

Universidad Católica de Santa María

Escuela de Postgrado

Doctorado en Matemática Aplicada



***hp*-ADAPTABILIDAD AUTOMÁTICA APLICANDO
RECONSTRUCCIÓN DEL GRADIENTE POR MÍNIMOS
CUADRADOS EN LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE
LEYES DE CONSERVACIÓN POR EL MÉTODO DE
ROTHER Y FORMULACIONES EN ELEMENTOS FINITOS
ESTABILIZADOS CON DIFUSIVIDAD IMPLÍCITA**

Tesis presentada por el Maestro:
Mamani Condori, Fermín Flavio
Para optar el Grado Académico de:
Doctor en Matemática Aplicada

Asesor:

**Dr. Alcázar Rojas Hermann
Enrique**

Arequipa - Perú

2021

UNIVERSIDAD CATÓLICA DE SANTA MARÍA
ESCUELA DE POSTGRADO
DICTAMEN APROBACIÓN DE BORRADOR DE TESIS

Arequipa, 17 de Agosto del 2021

Dictamen: 002101-C-EPG-2021

Visto el borrador del expediente 002101, presentado por:

2015006201 - MAMANI CONDORI FERMIN FLAVIO

Titulado:

**HP-ADAPTABILIDAD AUTOMÁTICA APLICANDO RECONSTRUCCIÓN DEL GRADIENTE POR
MÍNIMOS CUADRADOS EN LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE LEYES DE CONSERVACIÓN POR EL
MÉTODO DE ROTHE Y FORMULACIONES EN ELEMENTOS FINITOS ESTABILIZADOS CON
DIFUSIVIDAD IMPLÍCITA.**

Nuestro dictamen es:

APROBADO

**0424 - DIAZ BASURCO LUIS FERNANDO
DICTAMINADOR**



**0646 - RONDON RONDON MAXIMO ORLANDO MARIO
DICTAMINADOR**



**1341 - TICSE VILLANUEVA EDWING JESUS
DICTAMINADOR**



**1748 - CALDERON RUIZ GUILLERMO ENRIQUE
DICTAMINADOR**



**2632 - GOMEZ VALDEZ BADHIN
DICTAMINADOR**

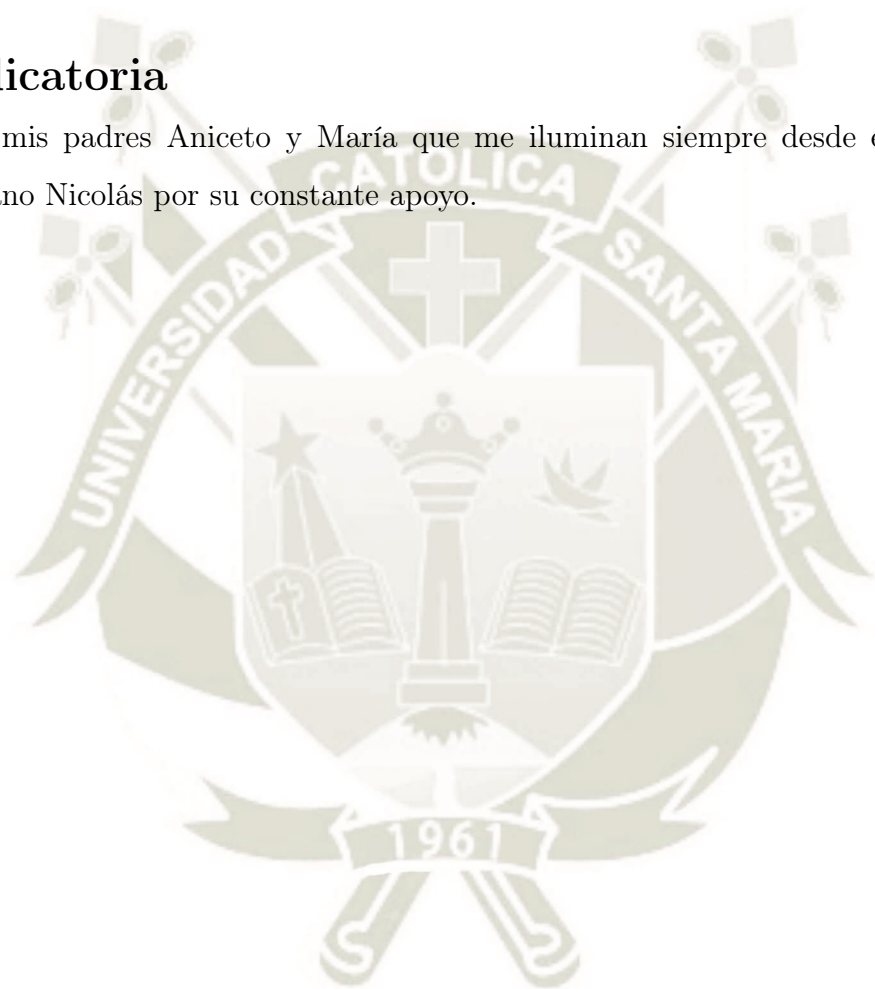


Agradecimientos

Primero agradezco al supremo creador por ser la fuente de mi vida, luego al Dr. Jorge Diaz Calle, pues sin la orientación de él no habría sido posible la culminación del presente trabajo de tesis. También mi agradecimiento al Dr. Hermann Alcazar Rojas por la asesoría de mi tesis y a la Universidad Católica de Santa María que me permitió concluir con éxito los estudios de doctorado. No puedo terminar sin agradecer a todos los doctores de la Escuela de Postgrado por las enseñanzas compartidas que me permitieron aprender nuevos conocimientos.

Dedicatoria

A mis padres Aniceto y María que me iluminan siempre desde el cielo, y a mi hermano Nicolás por su constante apoyo.



Índice general

1. Introducción	1
1.1. Estado del Arte	6
1.1.1. Enunciado del problema	7
1.1.2. Justificación del problema	9
1.2. Hipótesis	11
1.3. Objetivos	11
1.3.1. Objetivo general	11
1.3.2. Objetivos específicos	11
1.4. Organización del trabajo	12
2. Leyes de Conservación	14
2.1. Sistema de Leyes de conservación	15
2.2. Solución débil	16
2.3. Condición Rankine-Hugoniot	17
2.4. Ley de Conservación bi-dimensional	18
2.5. Ejemplos de leyes de conservación	20
2.5.1. Ecuación de Euler	20
2.5.2. Ecuación de Burgers	22
2.5.3. Ecuación lineal con coeficientes variables	23
3. Simulación numérica en tiempo y espacio	24
3.1. El Método de Rothe	24
3.1.1. Esquema numérico en el tiempo	26
3.1.2. Método de Runge-Kutta	27

3.1.3. Descripción de los esquemas Runge-Kutta para una ley de conservación no homogénea	30
3.1.4. Descripción de los esquemas Runge-Kutta para una ley de conservación homogénea	32
3.2. Método de Rothe multi-numérico en el espacio	33
3.2.1. Método del residuo ponderado en el dominio del espacio	39
3.2.2. Formulación débil con funciones continuas	44
3.2.3. Formulación débil con funciones discontinuas	45
3.2.4. Costo computacional en el dominio espacial	48
4. Ambiente Computacional NeoPZ	51
4.1. Módulo topológico	52
4.2. Elementos de referencia geométricos	52
4.3. Relación entre la topología y la geometría	54
4.4. Malla Geométrica	55
4.5. Refinamiento de una malla geométrica	56
4.6. Módulo del espacio de aproximación	57
4.6.1. Funciones de forma en el elemento de referencia	58
4.6.2. Base de funciones de forma en el espacio H^1	61
4.6.3. Base de funciones de forma en el espacio Galerkin discontinuo	62
4.7. Módulo Material.	
Abstracción de una Ecuación Diferencial	63
4.7.1. TPZMaterial	63
5. hp -Adaptatividad en Elementos Finitos	69
5.1. Reconstrucción del gradiente de una solución aproximada	70
5.2. Descripción del cálculo del gradiente reconstruido	73
5.3. Validando la reconstrucción propuesta	78
5.4. Sobre la estrategia hp -auto-adaptativa	84
5.5. Descripción de la estrategia hp -adaptativa automática	89
6. Validación numérica del método propuesto	93
6.1. Rotación de un cono	95
6.2. Ecuaciones de Euler - Choque Reflectante	100

Conclusiones	106
Recomendaciones	108
Referencias	110



Índice de figuras

2.1. Dominio espacio temporal de la ley de conservación	19
3.1. Dominio espacio temporal discretizado	39
4.1. Forma modular del NeoPZ	52
4.2. Elementos de referencia abiertos cero, uni, bi y tri-dimensionales del NeoPZ	53
4.3. Transformaciones desde los elementos de referencia abiertos (topología) sobre el elemento cuadrilátero cerrado	54
4.4. Elementos de referencia cero, uni, bi y tri-dimensionales	54
4.5. Relación entre la topología y la geometría del elemento de referencia cuadrilátero	55
4.6. Malla geométrica $\mathcal{M} = \{E, F\}$	56
4.7. Malla geométrica con lados colgantes desde los elementos subdivididos de F	57
4.8. h -Refinamiento de una malla geométrica para el problema de Poisson mencionado	57
4.9. Funciones de forma asociadas a los extremos	59
4.10. Polinomios de Chebyshev para $n = 0, 1, 2$	59
4.11. Funciones de forma asociada a la arista a para $n = 0, 1, 2$	59
4.12. Función de forma asociada al vértice $v_0 = (-1, -1)$	60
4.13. Funciones de forma asociada a la arista a_0	61
4.14. Funciones de forma asociada a la cara del elemento \hat{E} para $n_1 = n_2 = 0$ y $n_1 = n_2 = 1$	62
4.15. Funciones base en el espacio H^1 con $p = 1$	62
4.16. Funciones base en el espacio H^1 con $p = 2$	63

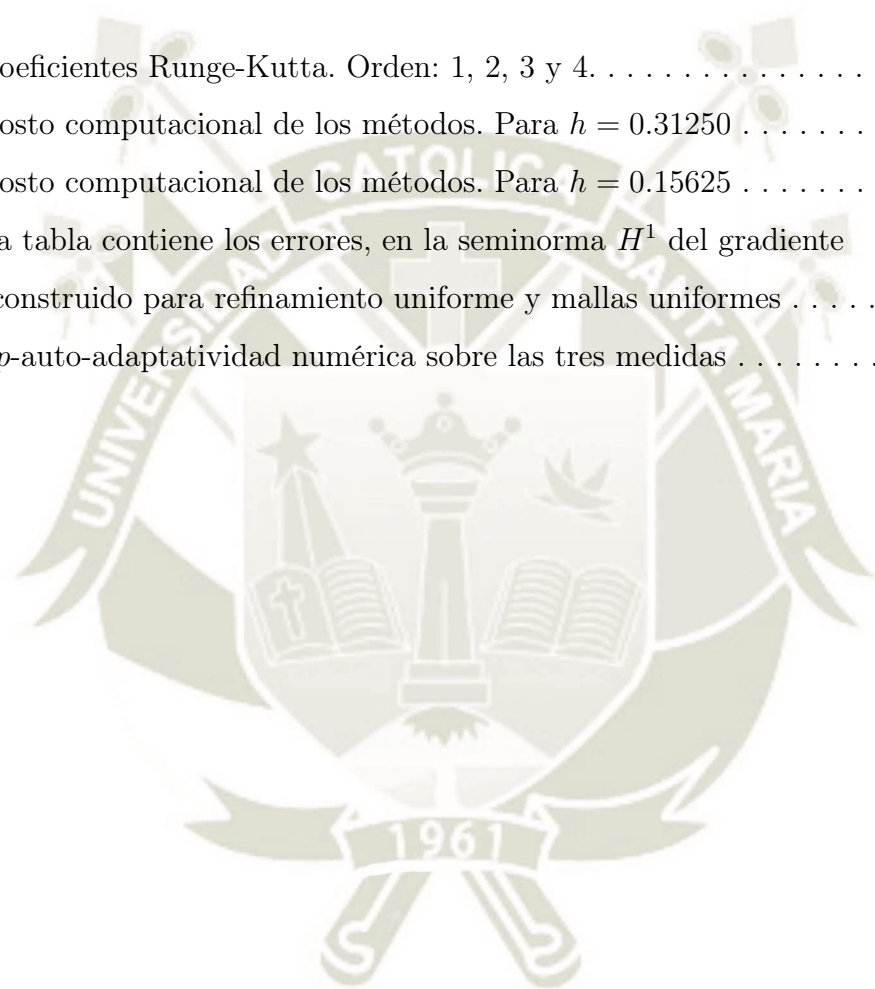
4.17. Algunas funciones base en el espacio H^1 con $p = 3$	64
4.18. Funciones base en GD con $p = 1$	64
4.19. Funciones base en GD con $p = 2$	65
4.20. Algunas funciones base en GD con $p = 3$	66
4.21. La clase TPZMaterial y algunas clases derivadas que tienen implemen- tación de las contribuciones para el uso de espacios de aproximación de funciones continuas.	66
4.22. Algunas clases derivadas de TPZDiscontinuousGalerkin, que es la clase que abstrae la idea de ecuación diferencial parcial para el uso de espacios de aproximación de funciones continuas o discontinuas.	67
4.23. Clase abstracta para leyes de conservación y las clases derivadas imple- mentadas en el desarrollo de la presente tesis.	68
5.1. A la izquierda, detalle de un elemento en el interior del dominio con su centro de masa y los centros de masa de sus vecinos. A la derecha un elemento conectado a la frontera del dominio con su centro de masa y los centros de masa de sus vecinos.	74
5.2. Detalle de la construcción de los elementos internos y de frontera en una malla bi-dimensional. Los elementos son denotados por E y están enumerados.	75
5.3. Detalle de elementos vecinos más refinados, con su centro de masas más cercano a \mathbf{x} y otros vecinos mayores con centros de masa más alejados.	77
5.4. Mallas uniformes iniciales de elementos cuadriláteros y triángulos.	79
5.5. Mallas iniciales no uniformes de cuadrilateros y triángulos.	79
5.6. Mallas refinadas uniformemente hasta el nivel 4, a partir de las 4 mallas iniciales.	80
5.7. Mallas refinadas en los elementos próximos a la circunferencia \mathcal{C} hasta el nivel 4 de refinamiento.	81
5.8. Gráficas de los errores en la seminorma H^1 para las normas de los gra- dientes reconstruidos para el caso de refinamientos uniformes.	82
5.9. Para las mallas no regulares y con refinamiento uniforme (h medio). El primer gráfico corresponde a la malla de cuadriláteros y el segundo para triángulos.	82

