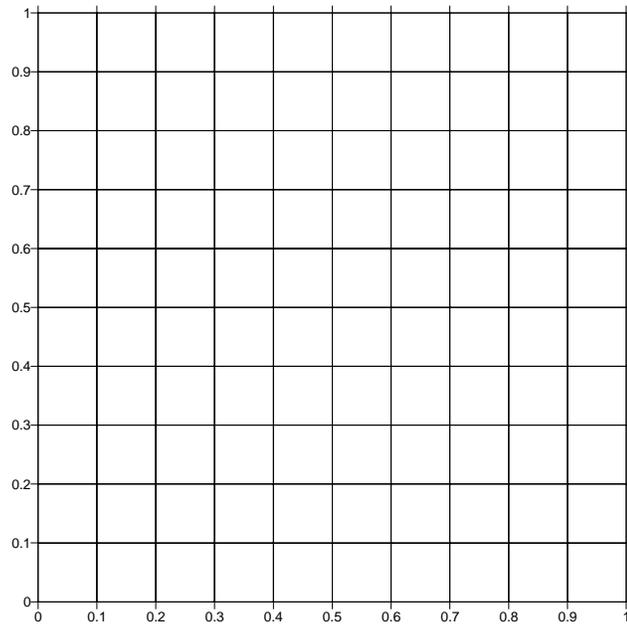
- condiciones de frontera:

$$h = h_0 = e^{-(x+y)} \quad \text{en } \partial\Omega, \quad (6.7)$$

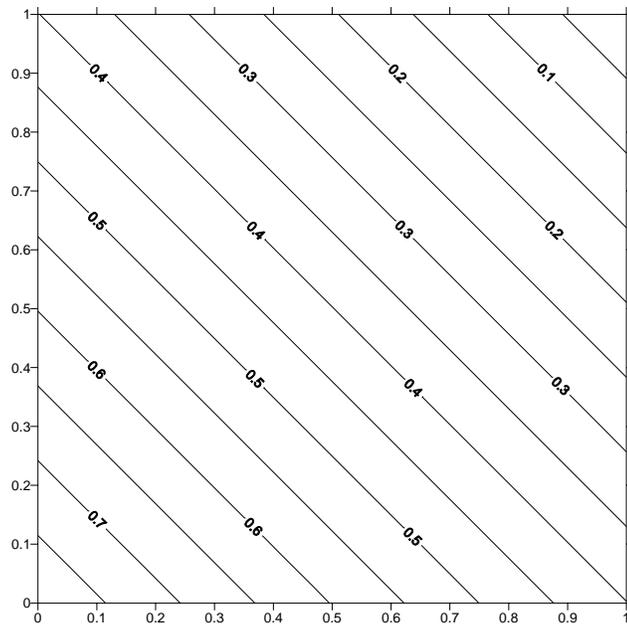
Su solución es conocida:

$$u = e^{-(x+y)} \quad (6.8)$$

Se aplica a un dominio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ o normalizado; a continuación se muestran en la figura las graficas del dominio, isolíneas de la solución resultante, y la gráfica de las rectas de puntos para varias configuraciones de la malla y para diferentes funciones de prueba: lineales y cúbicas, para dos puntos de colocación.

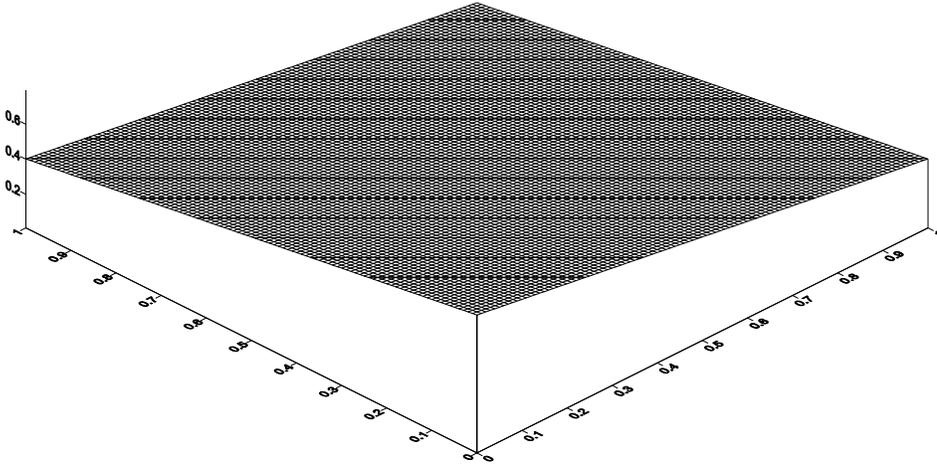


a) Dominio y malla

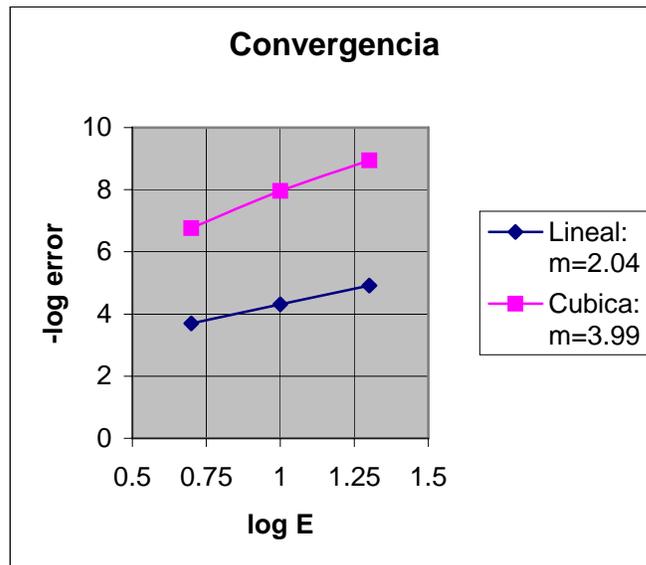


6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

b) Isolíneas de la solución



c) vista en 3 dimensiones del resultado



d) relación entre el número de elementos y el error

Figura 6.1: Grafica, para el ejemplo de flujo estable, tipo Poisson, de la relación del logaritmo del número de nodos por lado, $-\log_{10} \text{error}$ versus $\log_{10} E$, para la que el valor de la pendiente es 2.04, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales y de 3.99 para funciones de prueba cúbicas.

6.2. Flujo con coeficientes variables

6.2.1 Caso homogéneo

Parámetros:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} xy & 0 \\ 0 & xy \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad c = 0; \quad f = 0 \quad (6.9)$$

La Ecuación de Laplace correspondiente, de coeficientes variables para el operador \mathcal{L} es:

$$\nabla \cdot (xy \nabla u) = 0 \quad (6.10)$$

con condiciones de frontera

$$u(0, y) = -y^2$$

$$u(x, 0) = x^2$$

$$u(x, 1) = x^2 - 1 \quad (6.11)$$

$$u(1, y) = 1 - y^2$$

La solución exacta es:

$$u = x^2 - y^2 \quad (6.12)$$

Para este caso la gráfica de la pendiente no es posible mostrarla por ser de valores tales que saturan y truncan por ser de magnitudes altas

6.2.2 Caso no - homogéneo

Parámetros:

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+x^2 & 0 \\ 0 & 1+y^2 \end{pmatrix}; \\ \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \\ c = 0; \\ f_{\Omega} = 6(y^2 - x^2) \end{array} \right. \quad (6.13)$$

La Ecuación de Poisson correspondiente para el operador \mathcal{L} es:

$$\nabla \cdot (\underline{a} \nabla u) = 6(y^2 - x^2) \quad (6.14)$$

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

con condiciones de frontera

$$\begin{aligned}u(0, y) &= -y^2 \\u(x, 0) &= x^2 \\u(x, 1) &= x^2 - 1 \\u(1, y) &= 1 - y^2\end{aligned}\tag{6.15}$$

La solución exacta es:

$$u = x^2 - y^2\tag{6.16}$$

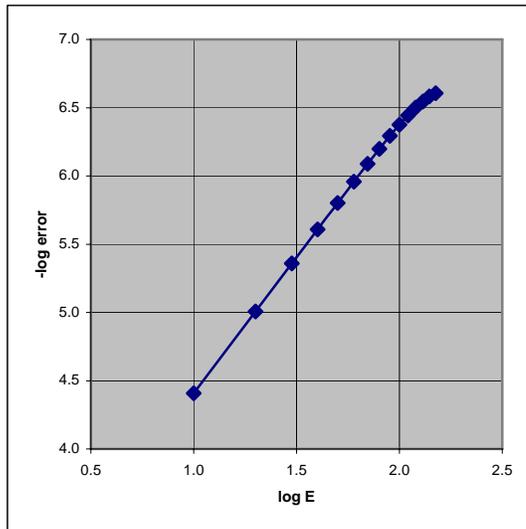


Figura 6.2: Gráfica, para el ejemplo de flujo con coeficiente variables de la relación del logaritmo del número de nodos por lado, $-\log_{10}error$ versus $\log_{10}E$, para la que el valor de la pendiente es 1.98, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales.

6.3. Ecuación de Transporte

Para su aplicación a modelos de **transporte estacionario** en hidrología subterránea la ecuación diferencial parcial que inicialmente se aborda para dos dimensiones es la expresada por el siguiente problema para $u = C(x, y)$:

- Parámetros:

$$\underline{\underline{a}} = \underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} D_{11}(x, y) & 0 \\ 0 & D_{22}(x, y) \end{pmatrix};$$

$$\underline{\underline{b}} = \underline{\underline{v}} = \begin{pmatrix} v_x(x, y) \\ v_y(x, y) \end{pmatrix}; \quad (6.17)$$

$$c = -\lambda = -\lambda(x, y);$$

$$f_\Omega = \frac{q_s}{\theta} C_s$$

- Operador:

$$\mathcal{L}C \equiv -\nabla \cdot (\underline{\underline{D}}\nabla C) + \nabla \cdot (\underline{\underline{v}}C) - \lambda C = \frac{q_s}{\theta} C_s \quad (6.18)$$

y cuando el fluido es incompresible $\nabla \cdot \underline{\underline{v}} = 0$

$$\mathcal{L}C \equiv -\nabla \cdot (\underline{\underline{D}}\nabla C) + \underline{\underline{v}}\nabla C - \lambda C = \frac{q_s}{\theta} C_s \quad (6.19)$$

- condiciones de frontera:

$$C = C_\partial \text{ en } \partial\Omega_D, \text{ y } \frac{\partial C}{\partial n} = g_N \text{ en } \partial\Omega_N \quad (6.20)$$

donde

q_s es el flujo volumétrico de agua por unidad de volumen desde o hacia el acuífero representando fuentes o sumideros.

C_s es la concentración en fuentes o sumideros,

θ es la porosidad del medio, adimensional.

$\underline{\underline{D}}$ es el tensor de dispersión hidrodinámica,

$\underline{\underline{v}}$ es el vector de velocidad y

λ es el escalar que puede ser término de reacción química o decaimiento radiactivo.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Los términos del operador \mathcal{L} adquieren nombres. Al primero se le denomina término difusivo o dispersivo, al segundo se le denomina de advección o de velocidad y al tercero de reacción o de absorción.

La ecuación gobernante para el modelo de transporte con advección contiene en su término advectivo, la relación de la velocidad con la carga hidráulica:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C); \quad \text{donde } \underline{v} = \begin{pmatrix} v_x(x, y) \\ v_y(x, y) \end{pmatrix}; \quad (6.21)$$

El problema de transporte con advección está ligado a la ecuación de flujo a través de la relación correspondiente para la carga hidráulica o la variable relacionada con la presión:

$$v_i = -\frac{K_{ii}}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (6.22)$$

donde

K_{ii} es la componente principal del tensor de conductividad hidráulica;

h es la carga hidráulica.

La carga hidráulica es obtenida de la solución de la ecuación de flujo de agua subterránea, que para el caso elíptico o también caso estacionario es:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ii} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = q_s \quad (6.23)$$

donde

q_s es el flujo volumétrico de agua por unidad de volumen desde o hacia el acuífero representando fuentes o sumideros.

Es de notar que en un problema real no es tan simple y no están desacoplados flujo y transporte, de modo que el valor de la velocidad influye en la distribución por el transporte del campo concentraciones y este a su vez influye en los parámetros hidrodinámicos y en la distribución de presiones del modelo de flujo, que a su vez es base para calcula una nueva velocidad. El problema se vuelve no lineal; sin embargo su tratamiento conduce planteamientos de linealizado que quedan fuera del presente trabajo.