5.10. Gráficas de los errores en la seminorma H^1 ($\text{Log} \times \text{Log}$) para las normas de los gradientes reconstruidos para el caso de refinamientos no uniformes, y para las mallas regulares (arriba) y no regulares (abajo). .	83
5.11. Gráfico comparativo de las normas de los gradientes reconstruidos, nivel 3(azul), 4(rojo) y 5(verde), con la norma del gradiente exacto (violeta). Cuadriláteros y triángulos en ese orden.	84
5.12. Gráfico comparativo del producto escalar del gradiente reconstruido por el vector v . Niveles 3, 4 y 5. Cuadriláteros y triángulos.	85
5.13. Gráfico comparativo del producto escalar del gradiente reconstruido por el vector ortogonal a v . Niveles 3, 4 y 5. Cuadriláteros y triángulos. . .	85
5.14. A la izquierda, detalle de la solución u_h . A la derecha detalle del gradiente de la solución aproximada ∇u_h	86
5.15. A la izquierda, detalle de la función linealizada desde los centros de masa de los vecinos \tilde{u} . A la derecha detalle del gradiente reconstruido $\nabla \tilde{u}$ con los valores de la linealización.	87
5.16. Se presentan los dos vectores que aproximan al gradiente de la función u , es decir, el vector del gradiente aproximado ∇u_h y el vector gradiente reconstruido $\nabla \tilde{u}$	88
6.1. Cono en su posición inicial mostrando el refinamiento inicial de la malla $h = \frac{5}{32}$ y el orden de los polinomios base $p = 2$	96
6.2. Evolución de la rotación del cono sobre la superficie. Altura del cono inicial es de 5 cm.	97
6.3. Refinamiento automático realizado hasta el tiempo $t = \frac{6}{407}\pi$	97
6.4. Refinamiento h y p automático en los tiempos $t_1 = \frac{6}{407}\pi$, $t_2 = \frac{\pi}{2}$, $t_3 = \frac{410\pi}{407}$ y $t_4 = 2\pi$	98
6.5. Refinamiento h en la elevación del cono y una vista cercana de la elevación para detalles de las funciones discontinuas obtenidas en $t_1 = \frac{410\pi}{407}$, $t_2 = \frac{690}{407}\pi$ y $t_4 = 2\pi$	99
6.6. Dominio y estado inicial del problema.	100
6.7. Detalle del momento en que ingresa al canal el segundo fluido con presión mayor.	101

6.8. Detalle de la captura del choque al momento de ingresar el otro fluido, lo que genera inmediatamente el refinamiento de la malla en elementos pequeños junto a la compuerta y también la disminución del grado de los polinomios locales en esos elementos finitos.	102
6.9. Detalle de la superficie (solución numérica) de la densidad aproximada con funciones discontinuas en los elementos finitos próximos a la compuerta en $t = 0.075$	102
6.10. Detalle de la captura del choque en $t = 0.15$ mostrando el refinamiento de la malla con elementos divididos junto a la compuerta y engrosados los elementos con solo el primer fluido.	103
6.11. Detalle de la malla refinada para el choque en forma oblicua en $t = 0.23$.	103
6.12. Avance del choque en forma oblicua en $t = 0.42$	104
6.13. En la figura superior, momentos antes de chocar con la pared. En la figura inferior, momentos después de chocar con la pared e iniciar el rebote (reflejado).	104
6.14. Choque que rebotó en la pared generando una nueva discontinuidad. Por lo tanto, se tiene dos saltos de discontinuidad, antes de llegar a la pared y después de rebotar en la pared.	105
6.15. Solución numérica estacionaria en $t = 2$ para la variable de la densidad.	105
6.16. Solución numérica estacionaria en $t = 2$ para la variable de la presión. .	106

Indice de Tablas

3.1. Coeficientes Runge-Kutta. Orden: 1, 2, 3 y 4.	30
3.2. Costo computacional de los métodos. Para $h = 0.31250$	49
3.3. Costo computacional de los métodos. Para $h = 0.15625$	50
5.1. La tabla contiene los errores, en la seminorma H^1 del gradiente reconstruido para refinamiento uniforme y mallas uniformes	82
5.2. hp -auto-adaptatividad numérica sobre las tres medidas	92



Resumen

En la presente tesis se presenta un esquema numérico en tiempo y espacio para realizar simulaciones numéricas de modelos en leyes de conservación. El esquema se basa en el método de Rothe, considerando primero la discretización de la variable tiempo, y después discretiza la variable espacial en la que se ha desarrollado un algoritmo multi-numérico y *hp*-auto-adaptativo. La auto-adaptatividad se realiza con una estrategia basada en la detección de gradientes reconstruidos a partir de una linealización de la solución aproximada en un paso de tiempo. Esa reconstrucción se realiza desde los valores de la solución aproximada en los elementos vecinos a un elemento dado via el método de mínimos cuadrados. El esquema es multi-numérico posibilitando el uso de la formulación H^1 -conforme utilizando funciones continuas o la formulación conocida como *Discontinuous Galerkin* que utiliza espacios de aproximación con funciones discontinuas. En cualquier formulación es necesario estabilizar el esquema, lo que se hace incrementando un término difusivo implícito, el cual controla las oscilaciones en los interiores de los elementos finitos. Los algoritmos desarrollados utilizan la biblioteca NeoPZ que disponibiliza excelentes herramientas para desarrollar algoritmos en elementos finitos. Esta biblioteca está en continua evolución y utiliza el paradigma de la programación orientada para objetos. Por esa razón, todas las implementaciones que fueron desarrollados para la presente tesis fueron también realizados en el lenguaje C++. Fueron realizados experimentos numéricos, inclusive para las ecuaciones de Euler con un modelo con dos discontinuidades, que muestran la estabilidad, eficiencia y robustez del esquema propuesto.

Palabras clave: Elementos finitos, adaptabilidad, reconstrucción del gradiente, leyes de conservación y difusividad implícita.

Abstract

In this thesis a numerical scheme in time and space is presented to perform numerical simulations of models in conservation laws. The scheme is based on Rothe's method, first considering the discretization of the time variable, and then discretizes the spatial variable in which the has developed a multi-numerical and hp -auto-adaptive algorithm. Self-adaptability it is carried out with a strategy based on the detection of gradients reconstructed from a linearization of the approximate solution in a time step. This reconstruction is carried out from the values of the solution approximate in the neighboring elements to a given element via the method least squares. The scheme is multi-numeric allowing the use of the H^1 -conformal formulation using continuous functions or the formulation known as Discontinuous Galerkin that uses approximation spaces with discontinuous functions. In any formulation it is necessary to stabilize the schema, which is done by incrementing an implicit diffusive term, the which controls the oscillations in the interiors of the finite elements. The developed algorithms use the NeoPZ library that provides excellent tools for developing finite element algorithms. Is library is in continuous evolution and uses the paradigm of programming oriented for objects. For that reason, all implementations that were developed for this thesis were also carried out in the C++ language. Numerical experiments were carried out, including for the Euler equations with a model with two discontinuities, showing the stability, efficiency and robustness of the proposed scheme.

Keywords: Finite elements, adaptability, gradient reconstruction, conservation laws and implicit diffusivity.

Capítulo 1

Introducción

Un componente importante en la materia son los fluidos. El cuerpo humano está compuesto de aproximadamente $\frac{3}{4}$ de agua y esa misma agua se utiliza para mover turbinas en las hidroeléctricas para generar energía eléctrica. Nuestro cuerpo respira aire y ese aire no es especial, es el mismo que está en los vientos que permiten girar los aerogeneradores (turbinas eólicas) convirtiendo la energía cinética en energía eléctrica. En el transporte utilizamos principalmente fluidos derivados del petróleo y es el petróleo que moviliza gran parte de la industria en la que se apoya la economía mundial. En los alimentos juegan papel importante también los fluidos y debemos estar atentos porque los alimentos así como la energía están entre los principales problemas que la humanidad tiene que enfrentar en los próximos años. Estos ejemplos nos muestran la importancia de entender muy bien el comportamiento de los fluidos cuando se somete a diferentes condiciones de presión, temperatura, cambios de estado y de fase, para su posterior aprovechamiento en beneficio de la humanidad.

Entender los fluidos, involucra estudios multidisciplinarios y el uso de diversas metodologías. Mediante experimentos prácticos realizados a lo largo de siglos se llegó a la determinación de los principios básicos que todo fluido satisface. Estos principios se representan matemáticamente en las llamadas **leyes de conservación** (Dafermos, 2016; Leveque, 1992), que se enuncian como: conservación de la masa, de la cantidad de movimiento o momentum lineal y momentum angular, de energía y de entropía. Estas representaciones matemáticamente son ecuaciones diferenciales parciales del tipo hiperbólico generalmente no lineales. Muchos otros procesos físicos que la humanidad realiza para su beneficio, pueden ser modelados representándolos también en leyes de

conservación.

Entre las mas famosas de las leyes de conservación, que involucran gran cantidad de fenómenos físicos de fluidos, son las ecuaciones de Navier-Stokes (Robinson, Rodrigo, y Sadowski, 2016; Tukaszewicz y Kalita, 2016), que representan el flujo en fluidos viscosos newtonianos incompresibles. Si desconsideramos la viscosidad se tienen las llamadas ecuaciones de Euler. Para tales ecuaciones, es posible hallar soluciones aproximadas a la realidad sólo para un pequeño grupo de problemas. Por esto, es necesario desarrollar herramientas numéricas y computacionales eficientes para intentar encontrar soluciones aproximadas a estas leyes de conservación en situaciones más complejas. Las herramientas que se tienen actualmente, ya permiten encontrar soluciones aproximadas que representen adecuadamente el fenómeno físico en estudio (de O. FORTUNA, 2000), realizando simplificaciones no pequeñas en las ecuaciones y otras asumiendo consideraciones no poco significativas en el modelo abordado.

La Computación Científica es una área interdisciplinaria que estudia la construcción de modelos matemáticos empleando técnicas de solución numérica eficientes y máquinas de alto rendimiento para analizar y resolver problemas en las ciencias e ingeniería. Las herramientas que proporciona el área de la Computación Científica están posibilitando aproximar la realidad física y la realidad virtual discretizada (Gustafsson, 2011). Por lo tanto, cuanto más avanza la ciencia, la solución de un problema continuo que emplea ecuaciones diferenciales parciales generalmente desconocida, es cada vez mejor entendida y aproximada con una solución numérica a partir de algoritmos y esquemas numéricos eficientes que intentan superar las dificultades de cada ecuación matemática. Los matemáticos aplicados en particular están desarrollando métodos numéricos más completos através de constante investigación y estudio.

Actualmente las técnicas de resolución de los modelos matemáticos que describen un fenómeno físico son diversas y la solución que cada una calcula depende mucho de las consideraciones que se hacen en el modelo. Algunas presentan problemas de inestabilidad numérica o no logran resolver un problema dado, pero para otro problema presenta la mejor solución comparando con las otras. En la dinámica de fluidos computacional existen varias técnicas numéricas y entre las más conocidas son: el Método de Diferencias Finitas, el Método de los Volúmenes Finitos y el Método de los Elementos Finitos, principalmente en la versión conocida como Galerkin discontinua (Dafermos,

2016; de O. FORTUNA, 2000; Donea y Huerta, 2003; Hesthaven, 2018; Lohner, 2008). Existe una fuerte tendencia para variantes que utilizan técnicas en elementos finitos, mas el método de diferencias finitas continua en estudio. Por ejemplo, para la enseñanza de muchos conceptos relacionados a las ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales se necesita un método simple, tanto del punto de vista matemático cuanto de la codificación. También existe bastante código desarrollado en décadas atrás y para diversos modelos. Un libro actual que trae un enfoque computacional moderno para el método de diferencias finitas es (Langtangen y Linge, 2017).

En la presente tesis desarrollamos un nuevo esquema utilizando como base el Método de Rothe, que permitirá primero el uso del Método de Runge Kutta en el tiempo, y en el espacio técnicas multinuméricas en Elementos Finitos con términos que incrementan difusividad implícita para su estabilización numérica. En cada paso de tiempo se aplica una técnica de reconstrucción del gradiente para determinar un proceso de *hp*-refinamiento a fin de mejorar la aproximación y detección de probables singularidades.

El método de los elementos finitos, o simplemente MEF, fue creado para resolver, de forma aproximada, problemas de valores de contorno y / o iniciales que involucran ecuaciones diferenciales parciales (Zienkiewycs, Taylor, y Zhu, 2013). Desarrollado inicialmente en el área de la mecánica de los sólidos, se intentó resolver problemas en otras áreas, inclusive en electromagnetismo, y fluidos. Sin embargo, para estos problemas, la formulación clásica empleada en la discretización de las ecuaciones diferenciales, la formulación de Galerkin, deja de alcanzar resultados satisfactorios. La formulación de Galerkin, cuando emplea una discretización polinomial de bajo orden, puede presentar un desempeño pobre en la obtención de la solución discreta. Las oscilaciones espurias pueden ocurrir cuando utilizamos polinomios de alto orden, principalmente en los términos convectivos. Una forma de enfrentar este problema es refinando la malla en elementos muy pequeños, lo que puede hacer inviable computacionalmente la solución del problema. Esto llevó a hacer uso de formulaciones estabilizadas de elementos finitos. Los métodos estabilizados constituyen una metodología sistemática para mejorar la estabilidad sin comprometer la precisión, Brezzi (BREZZI y cols., 1997) y Brooks y Hughes (Brooks y Hughes, 1982) estuvieron entre los primeros en utilizar un esquema estabilizado de elementos finitos.

En la literatura se encuentran diferentes esquemas de estabilización, considerando que la información se propaga por un campo de velocidades subyacente y son llamados de esquemas upwind adecuados para los modelos dominados por la convección. En los métodos de los residuos ponderados, cierta cantidad de upwind se introduce mediante la elección adecuada de funciones peso que coloca más peso ascendente (upstream) del flujo. En la tesis de Díaz (Calle, 2002) se utiliza un término estabilizador que es una variante de "upwind", ese mismo término estabilizador (término difusivo implícito) será utilizado en la presente tesis.

Una contribución importante en la presente tesis es el hecho de introducir el método de Rothe, permitiendo aplicar primero la discretización en el tiempo. En cada paso de tiempo se tiene un sistema de ecuaciones diferenciales en las variables espaciales y para resolver se aplicará una discretización en el espacio. Antes de resolver en las variables espaciales se aplicará una técnica de reconstrucción del gradiente y/o potencial sobre la solución inicial en ese paso de tiempo. Esa información permitirá prever si existe gradientes altos en la solución inicial, lo que podría estar indicando la posibilidad de surgir una discontinuidad y por lo tanto, podemos aplicar un método numérico más adecuado a la información obtenida. En el caso de existir altos gradientes o posibles regiones de singularidad el método numérico en las variables espaciales es el método con funciones discontinuas polinómicas por partes. Si la solución inicial es regular el método más adecuado (hasta por su costo computacional) es una formulación utilizando funciones polinomiales continuas por partes. Esto significa que en cada paso de tiempo es posible cambiar el método numérico en el espacio. La información del gradiente reconstruido además de permitir variar el método numérico en cada paso de tiempo, también será utilizado para aplicar adaptatividad en la malla, particionando los elementos finitos (h -adaptativo) o modificando el orden de interpolación de los polinomios en cada elemento finito (p -adaptativo) o ambos (hp -adaptativo). Estos aspectos mejoran el trabajo de Díaz (Calle, 2002) y sustituyen el cálculo de los coeficientes wavelets (cálculo de dos soluciones aproximadas sobre dos mallas uniformemente refinadas) por el cálculo de la reconstrucción del gradiente en cada elemento finito (mucho más barato computacionalmente). En resumen, con el uso del método de Rothe, el método propuesto es hp -adaptativo y multi-numérico.

Después de haber egresado del doctorado, el candidato que propone el presente

proyecto ha experimentado numéricamente modelos de Poisson orientados a oscilaciones suaves, de alto gradiente y oscilaciones fuertes. En modelos estudiados se aplicó formulaciones mixtas en elementos finitos y las simulaciones fueron hechas utilizando la biblioteca NeoPZ. El NeoPZ es un ambiente orientado a objetos que posibilita implementar algoritmos en elementos finitos, utilizando espacios de aproximación de funciones polinomiales por partes y continuas (H1) o discontinuas (GD), inclusive espacios de funciones vectoriales que cuidan la continuidad del divergente en las fronteras (Hdiv). La evolución del NeoPZ permite realizar simulaciones con características multifísicas y multiescala y aplicar técnicas *hp*-adaptativas para eficientes computaciones numéricas.

Para realizar estas simulaciones computacionales recibí las fundamentaciones y orientaciones en varias disciplinas del Doctorado en Matemática Aplicada. Y una de las herramientas que motivó enfrentar este desafío fue el método numérico Galerkin discontinuo con difusividad implícita y *h*-adaptatividad (método IDDG) en la tesis (Calle, 2002). En la mencionada tesis, la *h*-adaptatividad es basada en la medida de los coeficientes wavelets cuando aplicamos análisis multiresolución a la simulación numérica de una ecuación diferencial parcial. En ella se utiliza el método Galerkin discontinuo con funciones discontinuas sobre las fronteras de los elementos finitos (para representar correctamente el surgimiento de soluciones con discontinuidades), un término difusivo (para estabilizar los gradientes de las funciones discontinuas), y los coeficientes wavelets para aplicar *h*-adaptabilidad (refinamiento de elementos en regiones de singularidad).

En conversaciones con el Dr. Díaz, se determinó que sería un gran avance en la continua búsqueda de métodos numéricos estables, que consigan dominar las no linealidades de las leyes de conservación, mejorar y potencializar el método IDDG. En este caso, se pretende analizar la mejor alternativa de una reconstrucción de gradientes para sustituir la información de los coeficientes wavelets a fin de poder realizar *hp*-adaptatividad, lo que posibilitará convergencia mayor. Es también un objetivo hacer el esquema multinumérico considerando que utilizar funciones continuas es mucho más barato computacionalmente que utilizar funciones discontinuas. Se presenta también un estudio del costo computacional para un espacio de funciones continuas y para funciones discontinuas considerando en ambas el término de difusividad implícita para estabilizar el esquema.

1.1. Estado del Arte

Las leyes de conservación son exhaustivamente estudiadas en una gran diversidad de situaciones reales. En el estudio de los modelos de la onda de un tsunami, en el artículo (Khakimzyanov, Dutykh, Milsotakis, y Shokina, 2019) utiliza el método de volúmenes finitos para simular numéricamente la onda del tsunami, mas considera como aporte el hecho de a cada paso de tiempo redefinir los nodos de la malla a partir de la información de esquemas predictores/correctores (introducidos por Mac Cormack (MacCormack, 1969)) y con esta información se pretende alcanzar un alto orden de aproximación, rediseña los nodos de la malla, obteniendo la más óptima distribución de los grados de libertad (próximo de la óptima).

Dada su importancia, surgen siempre nuevas ideas y podemos destacar un método numérico estadístico sugerido recientemente por Fjordholm (Fjordholm, Lanthaler, y Mishra, 2017), cuya novedad es el uso del método de Monte Carlo para definir soluciones estadísticas como medidas probabilísticas parametrizadas por el tiempo, y como resultado resuelve sistemas de leyes de conservación multidimensionales. También está en constante estudio tópicos importantes y básicos, que aun no se han cerrado dada su complejidad, por ejemplo el estudio de la convergencia para las soluciones entrópicas y el estado del arte de este vital tópico fue tratado por Mishra (Mishra, 2018).

El método Galerkin discontinuo es bastante utilizado para la resolución numérica de leyes de conservación. Como ejemplo se mencionan los trabajos del equipo de investigadores liderados por el Dr. Bernardo Cockburn, que presentan como novedad el método Galerkin discontinuo híbrido y sus características de super convergencia (Cockburn, Fu, y Qiu, 2017; Cockburn, Nguyen, y Peraire, 2016), mencionan que el método permite condensación estática que posibilitará eficientes implementaciones numéricas.

Sobre el análisis multiresolución y el uso de los coeficientes wavelets para el control del error, se pueden mencionar los trabajos recientes de Kozakevicius (Kozakevicius, Zeidan, Schmidt, y Jakobsson, 2018), solo que en este artículo se utilizan esquemas de wavelets llamados WENO (basicamente usa diferencias finitas con ponderación). Artículos con desarrollo muy próximo del uso del método de Galerkin discontinuo con el análisis multiresolución se tiene en (Gerhard y Muller, 2016; Minbashian, Adibi, y Dehghan, 2017) con la diferencia de utilizar Galerkin discontinuo con el estabilizador SUPG. Por último se puede mencionar el artículo que también utiliza Galerkin discon-

tinuo junto con análisis multiresolución pero para la ecuación del transporte (Guo y Cheng, 2017). Ciertamente, se pretende cambiar el uso del análisis multiresolución por su elevado costo computacional.

Para la determinación de la estimativa del error, control del error, se pretende utilizar técnicas de reconstrucción de los flujos (recuperación del gradiente). Para esto, se pretende utilizar técnicas de reconstrucción del gradiente por mínimos cuadrados calculado en el centro de masa de cada elemento finito. Una buena referencia para reconstrucción del gradiente sobre nodos para triángulos o cuadriláteros, o para medias celulares es (Mavriplis, 2003), y para cálculo sobre los puntos centro de los elementos, vea (Correa, Hero, y Ma, 2011). La reconstrucción de gradiente también se utiliza para segundas derivadas, gradiente de la derivada, y en la literatura es llamada de reconstrucción del estrés. Se realiza un estudio comparativo de varias propuestas para la reconstrucción del estrés en las fronteras de los elementos y proponen una nueva formulación en (Previati, Gobbi, y Ballo, 2019). La reconstrucción de gradiente es utilizada en diferentes métodos numéricos, por ejemplo para volúmenes finitos, existe un reciente trabajo que propone un nuevo stencil para reconstruir el gradiente (Xiong y cols., 2018).

El método de Rothe (Rothe, 1930), o método transversal de las líneas, utilizado en la elaboración del presente método numérico, consiste principalmente en discretizar una ecuación, que depende del tiempo y el espacio, primeramente en el tiempo y después discretizar el espacio. Su diferencia con el método semi discreto de la regla trapezoidal es que el método permite considerar el sistema de ecuaciones diferenciales en el espacio como un problema estacionario en cada paso de tiempo, pero considerando el tamaño del paso del tiempo como un factor, Δt . En (RAMOS, 2007) existe un estudio extenso de este método dividiéndolo en dos familias, pero lo hace para una dimensión. Otros trabajos como de (HARARI y HAUKE, 2007; KOLEVA, 2005; SCHEMANN y BORNEMANN, 1998) presentan varios ejemplos utilizando el método de *Rothe*. Véase también la tesis (Henao, 2011).

1.1.1. Enunciado del problema

Intentando realizar eficientes simulaciones numéricas de procesos con fluidos, se ha utilizado el método numérico Runge-Kutta y Galerkin discontinuo con difusividad im-

plícita y h -adaptabilidad, obteniendo simulaciones estables de los modelos en leyes de conservación para fluidos en un dominio espacial $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ($n = 1, 2, 3$) y en un intervalo de tiempo determinado $[T_0, T_f]$, $T_0, T_f \in \mathbb{R}_0^+$. Existen situaciones en que la resolución de la solución numérica obtenida es de baja calidad, mismo en regiones de suavidad. Sin embargo, en el método IDDG el orden de interpolación es determinado al inicio de la simulación y este solo puede disminuir en las regiones de singularidad. No existen referencias del método numérico que utilicen un orden de interpolación mayor a $p = 3$, para obtener una mejor aproximación en regiones suaves. También se identificó que para determinadas situaciones en que el comportamiento del fluido está casi en un estado estacionario, una formulación más adecuada sería obtenida utilizando espacios de funciones continuas para las variables espaciales. Esto, porque, la formulación Galerkin discontinua es mucho más cara computacionalmente hablando que cuando se utiliza la formulación con funciones continuas. Inclusive, al utilizar funciones continuas es posible aprovechar la técnica de condensación estática que reduce más aún el tamaño del sistema lineal. Por último, el costo computacional para realizar el análisis multiresolución que permite determinar la h -adaptabilidad es alto (se necesitan dos soluciones numéricas de dos niveles de refinamiento regular), por lo que es importante verificar y evaluar el uso de otro estimador de aproximación para realizar hp -adaptatividad buscando disminuir el tamaño del sistema. Se tiene la idea de trabajar con los valores del gradiente reconstruido y del gradiente aproximado para determinar cuán aproximada está la solución obtenida, por lo tanto la diferencia entre esos gradientes indicará el grado de aproximación que se ha alcanzado.