6.3.1 Transporte puramente difusivo

Para este caso tomamos un problema de transporte con difusión y sin advección con los siguientes parámetros:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad c = 1;$$

o simplemente

$$-u_{xx} - u_{yy} + u = f_{\Omega} \quad (6.24)$$

donde

$$f_{\Omega} = (1 - x^2 - y^2)e^{xy}$$

La Ecuación correspondiente para el operador \mathcal{L} es:

$$-\nabla^2 u + u = (1 - x^2 - y^2)e^{xy} \quad (6.25)$$

con condiciones de frontera

$$\begin{aligned} u(0, y) &= 1 \\ u(x, 0) &= 1 \\ u(x, 1) &= e^x \\ u(1, y) &= e^y \end{aligned} \quad (6.26)$$

La solución exacta es:

$$u = e^{xy} \quad (6.27)$$

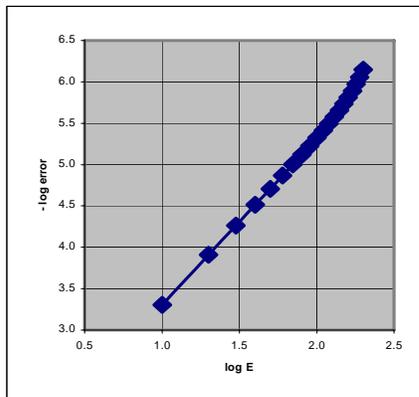


Figura 6.3: Grafica, para el ejemplo de transporte, de la relación del logaritmo del número de nodos por lado, $\log_{10}E$ versus $-\log_{10}\text{error}$, para la que el valor de la pendiente es 2.0, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

6.3.2 Transporte con advección - difusión

El problema de Transporte con advección – difusión es determinado por los siguientes parámetros.

$$\begin{cases} \underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 50 \\ 50 \end{pmatrix} \\ c = 0 \\ f_{\Omega} = -2(D+v)e^{-(x+y)} \end{cases} \quad (6.28)$$

La Ecuación correspondiente para el operador \mathcal{L} es:

$$\nabla \cdot (\underline{a} \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b} u) = -2(D+v)e^{-(x+y)} \quad (6.29)$$

con condiciones de frontera

$$\begin{aligned} u(0, y) = e^{-y} \quad u(x, 0) = e^{-x} \\ u(1, y) = \frac{e^{-y}}{e} \quad u(x, 1) = \frac{e^{-x}}{e} \end{aligned} \quad (6.30)$$

La solución exacta es:

$$u = e^{-(x+y)} \quad (6.31)$$

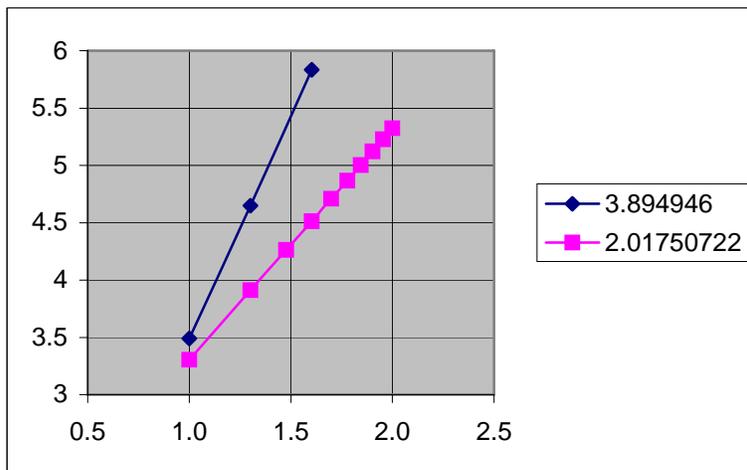


Figura 6.4: Grafica para el ejemplo, de la relación del logaritmo del número de nodos por lado, $-\log_{10}error$ vs $\log_{10}E$, para la que el valor de la pendiente es 2.0175, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales y de 3.8949, $O(h^4)$, para el caso de funciones de prueba cúbicas.

6.3.3. Advección dominante

El problema de Transporte con Advección dominante es determinado por los siguientes parámetros. Nótese que, a diferencia del anterior caso aquí se trata el caso para $f = 0$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 50 \\ 50 \end{pmatrix} \\ c = 0 \\ f_{\Omega} = 0 \end{array} \right. \quad (6.32)$$

La Ecuación correspondiente para el operador \mathcal{L} es:

$$-\nabla \cdot (\underline{a} \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b} u) = 0 \quad (6.33)$$

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (6.34)$$

con condiciones de frontera

$$\begin{array}{l} u(0, y) = 1 \quad u(x, 0) = 1 \\ u(1, y) = 0 \quad u(x, 1) = 0 \end{array} \quad (6.35)$$

La solución exacta es:

$$u = \left(\frac{e^{\alpha x} - e^{\alpha}}{1 - e^{\alpha}} \right) \left(\frac{e^{\beta y} - e^{\beta}}{1 - e^{\beta}} \right) \quad (6.36)$$

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

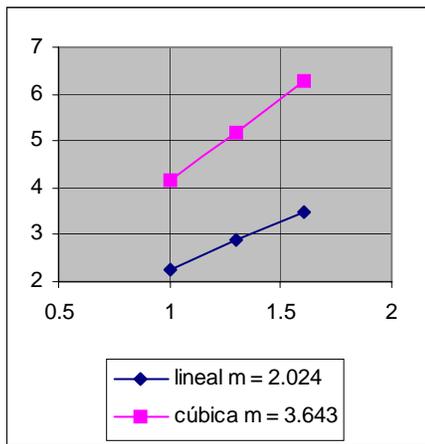


Figura 6.5: Gráficas para el problema de advección dominante para $\alpha=\beta=5$ y para $\alpha=\beta=50$.

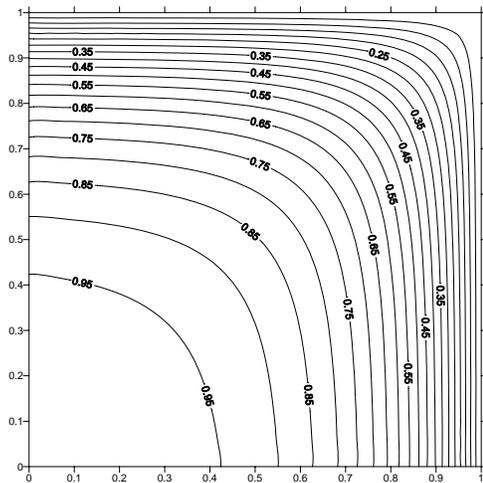
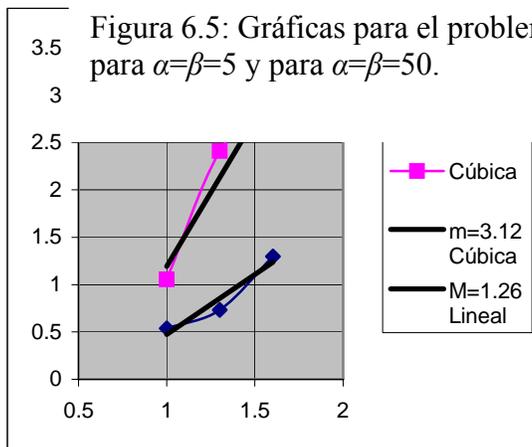


Figura 6.6:
a)
 $\alpha = \beta = 5.0$

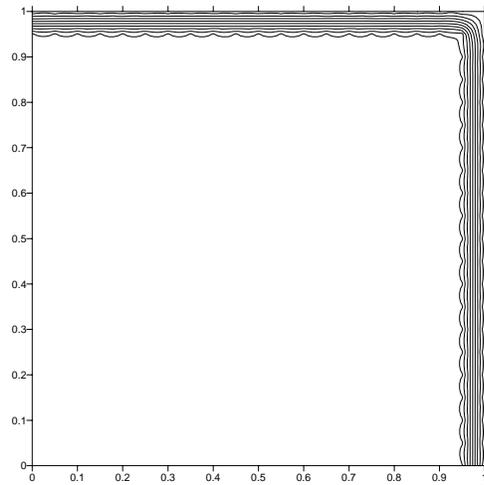


Figura 6.6:
b)
 $\alpha = \beta = 50$.

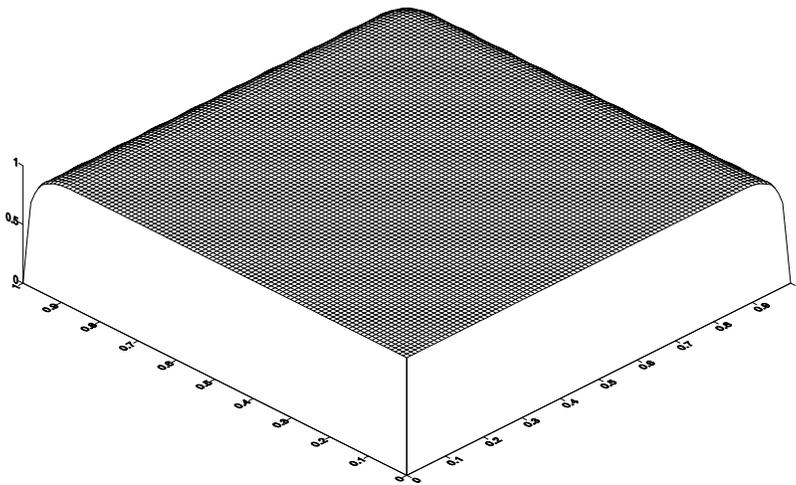


Figura 6.6: Gráficas de la solución para diferentes valores de velocidad α y β y desde diferentes perspectivas, tanto en plana como isométrica.

6.4. Problema con saltos prescritos

El problema con saltos prescritos es determinado por los siguientes parámetros.

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ c = 0 \\ f_{\Omega} = 0 \\ j_{\Sigma}^0(x, 0.5) = 4; x \in [0, 1] \end{array} \right. \quad (6.37)$$

La Ecuación correspondiente para el operador \mathcal{L} es:

$$\nabla \cdot (\underline{a} \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b} u) = 0. \quad (6.38)$$

La solución exacta es:

$$u = \begin{cases} e^x + e^y - 2; & y < \frac{1}{2} \\ e^x + e^y; & y = \frac{1}{2} \\ e^x + e^y + 2; & y > \frac{1}{2} \end{cases} \quad (6.39)$$

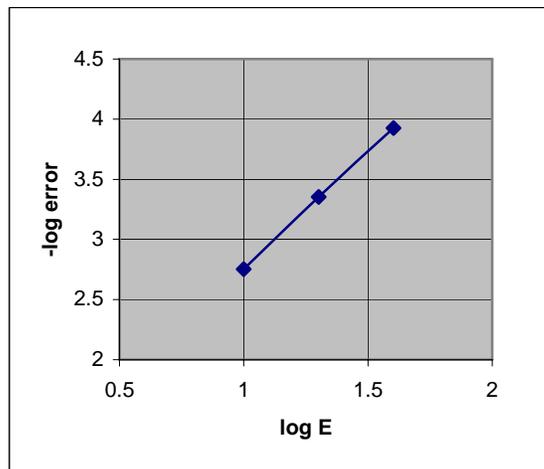


Figura 6.7: Grafica para el ejemplo 5 de la relación del logaritmo del número de nodos por lado, $-\log_{10}error$ vs $\log_{10}E$, para la que el valor de la pendiente es $m = 1.945686$, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales.

6.5. Aplicación del método de colocación T-H a mallas cuadriláteras en regiones irregulares

6.5.1. Problemas de Flujo y Transporte

Con base en las mallas para dominios irregulares en dos dimensiones de P. Barrera (Barrera, Tinoco, 1998; Barrera, et al., 2004), se hizo la adaptación de los algoritmos de solución de ecuaciones diferenciales parciales por el método de descomposición de dominios de Herrera (2002).

La ecuación diferencial parcial que se resuelve en dos dimensiones es;

$$\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu = f_{\Omega} \quad \text{en } \Omega; \quad (6.40)$$

donde

$$a = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}; \quad \underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}; \quad c = \text{escalar}; \quad (6.41)$$

con condiciones de frontera tipo Dirichlet en todos los bordes;

$$u = g \quad \text{en } \partial\Omega \quad (6.42)$$

Por ejemplo para transporte con advección el operador en dos dimensiones es:

$$\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (D\nabla u) + \nabla \cdot (vu) = f_{\Omega} \quad \text{en } \Omega \quad (6.43)$$

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

6.5.2. Problemas de Transporte con Advección

El ejemplo que inicialmente se ha resuelto es de tipo elíptico en dos dimensiones como descrito a continuación; asimismo las gráficas del comportamiento del error y de u son mostradas en las figuras siguientes.

Parámetros para el Problemas de Transporte con Advección.

$$\underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \underline{\underline{D}} \quad (6.44a)$$

$$\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 50 \\ 50 \end{pmatrix} = \underline{v} \quad (6.44b)$$

$$c = 0 \quad (6.44c)$$

$$f_{\Omega} = -2(D+v)e^{-(x+y)} \quad (6.44d)$$

Ecuación

$$\nabla \cdot (\underline{\underline{D}} \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{v} u) = -2(D+v)e^{-(x+y)} \quad (6.45)$$

Solución exacta

$$u = e^{-(x+y)} \quad (6.46)$$

Se presenta una secuencia de figuras, de la 6.8 a la 6.12, con diferentes formas de dominios para los que el método se aplicó. La figura 6.8 corresponde a un dominio rectangular con sus lados paralelos o perpendiculares a los ejes x-y. Es traída a esta sección para comparación de la solución en los dominios irregulares presentados a continuación. Las nuevas formas presentadas incluyen primero una malla con una rotación a 45 grados, rectangular y luego formas trapezoidal, luego se presentan las de forma de franja y de forma cóncava – convexa.

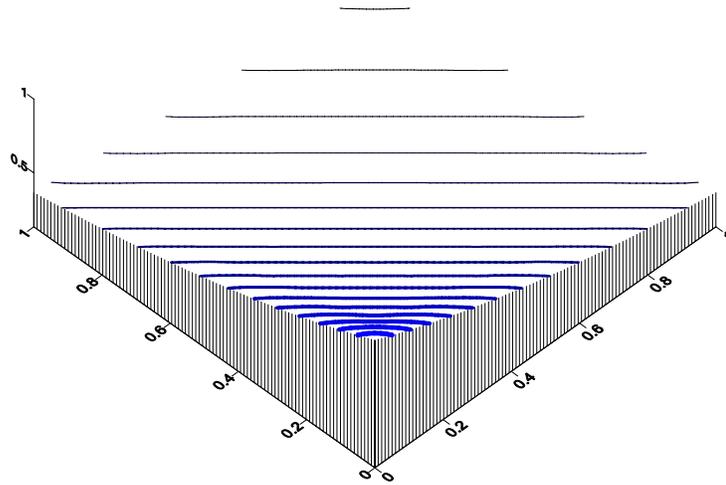
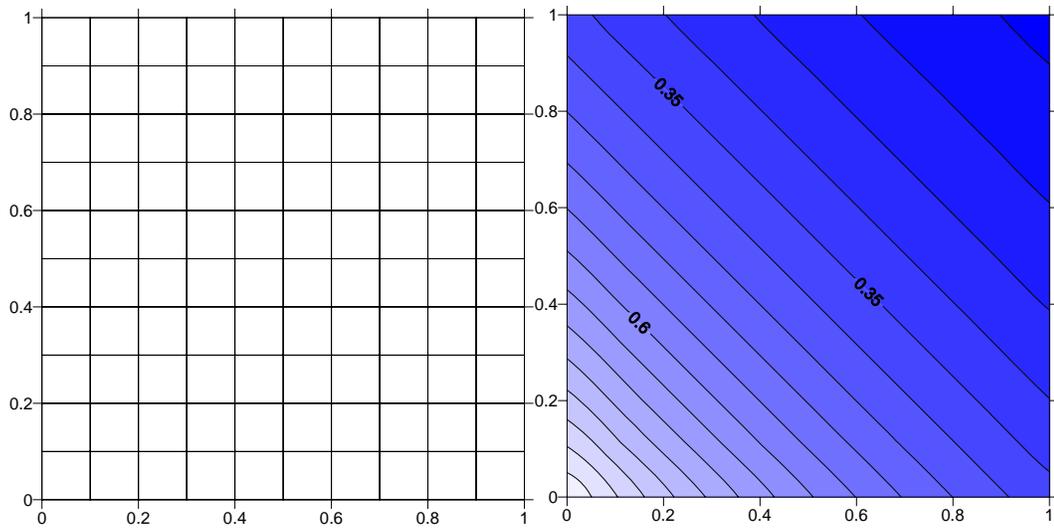


Figura 6.8: Malla regular con la solución normalmente obtenida en rectángulos ortogonales.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

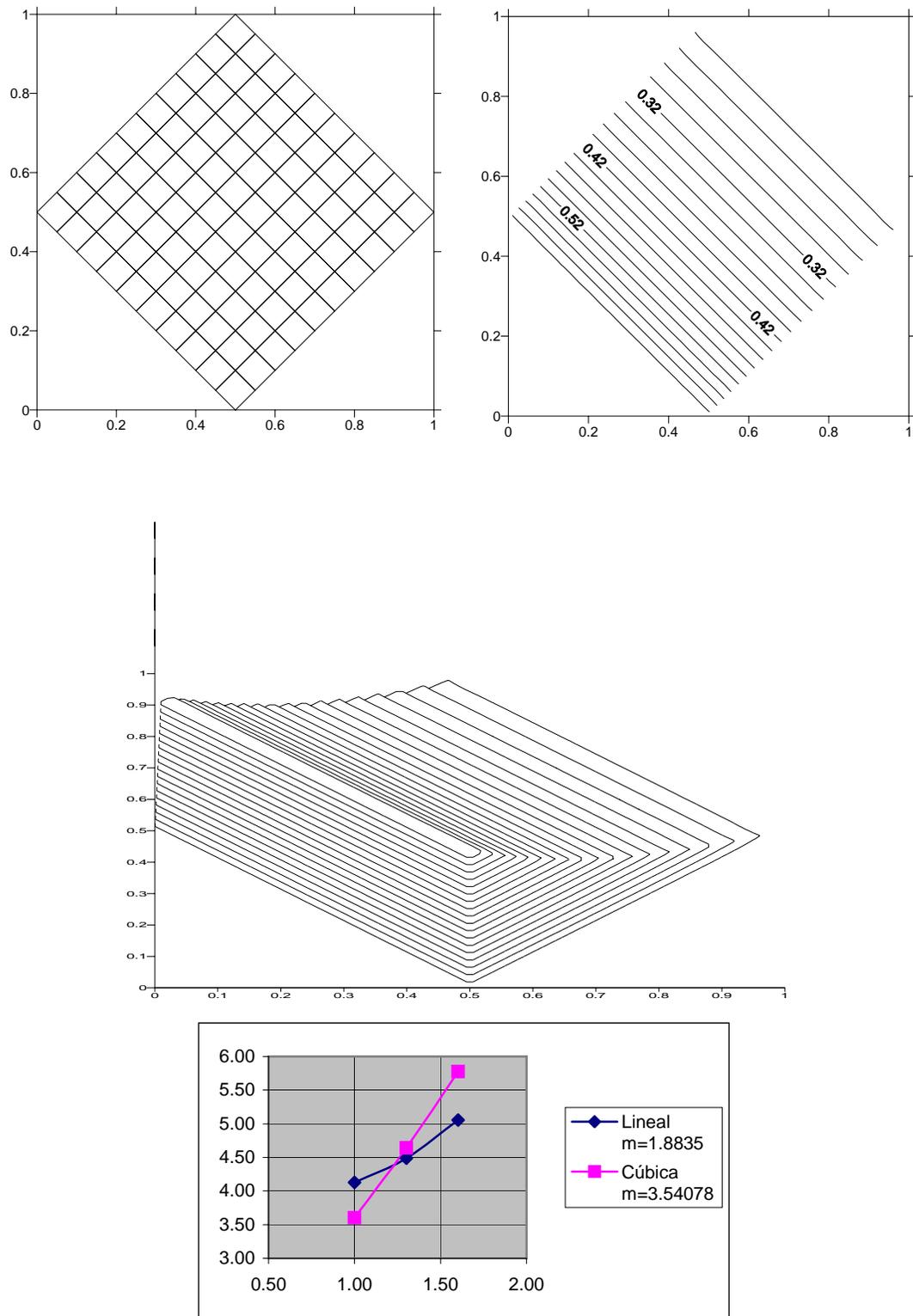


Figura 6.9: Malla regular con la solución obtenida en rectángulos con rotación de 45° .

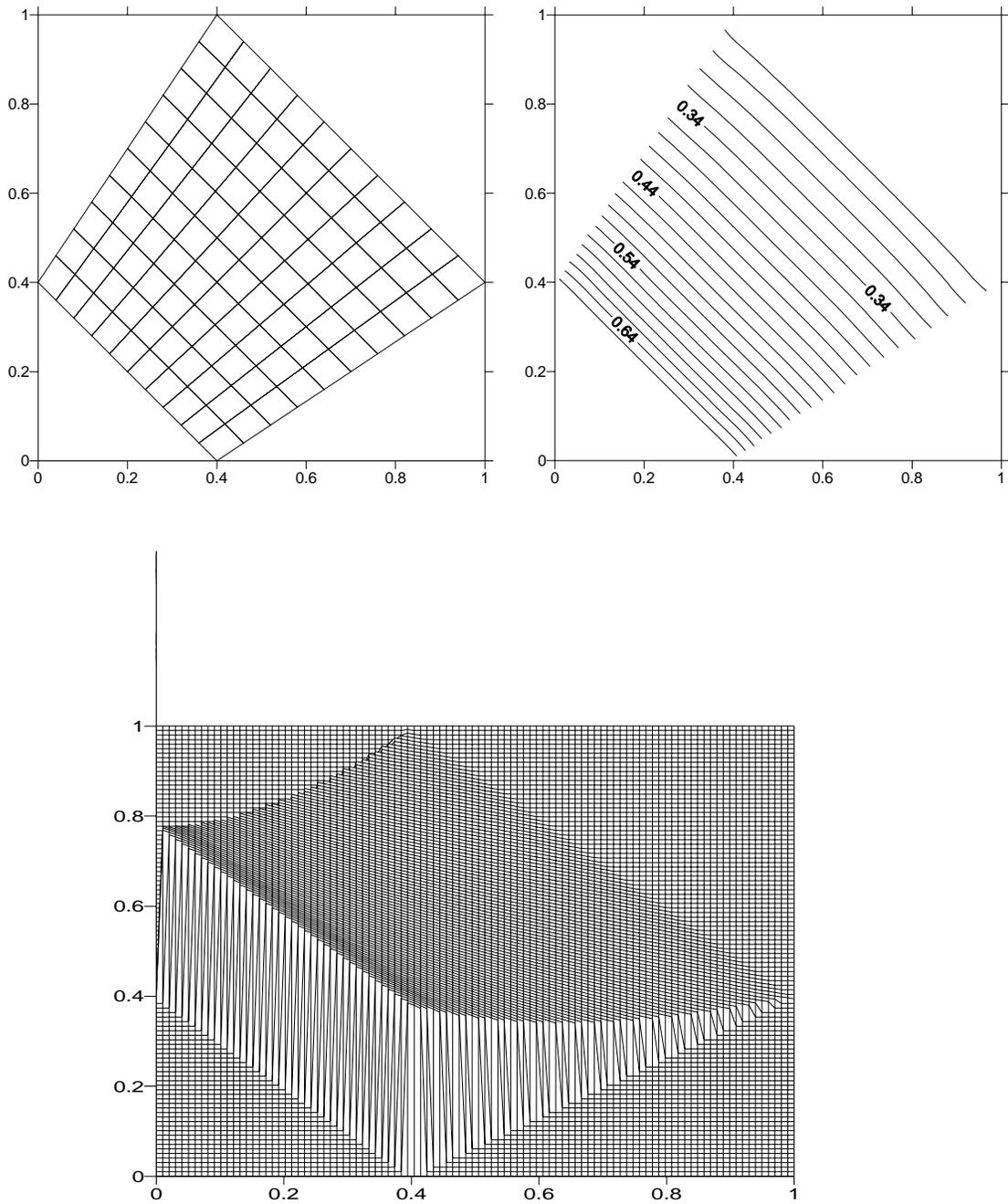


Figura 6.10: Malla irregular con la solución obtenida en cuadriláteros con rotación de 45° y deformación.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