Campo, área y línea de acción

1. Campo: Ciencias Exactas
2. Área: Matemática Aplicada/Análisis Numérico
3. Línea: Simulación numérica en elementos finitos de leyes de conservación.

Interrogantes básicas

Varios de los modelos matemáticos que permiten entender el comportamiento de los procesos térmicos y químicos en los que se tiene interés para la agroindustria en la

región Arequipa, son leyes de conservación. Las simulaciones numéricas que pretenden generarse para estudiar y entender estos procesos utilizarán algoritmos en elementos finitos y en particular se inicia utilizando el método numérico Runge-Kutta y Galerkin discontinuo con difusividad implícita y h -adaptabilidad (IDDG). Para el uso del método se realiza un análisis multiresolución en dos niveles de refinamiento regular y así se consigue determinar coeficientes wavelets que ayudan a determinar los elementos que deben ser refinados. Sin embargo, la biblioteca base para realizar las simulaciones numéricas, el NeoPZ, tiene excelentes herramientas para aplicar hp -adaptabilidad, y para realizar simulaciones multifísicas y multiescala. Entonces surgen las preguntas, es posible modificar el método numérico IDDG, potencializándolo para obtener simulaciones numéricas mejor aproximadas, que exijan menor costo computacional y que utilicen el potencial de la biblioteca NeoPZ? Podemos verificar que por lo menos pueden ser trabajados dos aspectos, sin perder la estabilidad y la robustez del método escogido.

El primero debe responder la pregunta: es posible modificar el proceso de generación de coeficientes wavelets ó estimadores de error para convertirlo en un método hp -adaptativo? Por lo tanto, se determina una estrategia hp -adaptativa con el nuevo algoritmo. En el método original se aprovecha solo de la h -adaptatividad en regiones de singularidad. En este trabajo, queremos mejorar en las regiones de suavidad, donde pretendemos engrosar los elementos finitos e aumentar el orden p . Otra interrogante es, en los elementos cuyo estimador de error es pequeño, la solución numérica es mejorada al engrosar elementos un nivel en h e incrementando el orden p en una unidad a más?.

Un segundo aspecto es el de intentar siempre utilizar en las variables espaciales formulaciones en elementos finitos con funciones continuas. Esto significa, utilizar Galerkin discontinuo apenas cuando no se puede aplicar funciones continuas. Se vislumbra la posibilidad de que al aplicar el método de Rothe se obtenga un método multinumérico. Esto porque en algún paso de tiempo se puede utilizar espacios de aproximación de funciones continuas y en otro paso de tiempo funciones discontinuas, se tiene claro que son formulaciones diferentes.

1.1.2. Justificación del problema

Es un consenso que entre los principales problemas de la humanidad que deben ser tratados con prioridad en las próximas décadas son el alimento y la energía. La

producción y conservación de alimentos, y la generación y distribución de la energía son ejemplos del porque es necesario entender muy bien el comportamiento de los fluidos cuando se somete por ejemplo, a diferentes condiciones de presión, temperatura, cambios de estado y de fase, para su posterior aprovechamiento en beneficio de la humanidad. Los principios básicos que todo fluido satisface se representan matemáticamente en ecuaciones diferenciales parciales, un tipo muy importante son las leyes de conservación enunciadas como: conservación de la masa, de la cantidad de movimiento o momentum lineal y momentum angular, conservación de energía y de entropía.

Las herramientas numéricas y computacionales eficientes para intentar encontrar soluciones aproximadas para las leyes de conservación en situaciones más complejas, se vuelven necesarias. Dependiendo del tipo de problema a ser abordado, de simplificaciones hechas en estas ecuaciones matemáticas y otras consideraciones generales como su geometría, es posible encontrar soluciones satisfactorias para esas ecuaciones que representen adecuadamente el fenómeno físico en estudio. Esto se ha conseguido gracias a la Computación Científica, que es un área interdisciplinaria que estudia la construcción de modelos matemáticos empleando técnicas de solución numérica eficientes y máquinas de alto rendimiento para analizar y resolver problemas en las ciencias e ingeniería. Es mediante el uso de las herramientas que proporciona el área de la ciencia computacional que podemos mejorar y corregir muchas de esas discrepancias entre la realidad física y la discretización de las ecuaciones matemáticas. Un papel importante en este proceso es el estudio y determinación de métodos numéricos estables y robustos que aprovechen optimamente el poder computacional hoy en día disponible. En las últimas décadas se ha dado pasos importantes utilizando algoritmos en elementos finitos que se ha convertido en un área destacada dentro del análisis numérico de la matemática aplicada. La generación y mejoría continua de métodos numéricos estables en elementos finitos y con excelente fundamentación matemática, como el método IDDG estabilizado para simular leyes de conservación con h -adaptatividad, es de vital importancia para entender procesos físicos mas próximos de la realidad y con este entendimiento podremos reformular u optimizar procesos evitando dispendio de recursos económicos.

1.2. Hipótesis

Dado que el Método de Galerkin Discontinuo con Difusividad Implícita utiliza en todos los elementos de la malla de elementos finitos el término de estabilización con difusividad implícita y dado que se tiene un control del error de aproximación con los coeficientes wavelets del análisis multiresolución aplicado, que nos permite determinar regiones de suavidad y regiones de singularidad, es probable definir un nuevo método numérico que aproveche el término de estabilización en la resolución de leyes de conservación en cada paso de tiempo, decidiendo por utilizar funciones continuas o discontinuas dependiendo de la información del estimador de error que será implementado a partir de una reconstrucción del gradiente, posibilitando aprovechar *hp*-adaptatividad en estas regiones de suavidad, y en las regiones de singularidad realizar solamente *h*-adaptatividad. También es probable utilizar el método de Rothe para discretizar inicialmente en la variable tiempo y así en cada paso de tiempo en la discretización espacial permitir cambiar el espacio de aproximación en la variable espacial, lo que significaría utilizar una formulación diferente en cada paso de tiempo.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Presentar un nuevo método numérico para leyes de conservación, donde se utiliza el método de Rothe para la discretización del dominio temporal y para la discretización del dominio espacial se usa técnicas de reconstrucción del gradiente por mínimos cuadrados.

1.3.2. Objetivos específicos

Usar la información de la reconstrucción del gradiente para considerar los espacios aproximantes de funciones continuas o discontinuas (multinumérico), que también orientará la aplicación de técnicas *hp*-adaptativas.

Presentar el nuevo método numérico como multinumérico en la variable espacial, posibilitando el uso de formulaciones en funciones discontinuas o continuas con el mismo término estabilizador, dependiendo de la regularidad de la solución aproximada.

Utilizar la norma de los vectores gradientes reconstruidos como estimador de error

sobre cada elemento finito. Esa información determinará los elementos en los que se aplicará *hp*-adaptabilidad, dividiendo o engrosando los elementos y/o incrementando o disminuyendo el orden de interpolación de los polinomios locales de aproximación.

1.4. Organización del trabajo

El presente trabajo está dividido en seis capítulos. El capítulo actual presenta la introducción a la tesis, exponiendo el estado del arte de los conceptos y técnicas involucradas, el problema a resolver y la justificación correspondiente.

El capítulo dos está dedicado a la parte teórica sobre leyes de conservación. Se expone las características y conceptos principales para estas ecuaciones diferenciales parciales del tipo hiperbólico. Se finaliza dando tres ejemplos de leyes de conservación: las ecuaciones de Euler, la ecuación de Burger y una ecuación con coeficientes variables. Para cada uno de esos ejemplos se expone sus funciones flujo de forma explícita por ser una parte principal de la ley de conservación.

El capítulo tres presenta las herramientas numéricas utilizadas: el método de Rothe, el método de Runge-Kutta, el H^1 -conforme (FEM clásico) con difusividad implícita y el método de Galerkin discontinuo con difusividad implícita. Se finaliza este capítulo presentando un análisis comparativo en el uso de espacios de aproximación de funciones continuas y de funciones discontinuas.

En el capítulo cuatro se presenta la secuencia de módulos del ambiente computacional NeoPZ. El NeoPZ es la biblioteca base utilizada en el desarrollo de los algoritmos computacionales numéricos que se han implementado para verificar la eficacia y estabilidad del método propuesto. Esa biblioteca es de propósito general y tiene muchas clases bien definidas en módulos que permiten elaborar softwares en elementos finitos.

En el capítulo cinco exponemos la técnica de reconstrucción del gradiente por mínimos cuadrados, la técnica *hp*-adaptativa y el criterio de auto-adaptatividad utilizado. Por lo tanto, el método multi-numérico y *hp*-adaptativo automático propuesto es presentado en su plenitud.

En el capítulo seis se valida el método propuesto para dos modelos en leyes de conservación, mostrando estabilidad y suficiente eficiencia en la *hp*-adaptabilidad automática, generando cálculos con un número reducido de grados de libertad, lo que

hace muy viable el método. Se tuvo dificultades en realizar otros experimentos numéricos por no contar con un equipo computacional más potente. Esto ha motivado para realizar propuestas de investigación en la línea de análisis numéricos para obtener fondos que permitan contar con equipos adecuados para esos cálculos con matrices de gran tamaño.

Por último se presentan las conclusiones a las que se han arribado después de la validación numérica del método propuesto, y las las perspectivas para desarrollos futuros.



Capítulo 2

Leyes de Conservación

Una ley de conservación es la expresión matemática de un principio básico que permite describir la evolución temporal de una cierta cantidad de interés u (que podría ser por ejemplo una temperatura, la presión de un fluido o la concentración de una sustancia química). Cuando se estudia leyes de conservación, muchas técnicas modernas no son aplicables por la necesidad de trabajar con funciones discontinuas, debido a las características propias de las ecuaciones diferenciales hiperbólicas no lineales, como el fenómeno de la formación de choques.

Se sabe que para problemas de leyes de conservación con condiciones iniciales, si en la condición inicial la función es continua, la solución puede dejar de ser continua. Esto es, la presencia de un choque o discontinuidad de la solución no depende de la continuidad de la función inicial. Entonces la ley de conservación puede ser satisfecha por funciones medibles y acotadas, pero no necesariamente diferenciables en todo el dominio. De ahí se hace necesario la teoría de las soluciones débiles.

Utilizando la formulación débil, se trata de obtener una solución continua en todo el dominio excepto en un conjunto del dominio de medida nula. Desde el punto de vista matemático, la solución débil debe satisfacer la condición de salto Rankine-Hugoniot sobre ese conjunto de medida nula.

Un excelente libro moderno sobre leyes de conservación escalares o sistemas (ley de conservación lineal, de Burgers, de Euler y de Maxwell) es (Hesthaven, 2018). Para la simulación numérica de estos modelos expone el método de diferencias finitas, volúmenes finitos y Galerkin discontinuo. También expone esquemas de alto orden para la discretización del tiempo (método Runge-Kutta, método multipasos), y para el espacio

esquemas flujo limitadores y limitadores de inclinación (slope limiters). Complementa con la exposición de esquemas esencialmente no oscilatorios y métodos espectrales.

2.1. Sistema de Leyes de conservación

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$, un dominio d -dimensional denominado dominio espacial y sea el intervalo $[T_0, T_f]$ denominado dominio temporal, donde T_0 y T_f son números reales fijos y $T_0 < T_f$. Vea (Calle, 2002).

Un sistema de leyes de conservación es un sistema de ecuaciones diferenciales parciales de la forma

$$u_t(t, \mathbf{x}) + \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} f_j(u(t, \mathbf{x})) = s(t, \mathbf{x}, u), \quad t \in [T_0, T_f], \quad \mathbf{x} \in \Omega$$

donde $u = u(t, \mathbf{x})$, $u : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ con $D = [T_0, T_f] \times \Omega$ (dominio del sistema de leyes de conservación). La función $s(t, \mathbf{x}, u)$ con $s : D \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ es una función conocida y se le denomina función fuente.

Las funciones $f_j : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $j = 1, 2, \dots, d$ son llamadas funciones flujo y actúan sobre u . Para simplificar las expresiones se define la función vectorial $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_d)$.

El sistema representa el hecho de que la cantidad u en un dominio Ω cambia en una proporción igual a la suma de los flujos f_j en Ω .

Muchas leyes físicas son leyes de conservación y en ellas u es un vector de m componentes, cada una de las cuales es una cantidad conservada, llamadas variables de estado, ya que ellas describen el estado del sistema físico. Se dice que una variable de estado u_i es conservada, si $\int_{\mathbb{R}^d} u_i(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}$ permanece constante en el tiempo.

En forma equivalente, el sistema de leyes de conservación se puede escribir como la ecuación diferencial parcial:

$$u_t(t, \mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{f}(u(t, \mathbf{x})) = s(t, \mathbf{x}, u), \quad t \in [T_0, T_f], \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.1)$$

llamada ley de conservación. Cuando $s \neq 0$ es conocida como ley de conservación no homogénea.