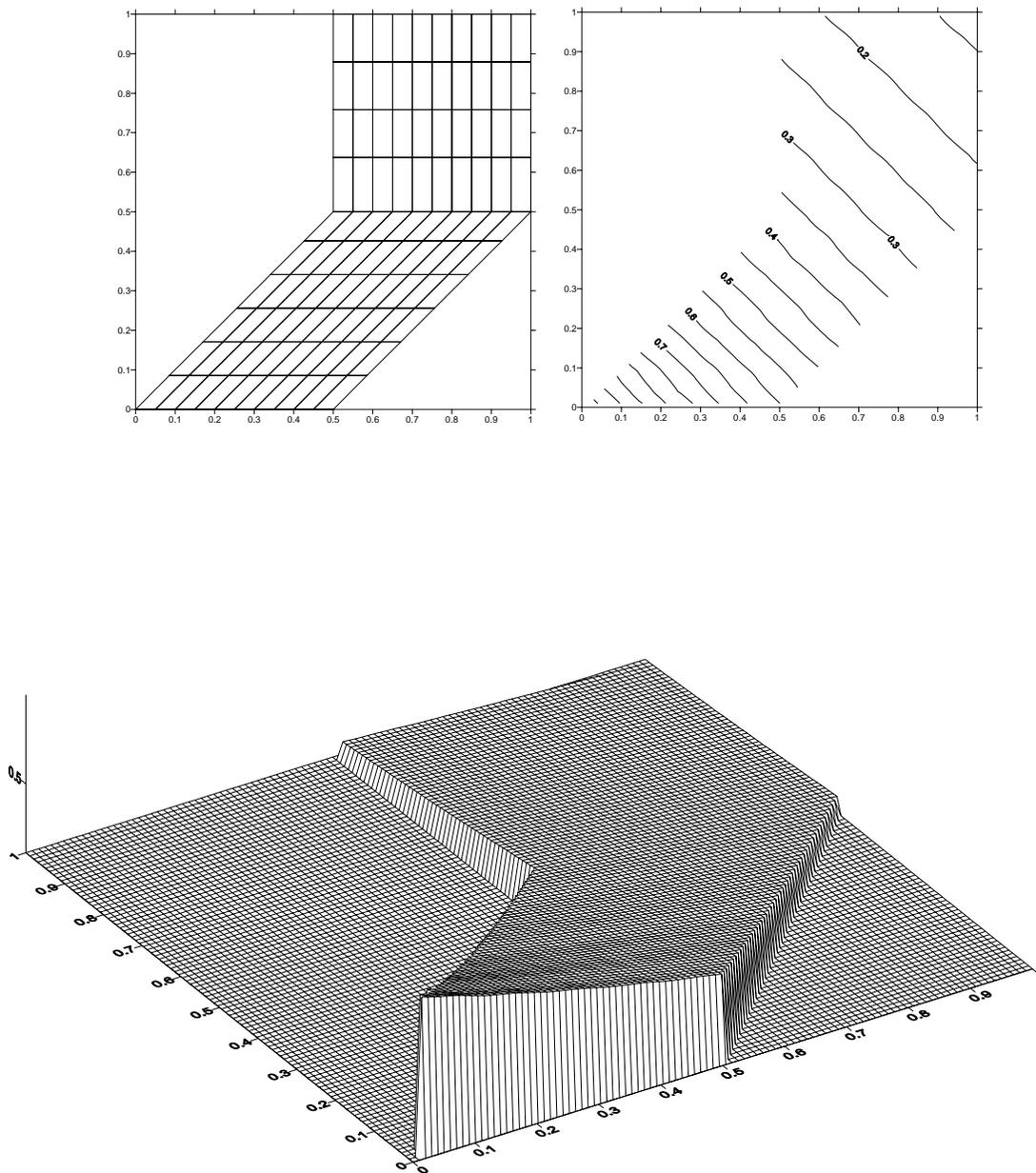


Figura 6.11: Malla irregular con la solución normalmente obtenida, para el problema de transporte con advección con 10×10 elementos

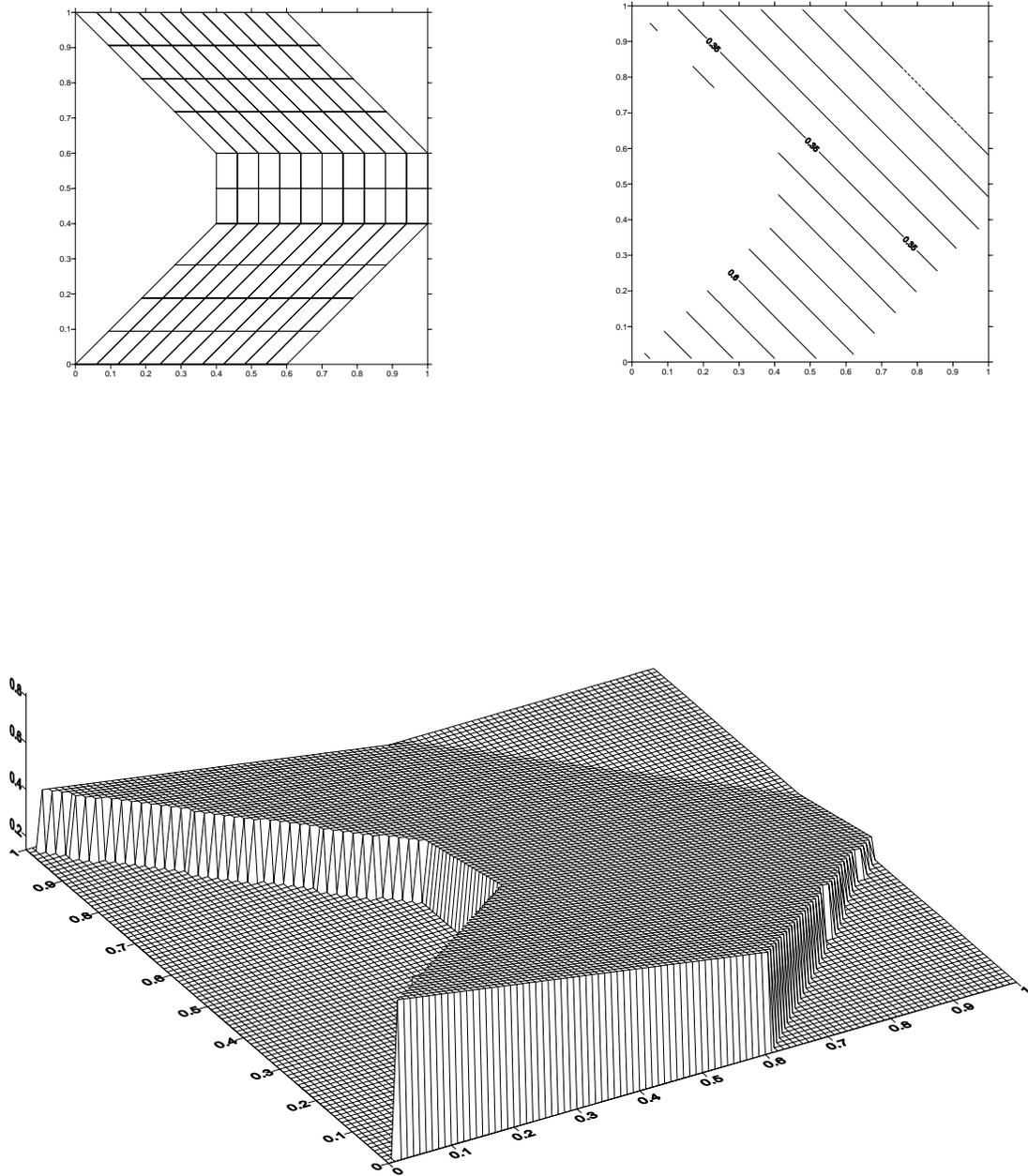


Figura 6.12: Malla irregular con la solución normalmente obtenida, para el problema de transporte con advección con 10x10 elementos

6.5.3. Problema con saltos prescritos

El ejemplo que se ha resuelto contiene un salto y es de tipo elíptico en dos dimensiones: es descrito a continuación; asimismo las gráficas del comportamiento del error y de u son mostradas en las figuras siguientes. Un fenómeno físico correspondiente en la realidad, es el caso de transporte de advección dominante con un frente abrupto de concentración.

Parámetros para el problema con saltos prescritos.

$$\underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{6.47}$$

$$\underline{c} = 0$$

$$f_{\Omega} = 0$$

Ecuación

$$\nabla \cdot (\underline{a} \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b} u) = 0. \tag{6.48}$$

Solución exacta

$$u = \begin{cases} e^x + e^y - 2; & y < \frac{1}{2} \\ e^x + e^y; & y = \frac{1}{2} \\ e^x + e^y + 2; & y > \frac{1}{2} \end{cases} \tag{6.49}$$

Se presenta una secuencia de figuras, de la 6.13 a la 6.15, con diferentes formas de dominios para los que el método se aplicó. La figura 6.13 corresponde a un dominio rectangular con sus lados paralelos o perpendiculares a los ejes x-y. Es traída a esta sección tanto para mostrar el salto como para comparación de la solución en los dominios irregulares presentados a continuación. Las nuevas formas presentadas incluyen primero una malla con una forma de franja y luego la de forma cóncava – convexa.

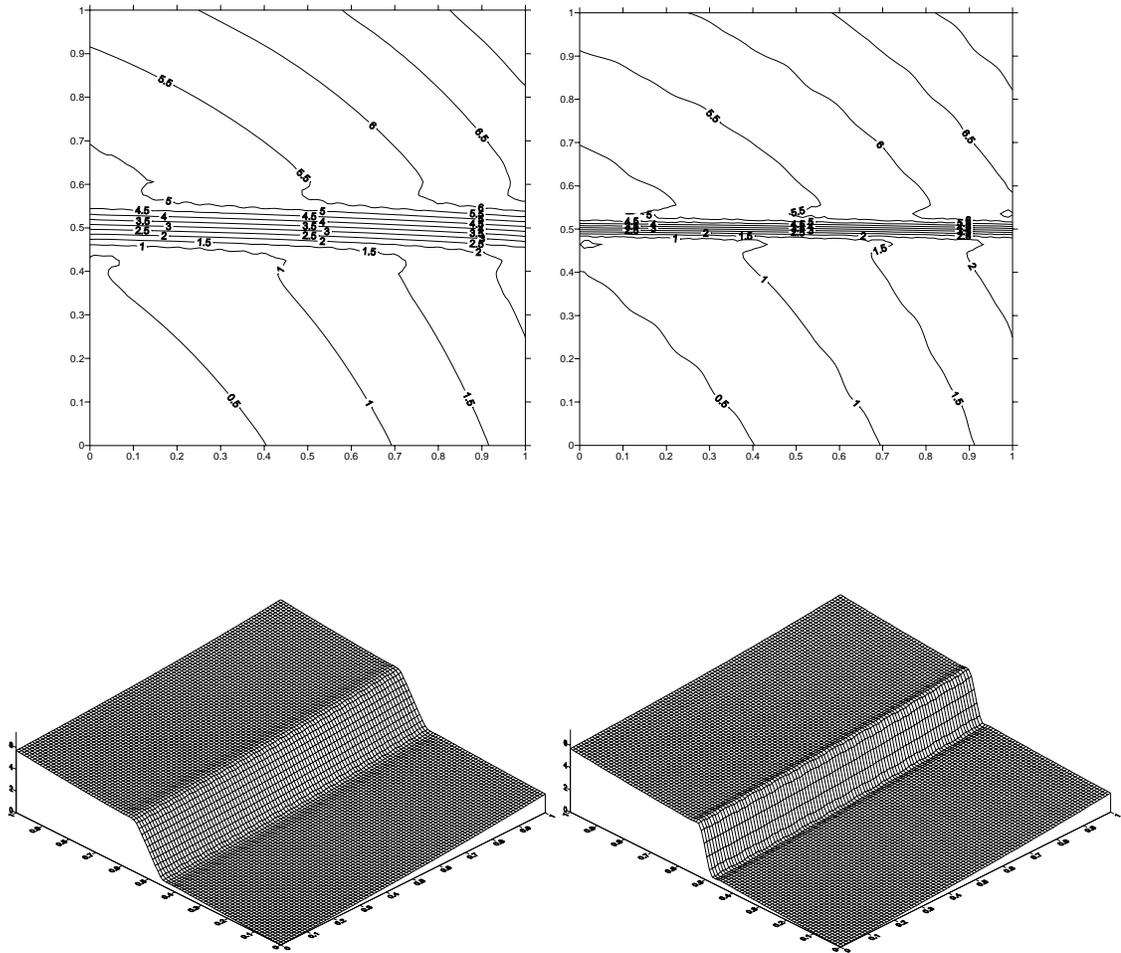


Figura 6.13: Malla regular con la solución normalmente obtenida en rectángulos ortogonales, para el problema con saltos prescritos con 20x20 elementos, a la izquierda, y 40x40 elementos a la derecha.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