En este trabajo se considera inicialmente el problema de Cauchy de la ecuación (2.1) con condiciones de contorno y $s = 0$. Esto es, hallar una función $u \in C^1(D, \mathbb{R}^m)$

que satisface la ecuación

$$u_t(t, \mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{f}(u(t, \mathbf{x})) = 0, \quad (t, \mathbf{x}) \in D \quad (2.2)$$

sujeta a la condición inicial

$$u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

y la condición de frontera

$$u(t, \mathbf{x}) = \bar{u}(t), \quad t \in [T_0, T_f], \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (2.4)$$

Una función u solución del problema de Cauchy, se llama solución clásica.

2.2. Solución débil

En general, para el problema de Cauchy (2.2), (2.3) y (2.4) no existen soluciones clásicas, es decir una función $u \in C^1(D, \mathbb{R}^m)$ que satisface (2.2), (2.3) y (2.4). Si en la condición inicial la función u_0 es continua, la función u no necesariamente es continua, por lo que es poco probable obtener una solución clásica del problema de Cauchy en un intervalo de tiempo finito. Un resultado importante obtenido por (Zeidler, 1990), afirma que si las funciones u_0 , \mathbf{f} y s son diferenciables, entonces existe un intervalo $[0, T]$ con $T > 0$, tal que el problema de Cauchy tiene una única solución clásica $u \in C^1(D, \mathbb{R}^m)$, con la propiedad de u pertenecer a un conjunto compacto $U \subset \mathbb{R}^m$, para todo $t \in [0, T]$ y $\mathbf{x} \in \Omega$.

En el caso de leyes de conservación escalares, el método de las rectas características proporciona una solución clásica del problema de Cauchy para todo $0 \leq t < T^*$, donde

$$T^* = \frac{-1}{\min\{0, \min_{y \in \mathbb{R}} \frac{d(u_0)(y)}{dy}\}}$$

Se cumple la igualdad cuando el denominador de la fracción es diferente de cero, pues si el denominador fuera cero, la pendiente de la función inicial u_0 sobre todo \mathbb{R} es positivo, entonces para todo t positivo la solución es diferenciable (Godlewski y Raviart, 1991; Oden, s.f.). El tiempo $T^* < \infty$, representa el tiempo en el cual se produce un choque de ondas que se propagan a diferentes velocidades. En términos físicos, esto significa

que las ecuaciones del tipo hiperbólico describen propagación de ondas las cuales no adicionan suavidad a la solución cuando el tiempo avanza. Esto es contrario a las ecuaciones del tipo parabólico, las cuales representan procesos difusivos.

De aquí se hace necesario introducir las soluciones débiles que nos permitirá extender la solución más allá del tiempo crítico T^* . La clave para ampliar el concepto de solución es volver a reformular el problema de Cauchy en términos de una ecuación integral para rebajar las exigencias de regularidad. Para ello consideraremos el espacio de las funciones C^1 con soporte compacto en $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d$, denotado por $C_{comp}^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$, y el espacio de las funciones medibles localmente acotadas sobre $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d$, denotado por $L_{loc}^\infty(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$. Si $u_0 \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$ y $u \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$ tal que $u(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^m$ en casi todas partes, entonces se cumple

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} \left\{ u \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \sum_{j=1}^n f_j(u) \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right\} d\mathbf{x} dt = \int_{\mathbb{R}^d} u_0(\mathbf{x}) \varphi(0, \mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \forall \varphi \in C_{comp}^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$$

y se llama solución débil del problema (2.2), (2.3) y (2.4) (Godlewski y Raviart, 1991).

2.3. Condición Rankine-Hugoniot

Las funciones suaves por partes que admiten un número finito de discontinuidades y que satisfacen (2.2), (2.3) y (2.4) en sus regiones de suavidad, son soluciones débiles. Aunque no toda discontinuidad en estas funciones es admisible, existe una caracterización de las soluciones débiles que se considera a continuación. Para esto, previamente presentamos algunas definiciones. Una función $u(t, \mathbf{x})$ se llama función continuamente diferenciable por partes si $u \in C^1$, excepto en un número finito de superficies suaves orientables $\Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_p$ (llamadas superficies de discontinuidad) en el espacio $(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d)$, a través de las cuales la función u tiene un salto de discontinuidad. Dada una superficie de discontinuidad Σ , se denota por u^+ al valor límite de u por la derecha, y por u^- al valor límite por la izquierda. El vector normal a la superficie de discontinuidad Σ es denotado por $\eta = (\eta_t, \eta_{x_1}, \dots, \eta_{x_d})$. Además, con $u^+ - u^-$ y $f_j(u^+) - f_j(u^-)$, denotamos los saltos de las funciones u y $f_j(u)$, respectivamente, a través de Σ .

Sea $u : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^m$ una función continuamente diferenciable por partes. u es solución débil de (2.2), (2.3) y (2.4) sobre $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d$ si y sólo si:

- i) u es una solución clásica de (2.2) , (2.3) y (2.4) en todo dominio donde $u \in C^1$
- ii) u satisface la condición de Rankine-Hugoniot, esto es

$$(u^+ - u^-)\eta_t + \sum_{j=1}^d [f_j(u^+) - f_j(u^-)] \eta_{x_j} = 0$$

a lo largo de todas las superficies de discontinuidad Σ .

En la literatura científica está ampliamente divulgado que las soluciones débiles no son únicas y no todas son físicamente aceptables. Entonces, surge el problema de escoger entre todas las soluciones débiles aquellas que sea físicamente aceptable. Una solución físicamente aceptable se denomina solución débil entrópica. Detalles sobre la entropía y soluciones entrópicas se encuentra en (Oden, s.f.; Tadmor, s.f.).

En resumen, los puntos básicos a tener en cuenta en la resolución de una ley de conservación, son:

1. La aparición espontánea de discontinuidades o choques que conducen a la necesidad de una formulación débil.
2. La existencia de muchas soluciones débiles matemáticamente posibles, esto es, que satisfacen la condición de Rankine-Hugoniot.
3. La elección de una solución débil físicamente aceptable, por lo tanto, escoger una solución débil que satisfice la condición de entropía.

2.4. Ley de Conservación bi-dimensional

A continuación se estudia leyes de conservación bi-dimensionales que es el propósito del presente trabajo.

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ un dominio bi-dimensional y $D = [T_0, T_f] \times \Omega$, donde T_0 es el tiempo inicial y T_f es el tiempo final. Si en el sistema de leyes de conservación d -dimensional (2.1) hacemos $d = 2$, entonces el sistema de leyes de conservación bi-dimensional es de la forma siguiente:

$$u_t(t, x, y) + \frac{\partial}{\partial x} f_1(u(t, x, y)) + \frac{\partial}{\partial y} f_2(u(t, x, y)) = s, \quad (t, x, y) \in D \quad (2.5)$$

donde $u(t, x, y) \in \mathbb{R}^m$ y $\mathbf{f} = (f_1, f_2)$ con $f_1, f_2 : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ las cuales se llaman funciones flujo que actúan sobre u en las direcciones x y y .

Aquí Ω se llama dominio espacial y $[T_0, T_f]$ dominio temporal de la ley de conservación. El dominio D se muestra en la Figura 2.1 con $T_0 = 0$ y $T_f = T$.

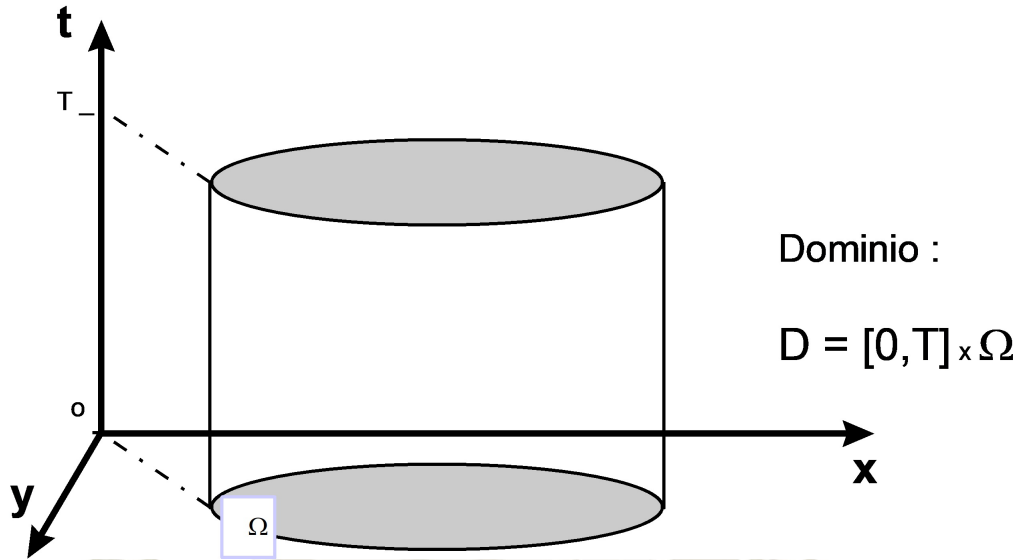


Figura 2.1: Dominio espacio temporal de la ley de conservación

Consideremos el problema de Cauchy de la ecuación (2.5) con condiciones de contorno sobre el dominio de la ley de conservación D . Esto es, hallar una función $u \in C^1(D, \mathbb{R}^m)$ tal que satisface (2.5), (2.3) y (2.4). Esto significa hallar una solución clásica de la ecuación diferencial dada. Además en estas ecuaciones del tipo hiperbólico, la solución puede presentar singularidades a través del tiempo, por más que la función inicial $u_0(x, y)$ sea suave. Entonces lo más probable es que no exista una solución clásica del problema de Cauchy, por lo que recurrimos a la idea de la solución débil para leyes de conservación.

El objetivo es resolver numéricamente la ley de conservación empleando una formulación débil para el problema bi-dimensional sobre una discretización del dominio D .

2.5. Ejemplos de leyes de conservación

2.5.1. Ecuación de Euler

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. La ecuación de Euler es una ley de conservación de la forma

$$u_t(t, \mathbf{x}) + \nabla \cdot \mathbf{f}(u(t, \mathbf{x})) = 0 \quad , \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \Omega.$$

Para un estudio mas detallado de las ecuaciones de Euler para fluidos, léase la sección "The Euler's equation of motion for fluid flow" de la referencia (Deshmukh, 2019).

Si $d = 1$, $\mathbf{x} = x$, las variables conservadas son: la densidad ρ , el momento ρv (el flujo de masa en la dirección del eje x) y la energía E del fluido. E es la energía total del fluido por unidad de volumen, es decir la suma de la energía cinética por unidad de volumen y la energía interna por unidad de volumen: $E = \frac{1}{2}\rho v^2 + \rho e$ donde e es la energía interna por unidad de masa.

El vector de variables conservadas para el caso uni-dimensional es:

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}$$

y la función vectorial del flujo es

$$\mathbf{f}(u) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{pmatrix}$$

Aquí p es la presión, que está relacionada con las cantidades conservadas por la ecuación de estado de los gases ideales

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho v^2$$

donde γ es el exponente adiabático para gases politrópicos y $\gamma = 1 + \frac{R}{c_v}$, donde R es la constante universal de los gases y $c_v > 0$ es el calor específico en volumen constante

del gas en estudio, $\gamma > 1$.

Si $d = 2$, $\mathbf{x} = (x, y)$, las variables conservadas son la densidad, la energía y esta vez existen dos momentos generados por las dos componentes de la velocidad, v_x y v_y .

El vector de variables conservadas es

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ E \end{pmatrix}$$

La función vectorial flujo es

$$\mathbf{f}(u) = (f_1(u), f_2(u)) = \left(\begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ \rho v_x v_y \\ v_x(E + p) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \rho v_y \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_y^2 + p \\ v_y(E + p) \end{pmatrix} \right)$$

Para este caso la ecuación de estado de los gases ideales es

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho(v_x^2 + v_y^2).$$

En la presente tesis se trabaja en dominios de dos dimensiones para las variables en el espacio.

Apenas para efectos de completar la información sobre las leyes de conservación de Euler se presentan a seguir las variables conservadas y las funciones flujo para un dominio en tres dimensiones en el espacio. En la descripción de trabajos futuros se sugiere realizar el estudio del presente método para tan importante ley de conservación para el caso tri-dimensional.

Si $d = 3$, $\mathbf{x} = (x, y, z)$, las variables conservadas son la densidad, la energía y tres momentos generados por las componentes de la velocidad, v_x , v_y y v_z . El vector de

variables conservadas es

$$u = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v_x \\ \rho v_y \\ \rho v_z \\ E \end{pmatrix}$$

La función vectorial flujo es

$$\mathbf{f}(u) = \left(\begin{pmatrix} \rho v_x \\ \rho v_x^2 + p \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_x v_z \\ v_x(E + p) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \rho v_y \\ \rho v_x v_y \\ \rho v_y^2 + p \\ \rho v_y v_z \\ v_y(E + p) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \rho v_z \\ \rho v_x v_z \\ \rho v_y v_z \\ \rho v_z^2 + p \\ v_z(E + p) \end{pmatrix} \right)$$

Las leyes de conservación expuestas son las ecuaciones de Euler que gobiernan la dinámica de fluidos, en las que se desprecian los efectos viscosos y la conducción de calor es nula. Para validar y probar la convergencia del método propuesto se realizaron experimentos numéricos con una solución con discontinuidad.

2.5.2. Ecuación de Burgers

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. La ecuación de Burgers es una ley de conservación de la forma

$$u_t + uu_x + uu_y = 0 \quad , \quad t \in [0, T] \quad , \quad \mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$$

con funciones flujo definido por

$$f_1(u) = f_2(u) = \frac{1}{2}u^2$$

En el caso uni-dimensional, la ecuación de Burgers es

$$u_t + uu_x = 0 \quad , \quad t \in [0, T] \quad , \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}$$

con función flujo

$$f(u) = \frac{1}{2}u^2.$$

2.5.3. Ecuación lineal con coeficientes variables

En esta ecuación tenemos el problema de rotación de un cono alrededor del origen para $\Omega \subset \mathbb{R}^2$.

La ley de conservación (vea (Calle, 2002))

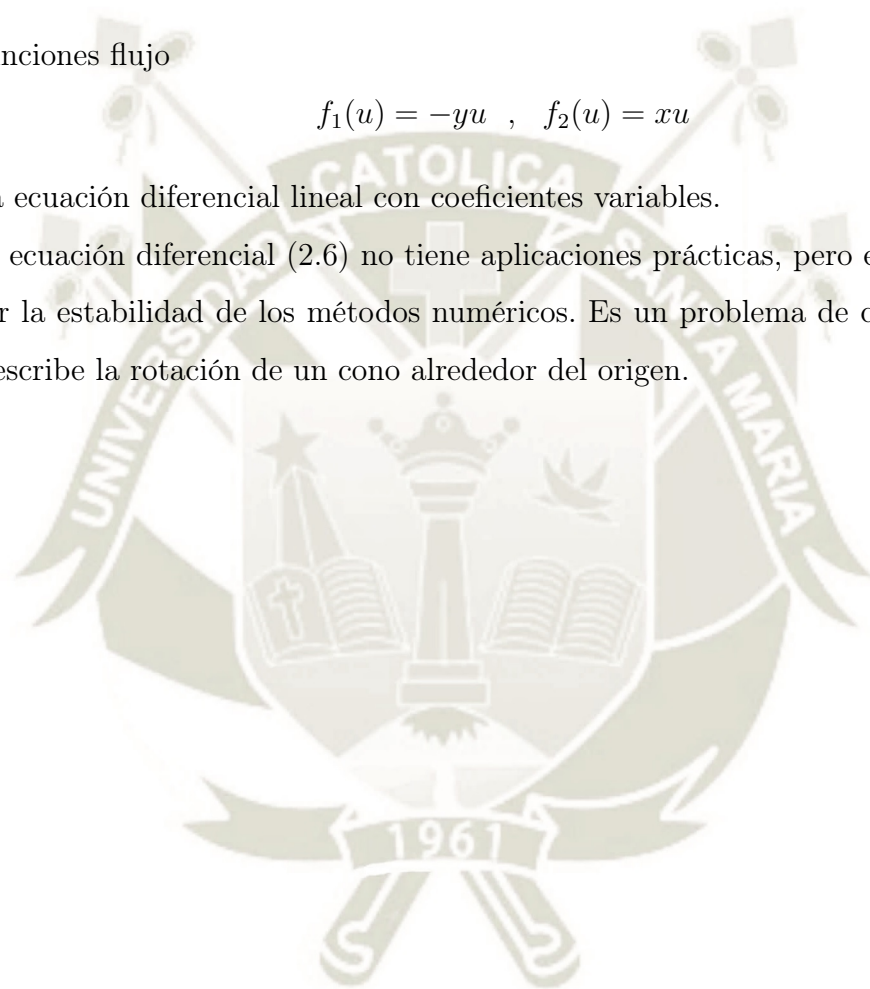
$$u_t - yu_x + xu_y = 0 \quad , \quad t \in [0, T] \quad , \quad \mathbf{x} = (x, y) \in \Omega \quad (2.6)$$

con funciones flujo

$$f_1(u) = -yu \quad , \quad f_2(u) = xu$$

es una ecuación diferencial lineal con coeficientes variables.

La ecuación diferencial (2.6) no tiene aplicaciones prácticas, pero es muy útil para validar la estabilidad de los métodos numéricos. Es un problema de convección pura, que describe la rotación de un cono alrededor del origen.



Capítulo 3

Simulación numérica en tiempo y espacio

El dominio del problema presentado es $D = [T_0, T_f] \times \Omega$. Sin pérdida de generalidad se considera $T_0 \geq 0$, por lo tanto $D \subset \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^d$. Para resolver numéricamente el problema, primero se debe discretizar el dominio. En el caso de las leyes de conservación una primera alternativa es escoger un número finito de elementos geométricos del dominio D que discretice el espacio y tiempo simultáneamente. Por ejemplo, para $d = 2$ se tiene $D \subset \mathbb{R}^3$, entonces se podría discretizar el dominio D en tetraedros, hexaedros, pirámides o prismas. Para d arbitrario, significa particionar el dominio en subconjuntos simples de dimensión $d + 1$.

Una segunda alternativa es considerar el dominio del tiempo y el dominio del espacio separadamente, esta es más adecuada, dada las características propias del dominio temporal. Observar que el estado de un sistema en un tiempo t_k puede influenciar el estado del sistema en un tiempo t_{k+1} , con $t_k < t_{k+1}$, a futuro, mas no al contrario. Para el presente estudio es elegida la segunda alternativa.

3.1. El Método de Rothe

El método de Rothe (Rothe, 1930; SCHEMANN y BORNEMANN, 1998), también conocido como el método transversal de líneas, es una herramienta conveniente para resolver una variedad de problemas de evolución, es decir, problemas dependientes del tiempo. Su característica principal consiste en resolver numéricamente en la variable

del tiempo, discretizando el dominio temporal y generando un sistema de ecuaciones diferenciales en las variables del espacio, como si fuera un problema estacionario, pero incluyendo el factor del paso del tiempo Δt . Posteriormente, se resuelve numéricamente el problema estacionario sobre una discretización del dominio espacial.

En la presente tesis se utiliza métodos basados en elementos finitos, que utilizan espacios de funciones de aproximación que son polinómios por partes, sobre el dominio del espacio, pero no para el tiempo. La ventaja del método de Rothe es que, en cada paso de tiempo el espacio de aproximación sobre el dominio de las variables del espacio se puede modificar, es decir, se puede usar una formulación de elementos finitos estabilizados, o de Galerkin discontinuo estabilizado, o de volúmenes finitos, o una formulación H^1 hibridizada estabilizada, etc. Así se tiene un esquema multinumérico. En el trabajo de Ramos (RAMOS, 2007) se explica extensamente el método de Rothe y pueden encontrarse diversos ejemplos de su aplicación en (HARARI y HAUKE, 2007; KOLEVA, 2005).

Por otro lado, en el método de líneas el espacio de aproximación espacial no cambia hasta el final del proceso. Para cambiar el espacio de aproximación espacial, debemos empezar de nuevo. Esto porque al discretizar las variables espaciales primero, es fácil determinar el espacio de funciones aproximantes de una única vez y posteriormente se resuelve el sistema ordinario en el tiempo. Si se quiere cambiar el espacio de funciones aproximantes en otros tiempos, se precisa reiniciar la discretización en el espacio, por lo tanto, el costo computacional aumenta.

El dominio temporal $[T_0, T_f]$ es unidimensional y para discretizar se va a determinar un conjunto finito creciente de tiempos

$$\{t_k / k = 0, 1, 2, \dots, K; t_0 = T_0 \text{ y } t_K = T_f\}$$

Esos puntos no son arbitrarios, porque los valores escogidos pueden generar un esquema inestable, por lo tanto, deben ser escogidos con mucho criterio.

El número $\Delta t_k = t_{k+1} - t_k$, con $k = 0, 1, 2, \dots, K - 1$ se llama k -ésimo paso de tiempo y se obtiene satisfaciendo la condición CFL (Courant, Friedrichs, Lewi), la cual está representada por:

$$|\max f'(u)| \frac{\Delta t}{h} \leq CFL \quad (3.1)$$

donde, f es la función flujo en la ley de conservación, Δt es el paso de tiempo sugerido que cumple con la desigualdad (se puede tomar un paso de tiempo igual o menor como Δt_k , nunca mayor), y h es la menor de las medidas de los elementos de la malla discretizada. Observar que es calculada una medida sobre cada elemento finito y se escoje el menor de esos valores. Esta medida puede ser escogida a criterio del usuario, en el caso $d = 2$ puede ser el diámetro del círculo circunscrito de un triángulo, la medida de la mayor diagonal de un cuadrilátero, etc.

En resumen, considere un tiempo t_k , en ese tiempo, el dominio del espacio Ω se discretiza en una malla de elementos finitos determinando h . Utilizando la condición CFL (3.1) se calcula el valor del paso de tiempo Δt considerando un número $CFL \leq 1$. Por último, se determina un paso de tiempo tal que $\Delta t_k \leq \Delta t$.

Por lo mencionado, la discretización temporal es simple, pero los pasos de tiempo son escogidos en función a la discretización espacial, a fin de garantizar la estabilidad del esquema. En conclusión, dado t_k y determinado el paso de tiempo Δt_k se tiene el tiempo $t_{k+1} = t_k + \Delta t_k$, para $k = 0, 1, \dots, K - 1$, y así se discretiza el dominio del tiempo hasta alcanzar el tiempo final T_f .

A continuación se inicia la descripción de la resolución numérica del algoritmo propuesto, considerando que en el análisis de algoritmos para problemas dependientes del tiempo, el orden de exactitud y la estabilidad deben ser considerados de forma coherente, ambos conducen a una aproximación numérica convergente (Celia y Gray, 1992).

3.1.1. Esquema numérico en el tiempo

Si la ecuación diferencial (2.1) toma la siguiente forma

$$u_t(t, \mathbf{x}) = s(t, \mathbf{x}, u) - \nabla \cdot \mathbf{f}(u(t, \mathbf{x})), \quad (t, \mathbf{x}) \in D$$

se define:

$$H(t, \mathbf{x}, u) = s(t, \mathbf{x}, u) - \nabla \cdot \mathbf{f}(u(t, \mathbf{x}))$$

entonces, la ecuación diferencial es considerada ordinaria (en función de t):

$$\frac{d}{dt}u(t, \mathbf{x}) = H(t, \mathbf{x}, u) \quad (3.2)$$

donde $t \in [T_0, T_f]$ y $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$.

Al discretizar el dominio temporal, en la ecuación diferencial (3.2) se puede aplicar diferentes métodos numéricos para obtener una aproximación de la solución exacta $u(t_k, \cdot)$ en el tiempo t_k denotada por $u^k(\cdot)$. Entre los más utilizados están los métodos de Runge-Kutta, de primer orden (método de Euler), de segundo, tercero y cuarto orden.

3.1.2. Método de Runge-Kutta

Los métodos de Runge-Kutta son un conjunto de métodos iterativos para determinar la aproximación de soluciones de un problema de valor inicial. Como problema de valor inicial se puede considerar la ecuación diferencial (3.2) sujeta a una condición inicial:

$$\frac{d}{dt}u(t, \mathbf{x}) = H(t, \mathbf{x}, u) \quad (3.3)$$

$$u(T_0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \quad (3.4)$$

Generalmente el estado de un proceso es conocido en el momento inicial, mientras que su evolución es objeto de estudio. Entonces en el intervalo de tiempo $[t_k, t_{k+1}]$, la solución u^k es conocida (en el tiempo inicial t_k) y se busca la solución u^{k+1} en el tiempo t_{k+1} .

Para obtener un algoritmo que resuelva la ecuación diferencial (3.3) sujeta a la condición inicial (3.4), integramos la ecuación (3.3) desde t_k hasta t_{k+1} ,

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d}{dt}u(t, \mathbf{x})dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} H(t, \mathbf{x}, u)dt$$

Suponiendo la suficiente regularidad en el miembro izquierdo, se escribe

$$u^{k+1}(\mathbf{x}) - u^k(\mathbf{x}) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} H(t, \mathbf{x}, u)dt$$

Ahora suponiendo que el operador H es constante en el intervalo $[t_k, t_{k+1})$ se tiene la expresión

$$u^{k+1}(\mathbf{x}) = u^k(\mathbf{x}) + \Delta t_k H(t_k, \mathbf{x}, u^k)$$

Este esquema que obtiene la solución u^{k+1} desde la solución inicial u_k , se define como

el método de Runge-Kutta de orden 1, conocido también como el método de Euler. Observe que se obtiene la misma expresión si se utiliza un esquema simple de diferencias finitas para la derivada ordinaria en (3.3).

Haciendo un desarrollo mas elaborado se obtienen el método de Runge-Kutta de orden 2. Por ejemplo, se considera el punto $t_{k+\frac{1}{2}} = t_k + \frac{\Delta t_k}{2}$ como punto medio del intervalo $[t_k, t_{k+1}]$. Entonces debemos calcular dos soluciones $u^{k+\frac{1}{2}}$ y u^{k+1} .