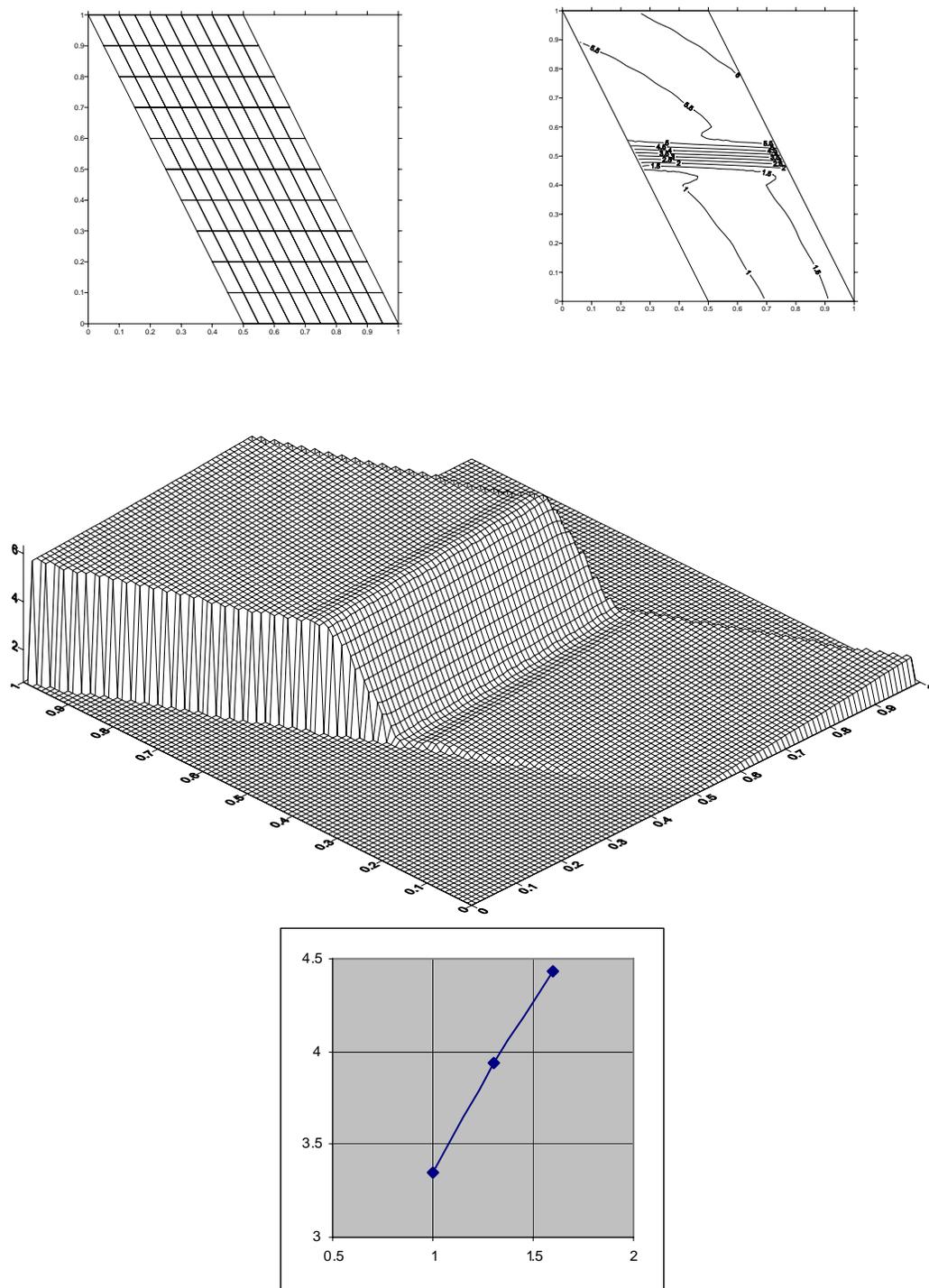


Figura 6.14: Malla irregular con la solución normalmente obtenida en paralelogramos, para el problema con saltos prescritos con 10×10 elementos, arriba, y 40×40 elementos en medio, abajo la gráfica con pendiente $m = 1.808487$, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales.

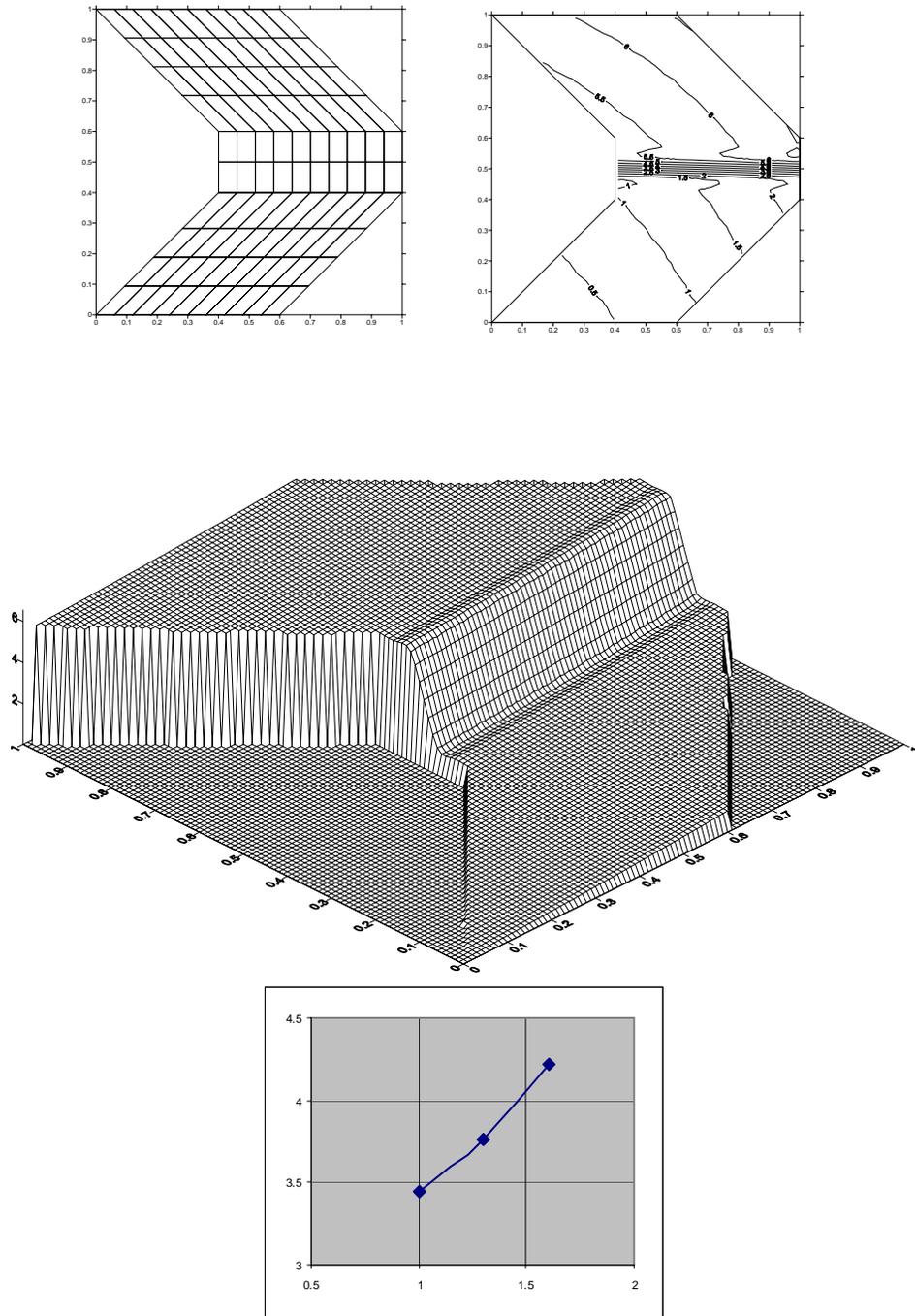


Figura 6.15: Malla para dominio irregular cóncavo y convexo, con la solución obtenida en paralelogramos, para el problema con saltos prescritos con 10×10 elementos, arriba, y 40×40 elementos, en medio: abajo la gráfica con pendiente $m = 1.494431$ para el caso de funciones de prueba lineales.

6.6. Validación cuando la solución exacta no es conocida

6.6.1. Metodología

Aquí suponemos que no contamos con una solución analítica, es decir que si bien existe solución, ésta es desconocida, que es el caso común en un problema real, para el que tenemos como información los parámetros de la ecuación.

Cuando la solución exacta no es conocida la validación es posible por varios métodos, entre ellos están: la comparación con otros métodos similares para los que es conocida la solución; por métodos experimentales para problemas físicos; y el método de la independencia de la malla. Este último es el que se aborda aquí. La malla es refinada en varios múltiplos de una malla inicial (10x10) siendo la malla más fina (100x100), la considerada la solución más exacta, contra la que se comparan los nodos de otras mallas. Para esto es necesario que algunos nodos en todas las mallas coincidan en su posición para permitir la comparación y validación.

Utilizando las funciones lineales en Ω se resolvió numéricamente la ecuación

$$\begin{aligned} \mathcal{L} u &\equiv -e^{x-y} u_{xx} - u_{yy} + e^x u \\ f(x) &= -2e^x - x^2 e^y + x^2 e^{x+y} \end{aligned} \quad (6.50)$$

y condiciones de frontera

$$\begin{aligned} u(0, y) &= 0 \\ u(x, 0) &= x^2 \\ u(x, 1) &= e \cdot x^2 \\ u(1, y) &= e^y \end{aligned} \quad (6.51)$$

La gráfica de la solución y la gráfica de la convergencia de la solución se presentan, así como el listado para la solución, aplicando el método, en los puntos de la malla para $N=10$.

El problema planteado se transforma a la forma del operador siguiente

$$\mathcal{L} u \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{a}} \nabla u + \nabla \cdot (\underline{\underline{b}} u) + c u \quad (6.52)$$

donde los parámetros son

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{a}} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{x-y} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \underline{\mathbf{b}} &= \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{x-y} \\ 0 \end{pmatrix} \\ c &= e^x - e^{x-y} \end{aligned} \quad (6.53)$$

Misma que se resuelve para los elementos donde se aplican las funciones base y de prueba. A continuación se incluyen las figuras.

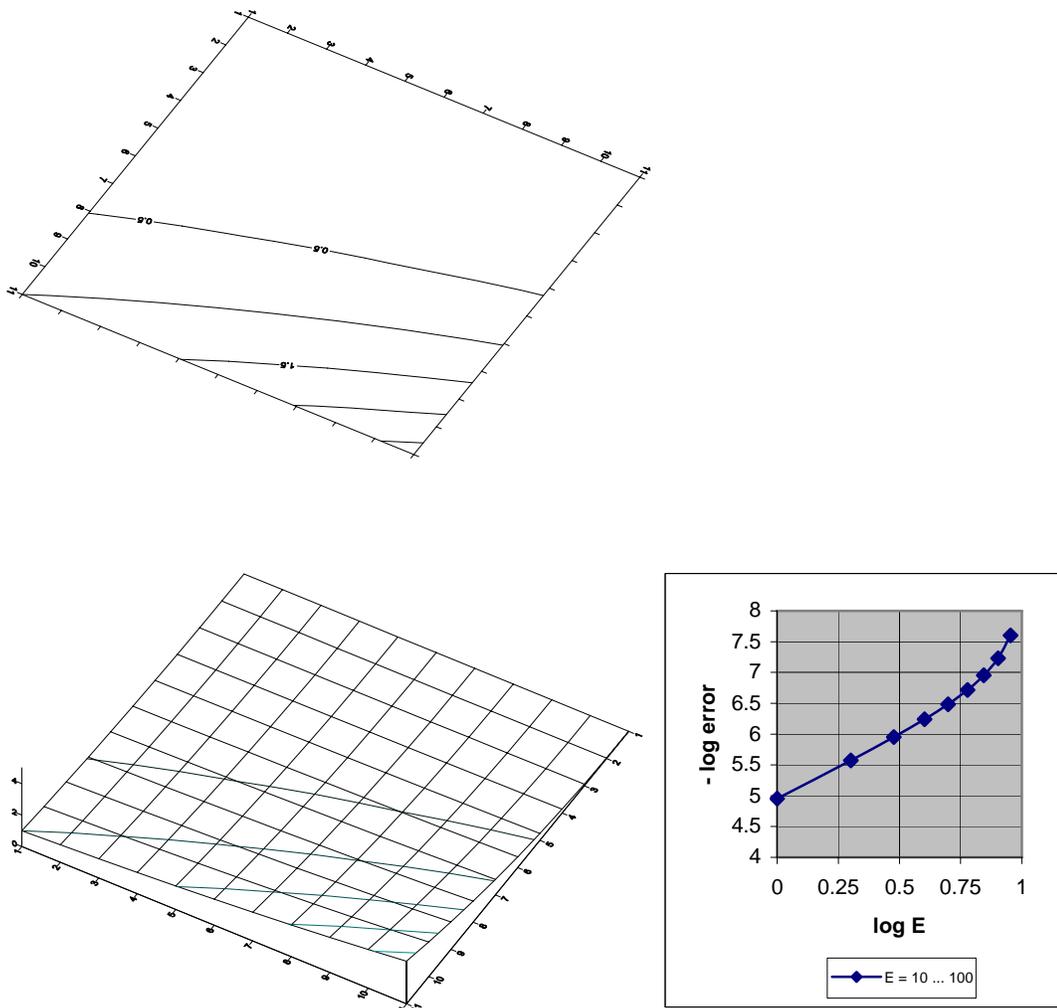


Figura 6.16: Malla regular con la solución obtenida, para el problema de Validación cuando la solución exacta no existe. En la gráfica la pendiente es $O(h^2)$.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

La coincidencia de los nodos que se comparan puede ser no suficiente, porque si solo se hace la comparación en nodos coincidentes no sabemos lo que pasa en los nodos restantes; puede ser que la diferencia sea grande y puede mostrar que no se ha alcanzado una malla correcta. Lo que entonces es necesario es calcular, por medio de un proceso de interpolación, el error sucesivo, de dos en dos mallas, en todos los nodos, y verificar cual es el error máximo (norma infinito discreta). A continuación se incluyen los resultados.