Para obtener la solución u^{k+1} , aproximamos $H(t, \mathbf{x}, u)$ con su desarrollo en serie de Taylor en el punto medio $t_{k+\frac{1}{2}}$ del intervalo de integración $[t_k, t_{k+1}]$

$$H(t, \mathbf{x}, u) \approx H(t_{k+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}, u^{k+\frac{1}{2}}) + (t - t_{k+\frac{1}{2}}) \left. \frac{dH}{dt} \right|_{t_{k+\frac{1}{2}}} + O(\Delta t_k^2)$$

Se observa que es suficiente utilizar el primer término de la expansión, debido a que la integral de $(t - t_{k+\frac{1}{2}})$ es cero cuando se evalúa en el punto medio. Así

$$u^{k+1}(\mathbf{x}) \approx u^k(\mathbf{x}) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} H(t_{k+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}, u^{k+\frac{1}{2}}) dt$$

$$u^{k+1}(\mathbf{x}) \approx u^k(\mathbf{x}) + \Delta t_k H(t_{k+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}, u^{k+\frac{1}{2}})$$

En la última expresión $u^{k+\frac{1}{2}}$ es desconocida, entonces también aproximamos utilizando su desarrollo en serie de Taylor:

$$u^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \approx u^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t_k}{2} \left. \frac{d}{dt} u(t, \mathbf{x}) \right|_{t_k} + O(\Delta t_k^2)$$

Pero $\left. \frac{d}{dt} u(t, \mathbf{x}) \right|_{t_k} = H(t_k, \mathbf{x}, u^k)$, entonces

$$u^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) \approx u^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t_k}{2} H(t_k, \mathbf{x}, u^k) + O(\Delta t_k^2)$$

Por lo tanto, dado $u^k(\mathbf{x})$ se debe calcular una solución intermediaria:

$$u^{k+\frac{1}{2}}(\mathbf{x}) = u^k(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t_k}{2} H(t_k, \mathbf{x}, u^k)$$

y entonces la solución objetivo para el próximo tiempo t_{k+1} es

$$u^{k+1}(\mathbf{x}) = u^k(\mathbf{x}) + \Delta t_k H(t_{k+\frac{1}{2}}, \mathbf{x}, u^{k+\frac{1}{2}}),$$

así se ha obtenido un esquema Runge-Kutta de orden 2.

En la literatura existen muchas descripciones de los métodos de Runge-Kutta. La idea central está en trabajar con soluciones intermediarias en el intervalo $[t_k, t_{k+1}]$ antes de alcanzar la solución u^{k+1} . Así, escogiendo una solución intermediaria denotada por \tilde{u}^1 , entre u^k y u^{k+1} , se tiene el método de Runge-Kutta de orden 2. En lo descrito hace poco se tiene: $\tilde{u}^1 = u^{k+\frac{1}{2}}$.

Escogiendo calcular dos soluciones intermediarias denotadas por \tilde{u}^1 y \tilde{u}^2 se tiene el método de Runge-Kutta de orden 3. Debe destacarse que los tiempos intermediarios no son igualmente espaciados, al contrario, se utilizan tiempos mas próximos al tiempo t_k porque es donde se conoce la solución inicial en el intervalo. El método de Runge-Kutta de orden 4, calcula tres soluciones intermediarias para obtener u^{k+1} y son denotadas por \tilde{u}^1 , \tilde{u}^2 y \tilde{u}^3 .

A partir del método de Runge-Kutta de orden 5 el costo computacional aumenta considerablemente por el aumento de los cálculos intermediarios que deben ser considerados.

Un esquema Runge-Kutta de orden L sigue el siguiente algoritmo:

Dada la solución conocida $u^k(\mathbf{x}) = u(t_k, \mathbf{x})$ y dado un paso de tiempo Δt_k (determinado utilizando la condición CFL), se calcula

1. $\tilde{u}^0(\mathbf{x}) = u^k(\mathbf{x})$
2. $\tilde{u}^l(\mathbf{x}) = \sum_{r=0}^{l-1} [a_{lr}\tilde{u}^r(\mathbf{x}) + b_{lr}\Delta t_k H(t_k + \frac{\Delta t_k}{L-r+1}, \mathbf{x}, \tilde{u}^r)], \quad l = 1, 2, \dots, L$
3. $u^{k+1}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^L(\mathbf{x})$

Los coeficientes a_{lr} y b_{lr} son dados generalmente en cuadros de valores obtenidos empíricamente. Utilizando los valores de a_{lr} y b_{lr} expuestos en (Shu y Osher, 1989) se han realizado cálculos en las expresiones matemáticas del algoritmo llegando a una expresión simplificada. El algoritmo obtenido simplificado es diferente del expuesto en (Calle, 2002). Sin embargo, se respetó que los coeficientes a_{lr} sumen 1 para cada l y con esto se obtuvo que en cada iteración se obtenga un sumando formado por el u^k . También se respetó que los coeficientes que se llamarán c_{lr} , no sean coeficientes negativos.

Este algoritmo simplificado se escribe de la siguiente forma:

Dado un entero positivo L , dado el k -ésimo paso de tiempo Δt_k y definiendo los tiempos

$$t_{k_{lr}}^{(L)} = t_k + \frac{\Delta t_k}{L-r+1}, \text{ entonces}$$

$$1. \tilde{u}^0(\mathbf{x}) = u^k(\mathbf{x})$$

$$2. \tilde{u}^l(\mathbf{x}) = \tilde{u}^0(\mathbf{x}) + \Delta t_k \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} H(t_{k_{lr}}^{(L)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^r), \quad l = 1, 2, \dots, L$$

$$3. u^{k+1}(\mathbf{x}) = \tilde{u}^L(\mathbf{x})$$

En el esquema de Runge-Kutta de orden L , en su forma simplificada, se tienen los valores de los coeficientes c_{lr} para los esquemas Runge-Kutta de orden 1, 2, 3 y 4 en el Cuadro 3.1.

Orden 1	c_{l0}			
$l=1$	1			
Orden 2	c_{l0}	c_{l1}		
$l=1$	1			
$l=2$	1/2	1/2		
Orden 3	c_{l0}	c_{l1}	c_{l2}	
$l=1$	1			
$l=2$	1/4	1/4		
$l=3$	1/6	1/6	2/3	
Orden 4	c_{l0}	c_{l1}	c_{l2}	c_{l3}
$l=1$	1/2			
$l=2$	0	1/2		
$l=3$	0	0	1	
$l=4$	1/6	1/3	1/3	1/6

Cuadro 3.1: Coeficientes Runge-Kutta. Orden: 1, 2, 3 y 4.

En las siguientes subsecciones se exponen de forma detallada las ecuaciones correspondientes a las aproximaciones intermedias y final para cada paso de tiempo, en los esquemas Runge-Kutta de orden 1, 2, 3 y 4. Primero se detalla para el caso de una ley de conservación no homogénea y posteriormente para una ley de conservación homogénea, que es materia de estudio de la presente tesis.

3.1.3. Descripción de los esquemas Runge-Kutta para una ley de conservación no homogénea

Se considera la ley de conservación no homogénea

$$u_t = s(t, \mathbf{x}, u) - \nabla \cdot f(u(t, \mathbf{x})) = H(t, \mathbf{x}, u)$$

sobre $D = [T_0, T_f] \times \Omega$.

Por lo expuesto en la sección anterior, esta ecuación se considera como una ecuación diferencial ordinaria para la variable tiempo en el intervalo $[t_k, t_{k+1}]$ con valor inicial conocido $u(t_k, \cdot) = u^k$ y para un paso de tiempo, Δt_k . Se considera que el paso de tiempo Δt_k es determinado a partir de la aplicación de la condición CFL en el tiempo t_k .

Al discretizar la ley de conservación no homogénea en el tiempo, es probable que se necesite calcular $s(t_{k_{lr}}, \cdot, \tilde{u}^r) \neq 0$, que es un término del operador H , debe ser determinado el tiempo en que debe calcularse la función s . Se sabe que u también depende de t , pero para u ya se tiene una aproximación en un paso de tiempo anterior. En las subsecciones siguientes se detalla el cálculo de las aproximaciones de u a partir de u_k , para los pasos intermediarios y u_{k+1} .

Los tiempos para el cálculo de s se determinan por:

Para $r = 0, 1, \dots, l-1$, se calcula $t_{k_{lr}}^{(L)} = t_k + \frac{\Delta t_k}{L-r+1}$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 1

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

para $l = 1$: $t_{k_{10}}^{(1)} = t_k + \frac{1}{2} \Delta t_k$

$$\tilde{u}^1 = u^k + \Delta t_k \left[s(t_{k_{10}}^{(1)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right]$$

$$u^{k+1} = \tilde{u}^1$$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 2

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

para $l = 1$: $t_{k_{10}}^{(2)} = t_k + \frac{1}{3} \Delta t_k$

$$\tilde{u}^1 = u^k + \Delta t_k \left[s(t_{k_{10}}^{(2)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right]$$

para $l = 2$: $t_{k_{20}}^{(2)} = t_k + \frac{1}{3} \Delta t_k$ y $t_{k_{21}}^{(2)} = t_k + \frac{1}{2} \Delta t_k$

$$\tilde{u}^2 = u^k + \Delta t_k \left\{ \frac{1}{2} \left[s(t_{k_{20}}^{(2)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right] + \frac{1}{2} \left[s(t_{k_{21}}^{(2)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^1) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^1) \right] \right\}$$

$$u^{k+1} = \tilde{u}^2$$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 3

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

para $l = 1$: $t_{k_{10}}^{(3)} = t_k + \frac{1}{4} \Delta t_k$

$$\begin{aligned}\tilde{u}^1 &= u^k + \Delta t_k \left[s(t_{k_{10}}^{(3)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right] \\ \text{para } l = 2: t_{k_{20}}^{(3)} &= t_k + \frac{1}{4}\Delta t_k \text{ y } t_{k_{21}}^{(3)} = t_k + \frac{1}{3}\Delta t_k \\ \tilde{u}^2 &= u^k + \Delta t_k \left\{ \frac{1}{4} \left[s(t_{k_{20}}^{(3)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right] + \frac{1}{4} \left[s(t_{k_{21}}^{(3)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^1) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^1) \right] \right\} \\ \text{para } l = 3: t_{k_{30}}^{(3)} &= t_k + \frac{1}{4}\Delta t_k \text{ y } t_{k_{31}}^{(3)} = t_k + \frac{1}{3}\Delta t_k \text{ y } t_{k_{32}}^{(3)} = t_k + \frac{1}{2}\Delta t_k \\ \tilde{u}^3 &= u^k + \Delta t_k \left\{ \frac{1}{6} \left[s(t_{k_{30}}^{(3)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right] + \frac{1}{6} \left[s(t_{k_{31}}^{(3)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^1) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^1) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{3} \left[s(t_{k_{32}}^{(3)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^2) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^2) \right] \right\} \\ u^{k+1} &= \tilde{u}^3\end{aligned}$$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 4

$$\begin{aligned}\text{Dado } \tilde{u}^0 &= u^k \text{ y calculado } \Delta t_k, \\ \text{para } l = 1: t_{k_{10}}^{(4)} &= t_k + \frac{1}{5}\Delta t_k \\ \tilde{u}^1 &= u^k + \Delta t_k \frac{1}{2} \left[s(t_{k_{10}}^{(4)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right] \\ \text{para } l = 2: t_{k_{20}}^{(4)} &= t_k + \frac{1}{5}\Delta t_k \text{ y } t_{k_{21}}^{(4)} = t_k + \frac{1}{4}\Delta t_k \\ \tilde{u}^2 &= u^k + \Delta t_k \frac{1}{2} \left[s(t_{k_{21}}^{(4)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^1) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^1) \right] \\ \text{para } l = 3: t_{k_{30}}^{(4)} &= t_k + \frac{1}{5}\Delta t_k, t_{k_{31}}^{(4)} = t_k + \frac{1}{4}\Delta t_k \text{ y } t_{k_{32}}^{(4)} = t_k + \frac{1}{3}\Delta t_k \\ \tilde{u}^3 &= u^k + \Delta t_k \left[s(t_{k_{32}}^{(4)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^2) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^2) \right] \\ \text{para } l = 4: t_{k_{40}}^{(4)} &= t_k + \frac{1}{5}\Delta t_k, t_{k_{41}}^{(4)} = t_k + \frac{1}{4}\Delta t_k, t_{k_{42}}^{(4)} = t_k + \frac{1}{3}\Delta t_k \text{ y } t_{k_{43}}^{(4)} = t_k + \frac{1}{2}\Delta t_k \\ \tilde{u}^4 &= u^k + \Delta t_k \left\{ \frac{1}{6} \left[s(t_{k_{40}}^{(4)}, \mathbf{x}, u^k) - \nabla \cdot f(u^k) \right] + \frac{1}{3} \left[s(t_{k_{41}}^{(4)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^1) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^1) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3} \left[s(t_{k_{42}}^{(4)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^2) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^2) \right] + \frac{1}{6} \left[s(t_{k_{43}}^{(4)}, \mathbf{x}, \tilde{u}^3) - \nabla \cdot f(\tilde{u}^3) \right] \right\} \\ u^{k+1} &= \tilde{u}^4\end{aligned}$$

3.1.4. Descripción de los esquemas Runge-Kutta para una ley de conservación homogénea

Se considera la ley de conservación homogénea

$$u_t = -\nabla \cdot f(u)$$

sobre $D = [T_0, T_f] \times \Omega$.