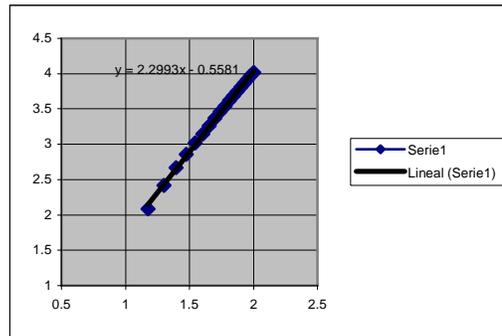


Figura 6.17: gráfica de error máximo por norma infinito que se apega a la pendiente prevista de dos. Se comparó el resultado de la malla previa interpolada con la malla resolución en la secuencia de 10, 15, 20, 25, ... , 100.

Nº E	Error		
	norma infinito	$\text{Log}_{10} E$	$-\text{Log}_{10} \text{Error}$
15	0.008132	1.176091	2.089829
20	0.003828	1.301030	2.417068
25	0.002141	1.397940	2.669481
30	0.001382	1.477121	2.859346
35	0.000961	1.544068	3.017102
40	0.000709	1.602060	3.149113
45	0.000542	1.653213	3.265662
50	0.000430	1.698970	3.366727
55	0.000347	1.740363	3.459085
60	0.000288	1.778151	3.540911
65	0.000242	1.812913	3.616603
70	0.000206	1.845098	3.686090
75	0.000178	1.875061	3.749940
80	0.000155	1.903090	3.810531
85	0.000136	1.929419	3.865708
90	0.000120	1.954242	3.919180
95	0.000108	1.977724	3.967969
100	0.000096	2.000000	4.015556

Tabla 6.1: Datos correspondientes a evaluación del error por norma infinito

6.7. Resultados para elementos finitos con funciones óptimas

Para modelos de **flujo estable o flujo estacionario** en acuíferos confinados la ecuación diferencial parcial que inicialmente se aborda, para propósitos de probar el método, para dos dimensiones, es la expresada por la siguiente ecuación:

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial h}{\partial y}\right)=R(x,y) \quad (6.54)$$

donde h es el nivel piezométrico, K_{xx} y K_{yy} son las conductividades hidráulicas en las direcciones x e y , y la expresión en el lado derecho de la ecuación es la distribución espacial de la recarga vertical por infiltración de masa de agua. Las condiciones de frontera obedecen a la expresión

$$h(x,y)=h_0, \quad \text{en } \partial\Omega. \quad (6.55)$$

El problema equivale a encontrar $u = h(x, y)$ tal que:

- Parámetros:

$$\underline{\underline{\mathbf{a}}} = \begin{pmatrix} K_{xx}(x,y) & 0 \\ 0 & K_{yy}(x,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \underline{\underline{\mathbf{K}}};$$

$$\underline{\underline{\mathbf{b}}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (6.56)$$

$$c = 0;$$

- Operador:

$$\mathcal{L}h \equiv -\nabla \cdot (\underline{\underline{\mathbf{K}}}\nabla h) = R \quad (6.29)$$

- Tomando el caso donde

$$R = 2(1-x^2) + 2(1-y^2) \quad (6.30)$$

- condiciones de frontera:

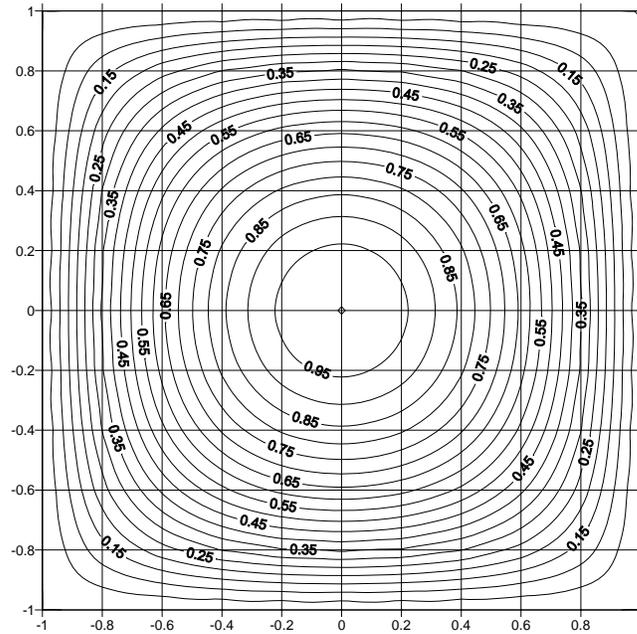
$$h_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega, \quad (6.57)$$

Su solución es conocida: $(1.0 - x*x)*(1.0 - y*y)$

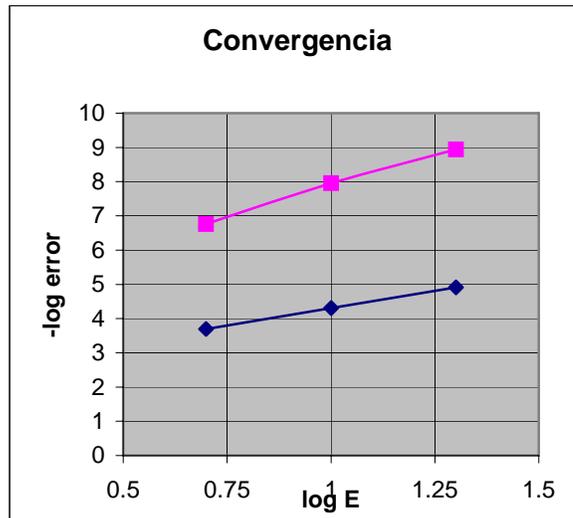
$$u = (1-x^2)(1-y^2) \quad (6.58)$$

Se aplica a un dominio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$; a continuación se muestran en la figura las graficas del dominio, isolíneas de la solución resultante, y la gráfica de las rectas de puntos para varias mallas y para funciones de prueba lineales y cúbicas.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS



a) Dominio, malla e isolíneas



b) relación entre el número de elementos y el error

Figura 6.1: Grafica, para el ejemplo de flujo estable, tipo Poisson, de la relación del logaritmo del número de nodos por lado, $-\log_{10} \text{error}$ versus $\log_{10} E$, para la que el valor de la pendiente es 2.02, $O(h^2)$, para el caso de funciones de prueba lineales y de 3.96 para funciones de prueba cúbicas.

6.8. Evaluación del orden del error para diferentes mallas

Para propósitos de probar el método para diferentes formas de la malla y en consecuencia de los elementos, existen varias metodologías: de acuerdo con Q. Lin, (1994), mallas de diferentes formas tienen diferentes órdenes de convergencia del error: con base en esto se establece una clasificación. Para la ecuación diferencial parcial que inicialmente se aborda, para modelos de **flujo estacionario** y en dos dimensiones, se establecieron los siguientes tipos:

- 0) Malla rectangular: el error tiene orden $O(h^4)$, de superconvergencia; Que es la pendientes en la gráfica de $-\log(\text{error})$, que hemos aplicado en este trabajo.
- 1) Mallas rectangulares deformadas, esto es, mapeadas desde una malla rectangular: el error tiene orden $O(h^4)$ de superconvergencia;
- 2) Mallas rectangulares deformadas por tramos, esto es, compuestas de varias mallas rectangulares deformadas: orden $O(h^2)$ de superconvergencia;
- 3) Mayormente deformada malla rectangular, esto es, la malla rectangular deformada con inserción de unas pocas capas de de elementos irregulares: orden $O(h^1)$ de superconvergencia;
- 4) Malla irregular: orden $O(h^0) = O(1)$, de convergencia, es decir ninguna convergencia.

6. EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Tabla 6.2: Relación de orden de error para diferentes formas de mallas y de elementos correspondientes para el caso de advección dominante.

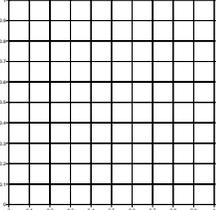
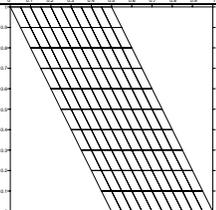
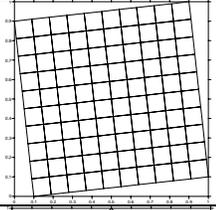
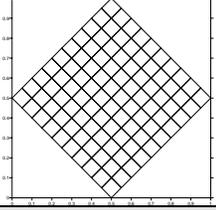
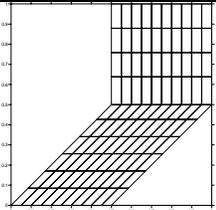
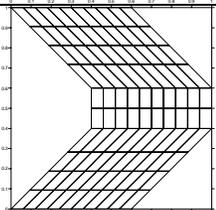
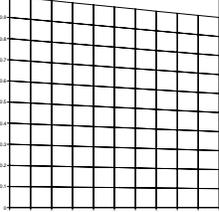
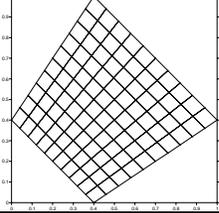
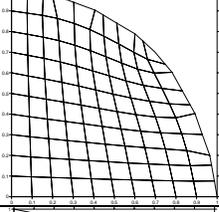
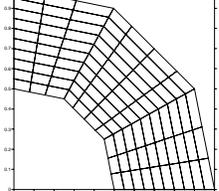
TIPO DE MALLA	$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial u}{\partial y} = 0$	GRÁFICOS DE MALLAS Y SUS ELEMENTOS
0)	ERROR $O(h^4)$	
0	4.505	
E	4.298	
1)	ERROR $O(h^4)$	
A	3.68	
B	3.97	
2)	ERROR $O(h^2)$	
F	1.94	
	1.82	

Tabla 6.2: Continuación.

3)	ERROR $O(h^1)$	
H	0.994	
4)	ERROR $O(h^0) = O(1)$	
C	0.44	
D	0.21	
J	0.29	

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES

Esta tesis contribuye con nuevos procedimientos a la aplicación de los métodos de descomposición de dominios en la modelación de sistemas continuos en las Ciencias de la Tierra. Los logros obtenidos consisten en el desarrollo de métodos numéricos para ecuaciones diferenciales parciales para problemas de flujo y transporte, cuya solución se da con mayor exactitud y con capacidad para incorporar nuevas opciones: se abordan funciones de peso cuadráticas y cúbicas en el interior, que dan lugar a métodos con uno y cuatro puntos de colocación; incorpora una nueva metodología de construcción de las funciones óptimas de peso y de base con aplicación del método de elementos finitos; se desarrollan y aplican los métodos mencionados, primero en regiones representadas por cuadriláteros regulares o rectangulares y luego con cuadriláteros irregulares.

7.1. Marco Teórico

En cuanto al marco teórico, los Métodos de *colocación TH* se puede concluir lo siguiente:

1. Se ha demostrado que poseen importantes ventajas tales como tener matrices mejor estructuradas que, por ejemplo los métodos de elementos finitos, y que conservan su forma simétrica y positiva cuando el operador tiene esas propiedades.
2. Se ha mostrado la flexibilidad para seleccionar los espacios polinomiales aproximantes: los polinomios usados en la frontera interna y en el interior de los subdominios de la partición pueden ser diferentes. En particular las nuevas formas de aplicar colocación ortogonal han surgido y han alcanzado ya un considerable desarrollo.

7. CONCLUSIONES

El trabajo que se ha desarrollado en esa línea de investigación está orientado a simplificar y diversificar sus aplicaciones.

3. Como consecuencia de mostrar que el número de puntos de colocación aplicados puede ser reducido de cuatro a un punto de colocación, disminuyen entonces las operaciones necesarias, el espacio en memoria y el tiempo de cálculo, el grado de los polinomios aproximantes requeridos para su implementación se reduce, de cúbicas a cuadráticas, en el interior de cada uno de los subdominos de la partición, y se mostró que las pendientes de la recta de convergencia se mantienen con las mismas pendientes convergencia cuando se aplican las mismas funciones en la interfaz Σ , aunque desciende el nivel promedio de la recta, o sea su cruce con el eje de las ordenadas (eje y).
4. En este trabajo se ha mostrado que los métodos Trefftz-Herrera (TH) constituyen una teoría muy general de los métodos de Galerkin discontinuos. Ellos han dado lugar a formas novedosas de discretizar los modelos de los sistemas continuos usados en Ciencias de la Tierra.

7.2. Aplicación a Modelos de Flujo y Transporte

Con base en los resultados de la solución numérica de ecuaciones de flujo y transporte obtenidas en este trabajo se puede concluir lo siguiente:

5. Se mostró la gran generalidad del método al ser posible su aplicación a prácticamente cualquier ecuación diferencial parcial o sistema de tales ecuaciones que ocurren en ciencia e ingeniería, hecho que requiere mayor sofisticación en otros métodos como el de elementos finitos en especial con advección dominante. Específicamente se ha mostrado la aplicación del método a la más general forma de ecuación elíptica de segundo orden y para diversos problemas de tipo flujo y transporte.

6. Con base en la formulación de algoritmos para Galerkin discontinuo, se lograron códigos de simulación numérica que conducen a restricciones a subdominios donde la condición de interfaz es dato prescrito. Se mostró específicamente la obtención de la solución numérica cuando se presentan discontinuidades de salto tanto de la función como de la derivada en una interfaz interior.
7. Se desarrollaron aplicaciones con base en el método de Elementos Finitos que es precedida de una formulación para funciones óptimas tanto para funciones de base como de prueba, tipo Petrov-Galerkin. La nueva formulación para métodos de elementos finitos implantados en códigos desarrollados para esta tesis es importante al incluir una reducción en el número de grados de libertad y abre entonces el panorama para los métodos T-H.
8. Una contribución importante está constituida por el tratamiento de regiones irregulares utilizando los métodos de generación de mallas irregulares. Se desarrollaron y aplicaron los métodos primero en regiones regulares y luego en regiones irregulares. El caso que implica a las regiones cuadriláteras irregulares, escenario que no se había explorado, queda cubierto ahora para nuevas formas de dominios físicos.
9. Cuando se trata con operadores diferenciales positivos y simétricos, las matrices positivas definidas derivadas por colocación TH permiten la aplicación directa del método de gradiente conjugado al combinarse con métodos de descomposición de dominios.
10. Se mostró la aplicación de método a casos provenientes de casos reales así como para casos en que la solución no es conocida, para los que se probó la convergencia por comparación con otros métodos o por el método de independencia de la malla y cuya solución se mantiene con la pendiente prevista teóricamente.

7.3. Desarrollo futuro

Con base en los resultados preliminares de la solución numérica de ecuaciones de flujo y transporte obtenidas en este trabajo se puede concluir lo siguiente:

11. Diversos trabajos ya han abordado el tratamiento de las ecuaciones parabólicas, por lo que en el desarrollo futuro se requiere demostrar la versatilidad para aplicaciones al caso evolutivo.
12. Recientemente en trabajos de esta línea se han abordado ejemplos de dominios en tres dimensiones y se puede implantar la versatilidad, aquí demostrada en dos dimensiones, en tres dimensiones.
13. Se ha mostrado que los métodos T-H son altamente paralelizables: los códigos implementados ya incluyen el método descomposición de dominios y el desarrollo reciente incluye el algoritmo en paralelo.

BIBLIOGRAFÍA

- Allen, M. B., "How Upstream Collocation Works," *Water Resources Program Report* WR-82-2, Princeton University, 1982.
- Allen, M. B. and G. F. Pinder, "Collocation Simulation of Multiphase Porous-Medium Flow," *Society of Petroleum Engineers Journal*, Vol. 23, No. 1, pp. 135-142, 1983.
- Barrera, P. and Tinoco, G., "Smooth and Convex Grid Generation over General Plane Regions," *Mathematics and Computers in Simulation*, (46) 2, pp 87-102, 1998.
- Barrera, P., González, G. y García I., "*Manual Operativo del sistema UNAMALLA v 2.0 para PC: Generación de mallas cuadrilátera estructuradas sobre regiones planas irregulares*," Facultad de Ciencias, UNAM, México, 2004.
- Berlanga, R. and Herrera, I., "The Gauss Theorem for Domain Decompositions in Sobolev Spaces," *Applicable Analysis: An International Journal*, Vol. 76 (1-2), pp 67-81, 2000.
- Carey, G.F. and B. A. Finlayson, "Orthogonal Collocation on Finite Elements", *Chem. Engrg. Sci.*, Vol. 30, pp. 587-596, 1975.
- Celia, M. A., "*Collocation on Deformed Finite Elements and Alternating Direction Collocation Methods*," Ph. D. dissertation, Princeton University, 1983.
- Celia, M. A., "Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for contaminant transport simulations," *Computational Methods in Water Resources*, X, 1: 207-216, 1994.
- Celia, M. A., Russell, T. F., Herrera, I. and Ewing, R. E., "An Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method for the Advection-Diffusion Equation," *Advances in Water Resources*, 13(4), pp.187-206, 1990.
- Ciarlet, P. G., "*The finite element methods for elliptic problems*", North-Holland, , The Netherlands, 1978
- deBoor, C. and B. Swartz, "Collocation at Gaussian Points," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 10, No. 4, pp. 582-606, 1973.

BIBLIOGRAFÍA

- Díaz, M. A., “Desarrollo del Método de Colocación Trefftz – Herrera. Aplicación A Problemas De transporte en las Geociencias,” Tesis, Posgrado en Ciencias de la Tierra, UNAM, México, 2001.
- Díaz-Viera, M., D. A . López-Falcón, I. Herrera, “Modeling of the dynamics of combustion fronts in porous media through the systematic formulation of continuum mechanics,” to be published, 2006.
- Díaz-Viera, M., D. A . López-Falcón, I. Herrera, “Trefftz-Herrera Collocation Method for Combustion Fronts in Oil Reservoirs: Application”, 7th World Congress on Computational Mechanics, Los Angeles, 2006.
- Douglas, J., Jr., “A Superconvergence Reult for the Aproximate Solution of the Heat Equation by a collocation meted,” in *The mathematical Foundation of Finite Element Method wirh Applications to Partial Differential Equations*, Aziz (ed.), Academic, Press, New York, 1972.
- Douglas, J., Jr. and T. Dupont, “A Finite Element Collocation Method for Quasilinear Parabolic Equations,” *Math. of Comp.*, Vol. 27, No. 121, pp. 17-28, 1973.
- Douglas, J., Jr. and T. Dupont, “Collocation Method for Quasilinear Parabolic Equations in a single Space Variable Based on C^1 -Pecewise-Polinomial Spaces,” *Lecture Notes in Mathematics*,” 385, Springer-Verlag, New York, 1974.
- Ferguson, N. B. And B. A. Finlayson, “Transient chemical Reaction Analysis by Orthogonal Colocation,” *Chem. Engrg. Journal*, 1, 327-335, 1970.
- Finlayson, B. A., “*The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*”, Academic, New York, 1972.
- Frind, E. O. and G. F. Pinder, “A Collocation Finite Element Method for Potential Problems in Irregular Domains,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 14, pp. 681-701, 1979.
- Hernández, G. y J. J. Carrillo, “Estimate of non-linear subsidence response in time for the aquitard of Mexico City,” *Geografía y Desarrollo*, Vol. 15, pp. 47-56, 1997.
- Herrera, G. and I. Herrera, “An Eulerian-Lagrangian method of cells, based on localized adjoint methods,” *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 10: 205-223, 1994.

- Herrera, I., "Integrodifferential Ecuations for Systems of Leaky Aquifers and applications. Part 2: Error Analysis of Approximate Theories," *Water Resources Research*, 10(4), pp. 811-820, 1974.
- Herrera, I., "*Boundary Methods: An Algebraic Theory*," Pitman Advance Publishing Program, Boston, London, Melbourne, 1984.
- Herrera, I., "Unified approach to numerical methods. Part 1. Green's formulas for operators in discontinuous fields," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 1 **No. 1**, pp. 12-37, 1985.
- Herrera, I., "Some Unifying Concepts in Applied Mathematics," *The Merging of Disciplines: New Directions in Pure, Applied, and Computational Mathematics*, Edited by R.E. Ewing, K.I. Gross and C.F. Martin, Springer Verlag, New York, pp. 79-88, 1986.
- Herrera, I., "The Algebraic Theory Approach for Ordinary Differential Equations: Highly Accurate Finite Differences," *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 3, No, 3, pp. 199-218, 1987.
- Herrera, I., "New Approach to advection-dominated flows and comparison with other methods," *Computational Mechanics '88*, Springer-Verlag, Vol. 2, Heidelberg, 1988.
- Herrera, I., "Unified approach to numerical methods. Part 1. Green's formulas for operators in discontinuous fields," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 1(3), pp. 12-37, 1985.
- Herrera, I. "Localized Adjoint Method: Topics for Further Research," *Computational Methods in Water Resources IX*, Vol. I: Numerical Methods in Water Resources, T.F. Russell, R.E. Ewing, C.A. Brebbia, W.G. Gray & G.F. Pinder, Computational Mechanics Publications, Southampton & Boston, pp 9-12, 1992a.
- Herrera, I. "Localized Adjoint Methods: A New Discretization Methodology," Chapter 6 of the book: "*Computational Methods in Geosciences*", W.E. Fitzgibbon & M.F. Wheeler Eds., SIAM, pp. 66-77, 1992b.
- Herrera, I., "On operator extensions: the algebraic theory approach," *Advances in Optimization and Numerical Analysis*, (Proceedings of the VI Workshop on

BIBLIOGRAFÍA

- Optimization and Numerical Analysis, Oaxaca, Oax. México, January, 1992),
Mathematics and its Applications, Kluwer Academic Publishers, :155-163, 1992c.
- Herrera, I., “Innovative discretization methodologies based on LAM”. *Finite Elements in Fluids: New Trends and Applications*, Vol. 2. K. Morgan et al. (eds). Pineridge Press. : 1437-1447, 1993.
- Herrera, I., “Trefftz-Herrera Domain Decomposition,” *Special Volume on Trefftz Method: 70 Years Anniversary; Advances in Engineering Software*, 24, pp. 43-56, 1995.
- Herrera, I., “Trefftz Method: A General Theory,” *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 16 (6) pp. 561-580, 2000.
- Herrera, I., “A general and systematic theory of discontinuous Galerkin Methods,” *Keynote lecture at the Minisymposium on discontinuous Galerkin Methods*, B. Cokburn, Organizer. USNCCM-8, July, 2005.
- Herrera, I., Chargo, L. and Alduncin, G., “Unified Approach to Numerical Methods. Part 3. Finite Differences and Ordinary Differential Equations,” *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 1(4), 241-258, 1985.
- Herrera, I., Celia, M.A. and Martínez, J.D. “Localized Adjoint Method as a New Approach to Advection Dominated Flows”, *Recent Advances in Ground-Water Hydrology*, J.E. Moore, A.A. Zaporozec, S.C. Csallany and T.C. Varney, Eds. American Institute of Hydrology, pp. 321-327, 1989.
- Herrera, I. y Ewing, R.E. “Localized Adjoint Methods: Applications to Multiphase Flow Problems”, *Proceedings Fifth Wyoming Enhanced Oil Recovery Symposium*, May 10-11, 1989, Enhanced Oil Recovery Institute, University of Wyoming, pp. 155-173, 1990.
- Herrera, I., Ewing, R.E., Celia, M.A. y Russell, T. “Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework”. *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 9(4), pp. 431-457, 1993.
- Herrera, I. and M. Díaz, “Indirect Methods of Collocation: Trefftz-Herrera Collocation,” *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 15(6) pp. 709-738 , 1999.

- Herrera, I. M. Díaz, and R. Yates, "Single collocation point methods for the advection–diffusion equation," *Advances in Water Resources* 27 311–322, 2004.
- Herrera, I., R.E. Ewing, M. A. Celia and T. Russell., "Eulerian-Lagrangian localized adjoint method: the theoretical framework," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 9(4), pp. 431-457, 1993.
- Herrera, I., J. P. Hennart and R. Yates, "A Critical Discussion of Numerical Model for Multiaquifer Systems," *Advances in Water Resources* 3(4), pp. 159-163, 1980.
- Herrera, I and G. Hernández, "Advances on the numerical simulation of steep fronts," *Numerical Methods for transport and Hydrologic Processes*, Vol. 2, M. A. Celia, L. A. Ferrand, and G. F. Pinder, Eds., *Developments in Water Science Computational Mechanics Publications*, Elsevier, Amsterdam, Vol. 36, pp 139-145, 1988.
- Herrera, I, G. Herrera and J. Garfias, "ELLAM First Decade: A Review," *Computation Methods in Water*, Vol. 2, *Computational Methods, Surface Water Systems and Hidrology*; Eds. Bentley L.R. et al., Balkema, Rotterdam, pp. 591-595, 2000.
- Herrera, I R. Martinez and G. Hernández, "contribución para la administración científica del agua subterránea de la Cuenca de México," *Geofísica Internacional*, 28(2), pp. 297-334, 1989.
- Herrera, I. and L. Rodarte, "Integrodifferential Ecuations for Systems of Leaky Aquifers and applications. Part 1: The nature of approximate Theories," *Water Resources Research*, 9(4), pp. 995-1005, 1973.
- Herrera, I. and R. Yates, "Integrodifferential Ecuations for Systems of Leaky Aquifers and applications. Part 3: A Numerical Method of Unlimited Applicability," *Water Resources Research*, 13(4), pp. 725-732, 1977.
- Herrera, I. and R. Yates, "General Theory of Domain Decomposition: Beyond Schwarz Methods," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, .17(5) pp.495-517, 2001.

BIBLIOGRAFÍA

- Herrera, I. and R. Yates, "Collocation methods: more efficient procedures for applying collocation," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 21, 672-700, 2005.
- Herrera, I. Yates R. and Díaz, M., "General Theory of Domain Decomposition: Indirect Methods," *Numerical Methods for Partial Differential Equation*, 18, pp. 296-322, 2002.
- International Scientific Committee for Domain Decomposition "Proceedings of 13 conferences on Domain Decomposition Methods," *www.ddm.org*, 1988- 2000.
- Kantorovich, L. V., "A Method of Approximate Solution of Partial Differential Equations," *Doklady Akademii Nauk, SSSR*, 2, 532-536, 1934.
- Lanczos, C., "Trigonometric Interpolation of Empirical and Analytical Functions," *J. of Math. And Phys.*, Vol. 17, No. 3, pp. 123-199, 1938.
- Lions, J. L. and Magenes, E., "Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications" Vol. 1. Springer-Verlag, New York-Heidelberg-Berlin, 1972.
- Oden T. J., "*Finite Elements of Non-linear Continua*," McGraw-Hill, New York, 1972.
- Pinder, G. F., E. O. Frind, and M. A. Celia, "Groundwater Flow Simulation Using Collocation Finite Elements," *Proc. Second Int. Conf. Finite Elements in Water Resource*, Brebbia, et. Al. (ed.), pp. 1.171-1.185, Pentech Press, London, 1978.
- Pinder, G. F. and A. Shapiro, "A New Collocation Method for the Solution of the Convection-Dominated Transport Equation," *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 5, pp. 1177-1182, 1979.
- Prenter, P. M. and R. D. Russell, "Orthogonal Collocation for Elliptic Partial Differential Equations," *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 13, No. 6, pp. 923-939, 1976.
- Q. Lin, "Interpolated Finite Elements and Global Error Recovery," *Contemporary Mathematics*, Vol. 163, pp 93-109, 1994.
- Quarteroni, A. and A. Valli, "Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations," *Numerical Mathematics and Scientific Computation*, Clarendon Press-Oxford, 1999.

- Rathod, H. T. and Islam, Md. S., "Some pre-computed universal numeric arrays for linear convex quadrilateral finite elements," *Finite Elements in Analysis and Design*, 38, pp. 113-136, 2001.
- Reddy, B. D., "Introductory Functional Analysis," *Texts in Applied Mathematics*, Springer-Verlag, 1997.
- Russell R. D. and L. F. Shampine, "A Collocation Method for Boundary Value Problems", *Numer. Math.*, Vol. 19, pp. 1-28, 1972.
- Shindler, A. A., "Rate of Convergence of the Enriched Collocation Method for Ordinary Differential Equations," *Siberian Math. J.*, 10, 160-163, 1969.
- Sincovec, R. F., "Generalized Collocation Method for Time Dependent, Non linear Boundary Value Problems", *S. P.E. J.*, Vol. 17, No. 5, pp. 345-352, 1977.
- Slater, J. C., "Electronic Energy Bands in Metals," *Phys. Rev.*, Vol. 45, pp. 794-801, 1934.
- Stewart, W. E. and J. V. Villadsen, "Graphical Calculation of Multiple Steady State and Effectiveness Factors for Porous Catalysts," *A. I. Ch. E. Journal*, 15, 28-34, 1969.
- Vainikko, G. M., "On the Stability and Convergence of the Collocation Method," *Differential Equations*, 1, 186-194, 1965.
- Villadsen, J. V. and W. E. Stewart, "Solution of Boundary Value Problems by Orthogonal Collocation," *Chem. Engr. Sci.*, Vol. 22, pp. 1843-1501, 1967.
- Villadsen, J. V. and J. P. Sorensen, "Solution of Parabolic Partial Diferential Equations by a Double Collocation Method," *Chem. Engrg. Sci.*, 24, 1337-1349, 1969.

BIBLIOGRAFÍA

APENDICES

A.1. Descomposición de Dominios para elementos finitos con funciones óptimas

La implantación de la descomposición de dominios puede seguir varios métodos: para la aplicación con elementos finitos con funciones óptimas es posible incorporar las técnicas de formulación algebraica del operador discreto de *Steclov-Poincaré* o la *matriz de complemento de Schur*.

A.1.1. El caso de subdominios múltiples

sea Ω la partición en $M > 2$ subdominios Ω_i sin traslape de diámetro H_i con interfase Σ separándolos, $\Sigma = \bigcup_{i=1}^M \Sigma_i$, $\Sigma_i \equiv \partial\Omega_i \setminus \partial\Omega$. Sea $I = \bigcup_{i=1}^M N_i$ los índices correspondientes a los nodos internos.

Entonces podemos escribir la matriz derivada del método de elementos finitos, el problema algebraico $Au = f$ como sigue:

$$\begin{pmatrix} A_{II} & A_{I\Sigma} \\ A_{\Sigma I} & A_{\Sigma\Sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_I \\ u_\Sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_I \\ f_\Sigma \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.0})$$

Debido a que los nodos en el interior de cada subdominio serán desacoplados de los nodos interiores de otros subdominios, se podrá tener:

$$\begin{aligned} A_{II} &= \text{diagonal - por - bloque}(A_{ii}) \\ &= \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & 0 \\ \vdots & A_{ii} & \vdots \\ 0 & \cdots & A_{MM} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.1.1})$$

el i -ésimo bloque A_{ii} es la matriz principal de la matriz local de rigidez asociada con los problemas de Dirichlet o Newmann en los subdominios Ω_i . La Matriz

$$A_i \equiv \begin{pmatrix} A_{ii} & A_{i\Sigma} \\ A_{\Sigma i} & A_{\Sigma\Sigma}^{(i)} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.2})$$

APENDICES

Es la matriz de elementos finitos asociado al operador diferencial \mathcal{L} en Ω_i con los datos Newmann en Σ_i (y con los datos Dirichlet en $\partial\Omega_i \cap \partial\Omega$).

La matriz de complemento de Schur \mathbf{S}_h asociada con \mathbf{u}_Σ es

$$\mathbf{S}_h = A_{\Sigma\Sigma} - A_{\Sigma I} A_{II}^{-1} A_{I\Sigma} \quad (\text{A.1.3})$$

y el problema de interfaz asociado es:

$$\mathbf{S}_h \mathbf{u}_\Sigma = \boldsymbol{\chi}_\Sigma \quad (\text{A.1.4})$$

donde

$$\boldsymbol{\chi}_\Sigma \equiv \mathbf{f}_\Sigma - A_{\Sigma I} A_{II}^{-1} \mathbf{f}_I \quad (\text{A.1.5})$$

con el propósito de representar \mathbf{S}_h como una suma de contribuciones locales, se comienza con la partición de la matriz de rigidez A en las contribuciones dadas por cada subdominio Ω_i , $i = 1, \dots, M$:

$$a(\varphi_j, \varphi_l) = \sum_{i=1}^M a_i(\varphi_j, \varphi_l), \quad 1 \leq j, l \leq N_i \quad (\text{A.1.6})$$

representando ahora por $\mathbf{S}_{i,h}$ a la matriz *local* del complemento de Schur, o sea el complemento de Schur de la matriz local de rigidez A_i , con respecto a los nodos de Σ_i

$$\mathbf{S}_{i,h} = A_{\Sigma\Sigma}^{(i)} - A_{\Sigma I} A_{II}^{-1} A_{I\Sigma}, \quad i = 1, \dots, M \quad (\text{A.1.7})$$

A.2. Formulación para el caso no-lineal

En un problema real no siempre están desacoplados flujo y transporte, de modo que el valor de la velocidad influye en la distribución por el transporte del campo concentraciones y este a su vez influye en los parámetros hidrodinámicos y en la distribución de presiones del modelo de flujo, que a su vez es base para calcula una nueva velocidad. En general las ecuaciones de balance acopladas son problemas no lineales; Las no linealidades resultan de las ecuaciones de estado de los fluidos y de la interacción de los fluidos en un sistema multifase. Según Aziz y Settari, 1979 y Helmig, 1997, las no linealidades pueden ser clasificadas en dos grupos: débiles y fuertes.

A.2.1 No linealidades débiles

Las variables o ecuaciones de estado que son funciones de la presión o de la temperatura pueden consideradas débilmente no lineales y algunas veces lineales. Dependiendo de los fluidos (incompresibles o débilmente compresibles, como el agua; compresibles, como los gases) y dependiendo del grado de cambio asumido en la presión y temperatura con respecto a la velocidad del proceso la dependencia funcional puede ser considerada en muchos casos por extrapolación lineal. Supóngase \mathbf{u} al nivel de tiempo $n+l$, donde $0 < l \leq 1$; entonces por extrapolación lineal usando \mathbf{u}^{n-1} y \mathbf{u}^n , tenemos

$$\mathbf{u}^{n+l} \approx \mathbf{u}^n + \frac{\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}} l (\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})$$

y aplicando $l = \frac{1}{2}$ y Δt constante:

$$\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} \approx \mathbf{u}^n + \frac{1}{2} (\mathbf{u}^n - \mathbf{u}^{n-1})$$

Esta extrapolación preserva el orden de convergencia para métodos de alto nivel de convergencia, sin embargo se incrementa el almacenamiento requerido en memoria. Esta aproximación funciona bien si las no linealidades no son muy fuertes y se usan satisfactoriamente en flujo de una sola fase y en flujo miscible.

A.2.2 No linealidades fuertes

Las relaciones constitutivas que dependen de la saturación son consideradas fuertemente no lineales. Estas relaciones incluyen la relación de permeabilidad relativa – saturación, $k_{ra}(S)$ y la relación de presión capilar – función de saturación $p_{c\psi a}(S)$. La dependencia funcional puede variar fuertemente dependiendo de las estructuras geológicas, la combinación de fases presentes en el sistema y de la composición de los fluidos. Tiene efectos en el comportamiento de la solución de los diferentes métodos de solución.

A.2.3 Procesamiento de las no linealidades

Una linearización de los sistemas algebraicos de ecuaciones es necesaria a causa de los términos no lineales de las ecuaciones de balance. Dos son las más comunes técnicas de linearización:

- La de sustituciones sucesivas o linearización de *Picard*
- Linearización de *Newton-Raphson*

Aplicando la linearización de *Picard* se calculan los coeficientes a partir de los valores del ciclo previo de iteración r y así se resuelve el sistema de ecuaciones siguiente

$$\mathbf{K}(\mathbf{u}^{n+1,r}) \mathbf{u}^{n+1,r+1} = \mathbf{r}^{r+1,r},$$

donde $\mathbf{u}^{n+1,r+1}$ representa el vector de incógnitas a ser calculadas, n es el índice que representa el paso de tiempo y el índice r es el paso de iteración. El método de *Picard* tiene un comportamiento de la convergencia de orden lineal y la correspondiente

matriz \mathbf{K} permanece dispersa. En este caso la matriz \mathbf{K} es función de los valores sucesivos del vector \mathbf{u} , el cual se aplica en la evaluación de \mathbf{K} en cada iteración.

Entre varias posibilidades, el método de *Newton Raphson* es a menudo escogido por tener la ventaja de su convergencia cuadrática a la solución. El sistema de ecuaciones $\mathbf{Ku}=\mathbf{r}$ es escrito de la siguiente forma funcional:

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{Ku} - \mathbf{r} = 0.$$

El método de *Newton Raphson* aprovecha la ventaja de una expansión en series de *Taylor* del funcional no lineal \mathbf{f} .

Si se ignoran los términos de orden superior de las series de *Taylor* resulta el algoritmo de Newton de la siguiente forma:

$$\mathbf{u}^{n+1,r+1} = \mathbf{u}^{n+1,r} - \left(\frac{\partial f_i}{\partial u_j} \right)_{n+1,r}^{-1} \bullet \mathbf{f}(\mathbf{u}^{n+1,r})$$

Donde $\left(\frac{\partial f_i}{\partial u_j} \right)_{n+1,r}$ representa a la matriz *Jacobiana* calculada en el ciclo r . si \mathbf{K} es una

matriz dispersa entonces la *Jacobiana* también es una matriz dispersa.

La calidad de un método iterativo generalmente depende en dos criterios: su velocidad de convergencia y su robustez. El método de *Newton* es un método de segundo orden y muestra una mejor convergencia que, por ejemplo, el método de *Picard*, de primer orden; sin embargo el método es robusto solo si los valores iniciales de aproximación son seleccionados dentro del dominio o radio de convergencia, y éste típicamente es desconocido; dicho radio es pequeño y por tanto otro método es usado para tener un inicio cercano (en ocasiones se usa *Picard*). Otra desventaja del método proviene de la matriz *Jacobiana*, que se debe calcular en cada iteración, lo cual es un problema grave cuando es muy grande, y esto ocurre para mallas muy finas.

APENDICES