Se considera como una ecuación diferencial ordinaria para la variable tiempo en el intervalo $[t_k, t_{k+1}]$ con valor inicial conocido $u(t_k, \cdot) = u^k$ y con un paso de tiempo, Δt_k aplicando la condición CFL en el tiempo t_k . Observar que no se necesita determinar expresamente los tiempos intermedios, porque el operador H solo considera el

divergente de las funciones flujo que dependen de las aproximaciones anteriores de u .

Para el esquema Runge-Kutta de orden 1

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

$$\tilde{u}^1 = u^k - \Delta t_k [\nabla \cdot f(u^k)]$$

$$u^{k+1} = \tilde{u}^1$$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 2

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

$$\tilde{u}^1 = u^k - \Delta t_k [\nabla \cdot f(u^k)]$$

$$\tilde{u}^2 = u^k - \Delta t_k \left\{ \frac{1}{2} [\nabla \cdot f(u^k)] + \frac{1}{2} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^1)] \right\}$$

$$u^{k+1} = \tilde{u}^2$$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 3

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

$$\tilde{u}^1 = u^k - \Delta t_k [\nabla \cdot f(u^k)]$$

$$\tilde{u}^2 = u^k - \Delta t_k \left\{ \frac{1}{4} [\nabla \cdot f(u^k)] + \frac{1}{4} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^1)] \right\}$$

$$\tilde{u}^3 = u^k - \Delta t_k \left\{ \frac{1}{6} [\nabla \cdot f(u^k)] + \frac{1}{6} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^1)] + \frac{2}{3} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^2)] \right\}$$

$$u^{k+1} = \tilde{u}^3$$

Para el esquema Runge-Kutta de orden 4

Dado $\tilde{u}^0 = u^k$ y calculado Δt_k ,

$$\tilde{u}^1 = u^k - \Delta t_k \frac{1}{2} [\nabla \cdot f(u^k)]$$

$$\tilde{u}^2 = u^k - \Delta t_k \frac{1}{2} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^1)]$$

$$\tilde{u}^3 = u^k - \Delta t_k [\nabla \cdot f(\tilde{u}^2)]$$

$$\tilde{u}^4 = u^k - \Delta t_k \left\{ \frac{1}{6} [\nabla \cdot f(u^k)] + \frac{1}{3} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^1)] + \frac{1}{3} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^2)] + \frac{1}{6} [\nabla \cdot f(\tilde{u}^3)] \right\}$$

$$u^{k+1} = \tilde{u}^4$$

3.2. Método de Rothe multi-numérico en el espacio

Se tiene un problema de Cauchy con condiciones frontera para una ley de conservación (2.2), (2.3) y (2.4). Por simplicidad, se considera la ley de conservación homogé-

nea $s(t, \mathbf{x}, u) = 0$. Para mantener la coherencia, se analiza detenidamente lo que se ha desarrollado para la resolución numérica en el tiempo y se va incrementando los pasos adecuados para la resolución numérica en las variables del espacio.

Para resolver numéricamente el problema mencionado sobre un dominio D se aplica el método de Rothe, de una forma especial e iterativa, esto significa que la idea no es discretizar el dominio del tiempo en una secuencia arbitraria de tiempos discretos. Para aplicar el método de Rothe (inicialmente discretizar en el tiempo) se considera el problema de Cauchy referenciado como una ecuación diferencial ordinaria en el tiempo, como en (3.2), (3.3) y (3.4).

Independientemente, sobre Ω , se determina una malla inicial de elementos finitos para discretizar las variables del espacio en el tiempo inicial T_0 , se denota por $\mathcal{M}_h^{T_0}$ la malla que se escoja para discretizar Ω . Esa discretización inicial $\mathcal{M}_h^{T_0}$, se basa en el conocimiento inicial que se tiene del problema de Cauchy, el poder computacional que se cuenta y la experiencia del usuario que pretende la simulación numérica del problema. Por lo tanto, la malla depende del tiempo en que se está estudiando. Observar que con esto se determinó una malla de elementos finitos pero no se está resolviendo numéricamente, esto es, no se está aplicando ningún método numérico en las variables del espacio, mucho menos el método de elementos finitos. Para la malla inicial $\mathcal{M}_h^{T_0}$, se puede determinar una medida como el tamaño de los elementos finitos $h^{T_0} = h^{T_0}(E)$, donde $E \in \mathcal{M}_h^{T_0}$. Por ejemplo, la medida de los intervalos en una dimensión, el radio del círculo (esfera) circunscrito que contiene el elemento finito en dos (tres) dimensiones, etc. Así, en el tiempo fijo T_0 se ha asociado una medida h^{T_0} , y se puede calcular la menor $h_{min}^{T_0}$ o la mayor $h_{max}^{T_0}$ de las medidas de todos los elementos finitos de la malla, $\mathcal{M}_h^{T_0}$ es un conjunto finito.

Observar que la solución es conocida solo en el tiempo T_0 , que es u_0 , vea (2.3). Para esa solución (inicial) conocida se calcula $|\max f'(u_0(\mathbf{x}))|$. Así, en T_0 se conoce el máximo de la derivada de la función flujo $|\max f'(u_0)|$, y con la creación previa de la malla inicial de Ω se ha determinado el valor de h^{T_0} . Si en la desigualdad (3.1), conocida como la condición CFL , se determina un valor para el número CFL con valor menor o igual a 1, $CFL \leq 1$, entonces se obtiene una cota superior para el paso de tiempo adecuado Δt :

$$\Delta t \leq (CFL) \frac{h_{min}^{T_0}}{|\max f'(u_0)|}.$$

Al escoger un paso de tiempo que satisfaga la desigualdad, se está determinando un paso de tiempo a partir de T_0 , y es denotado por ΔT_0 . Este paso de tiempo permitirá resolver la ecuación diferencial vista como ordinaria en el tiempo de forma estable.

Observar que ΔT_0 es un valor fijo escogido satisfaciendo la desigualdad, no necesariamente el mayor valor de la desigualdad. Con este proceso se determina un nuevo tiempo fijo discreto $t_1 = T_0 + \Delta t_0$ (se tiene el primer intervalo de tiempo discretizado), y si $t_1 > T_f$ se hace $t_1 = T_f$ y se ajusta $\Delta T_0 = T_f - T_0$. Si $t_1 < T_f$ no se realizan ajustes del tiempo.

Ahora se tienen tres tiempos para la discretización del tiempo: T_0 , t_1 y T_f , donde $T_0 < t_1 \leq T_f$. Se destaca que se ha obtenido el primer intervalo de tiempo discretizado $[T_0, t_1]$ y se considera el intervalo $[t_1, T_f]$, no como un intervalo discretizado sino como un nuevo dominio para ser discretizado con el proceso descrito de forma iterativa. En el intervalo discretizado $[T_0, t_1]$, se realiza la resolución numérica aplicando un método numérico para resolver la ecuación diferencial en las variables del espacio (método de Rothe). En esta tesis se utilizan técnicas en elementos finitos para las variables en el espacio y la formulación adecuada será escogida dependiendo de la información adicional después de la aplicación de la técnica de reconstrucción del gradiente explicada en el Capítulo 5.

Finalizada la resolución numérica de la ecuación diferencial en las variables del espacio sobre el primer intervalo, se tiene una solución numérica calculada en el tiempo t_1 , u_1 . Ahora, considerando u_1 como la solución inicial conocida y el nuevo dominio del tiempo $[t_1, T_f]$, se realiza nuevamente el proceso descrito anteriormente y se determina el valor t_2 , y así sucesivamente.

En resumen, se realiza el siguiente proceso (por el método de Rothe):

1. Se determina el orden del esquema Runge-Kutta a ser utilizado.
2. Dado T_0 y u_0 , se discretiza el dominio espacial Ω en una malla de elementos finitos $\mathcal{M}_h^{T_0}$, determinando una medida $h^{T_0} = \min_{E \in \mathcal{M}_h^{T_0}} h(E)$.
3. Dada u_0 en T_0 , se aplica la condición (3.1), utilizando un número $CFL \leq 1$ para determinar un paso de tiempo ΔT_0 .
4. Se determina la primera discretización de la variable tiempo haciendo $t_1 = T_0 + \Delta T_0$ y si $t_1 > T_f$ entonces $t_1 = T_f$.

5. Sobre el intervalo discretizado $[T_0, t_1]$ se resuelve numéricamente en las variables del espacio:

- se aplica la técnica de reconstrucción del gradiente sobre u_0 , detectando altos gradientes o regiones probables de singularidad, vea la sección 5.1 del Capítulo 5;
- esa información se puede utilizar para refinar la discretización en el espacio, esto es, determinar una malla mas fina sobre Ω ;
- esa información se puede utilizar para adecuar el grado de los polinomios de las bases de los espacios de funciones de aproximación;
- también, la información de la reconstrucción del gradiente determinará la utilización de una formulación débil basada en funciones discontinuas o funciones continuas. Siempre se optará por el uso de funciones continuas, utilizando funciones discontinuas solamente en el caso de detectar regiones de probable singularidad de la solución aproximada, véase el costo computacional estudiado en la Sección 3.2.4.

6. Se calcula la solución aproximada en el tiempo t_1 , esto es $u_1 = u(t_1, \mathbf{x})$ utilizando el método de Runge-Kutta del orden determinado al inicio.

7. Si $t_1 < T_f$, se considera u_1 como la solución inicial del problema de Cauchy sobre el nuevo dominio del tiempo $[t_1, T_f]$ y se aplica nuevamente el proceso anterior. Esto se realiza iterativamente hasta alcanzar el tiempo T_f en la discretización. Enseguida se describe el proceso iterativo.

8. Así se obtiene una secuencia de soluciones numéricas:

$u_0, u_1, \dots, u_k, u_{k+1}, \dots, u_f$, donde u_f corresponde a la solución numérica en el tiempo T_f . Observar que pueden ser calculadas varias soluciones intermediarias dentro de los intervalos discretizados en el tiempo.

En el ítem 1, para determinar el orden del esquema Runge-Kutta, generalmente se toma en cuenta los recursos computacionales con los que se cuenta y el tiempo que se dispone para realizar y validar las simulaciones numéricas. El esquema de orden 4 es el más aconsejable por sus mejores propiedades de convergencia y precisión, sin embargo deben realizarse tres cálculos intermediarios para alcanzar la solución aproximada en

el tiempo final de cada intervalo de tiempo discretizado. El esquema de orden 2 es también bastante utilizado y su costo computacional es menor. Ahora, si los recursos computacionales no son muy sofisticados el esquema de orden 1 dará aproximaciones adecuadas.

El ítem 2 es el inicio del proceso iterativo. Se considera el tiempo inicial de la discretización y en ese tiempo la solución inicial u_0 debe ser conocida. Observar que para el tiempo inicial, el dominio en el espacio Ω puede ser discretizado en elementos finitos basado en el conocimiento (a priori) de u_0 , de la precisión que se quiera alcanzar y la experiencia del usuario. Entonces, se determina h como siendo la menor de las medidas de todos los elementos finitos de dimensión igual a la dimensión del modelo. Esto es importante resaltar, porque para aplicar las condiciones frontera se puede necesitar elementos de codimensión 1. Observar que no se está aplicando ningún método numérico para las variables en el espacio, no estamos hablando del método de los elementos finitos, es simplemente subdividir el dominio Ω en un conjunto de figuras geométricas simples que lo aproximen. En el caso bidimensional se utilizan principalmente triángulos y/o cuadriláteros, en el caso tridimensional se utilizan hexaedros, tetraedros, pirámides y/o prismas.

En el ítem 3, se aplica la fórmula (3.1), para que con los valores mencionados y sustituyendo el número CFL por un valor menor o igual a 1, se determine un valor adecuado para el paso de tiempo Δt a partir del tiempo inicial (la primera vez T_0). Con esto se obtiene el intervalo discretizado del tiempo, ítem 4, donde la solución inicial es conocida y se necesita calcular una solución aproximada en el tiempo final del intervalo. Para eso vamos aplicar un método numérico en las variables del espacio sobre el intervalo de tiempo determinado, lo que corresponde al ítem 5.

Gracias a la aplicación del método de Rothe, el ítem 5, está formado por varias sub etapas, que permitirán escoger diferentes métodos numéricos para resolver en las variables del espacio (multinumérico). Con ese fin, inicialmente se aplica una técnica de reconstrucción del gradiente de la solución inicial en el intervalo del tiempo, basada en técnica de mínimos cuadrados, y con esa información se identifica la existencia probable de altos gradiente o saltos de discontinuidad. Si no existen altos gradientes se aplicará una variante del método en elementos finitos H^1 -conforme sobre un espacio de funciones aproximantes continuas, y si existen altos gradientes, una variante del

método conocido como Galerkin discontinuo, DG , que utiliza un espacio de funciones aproximantes discontinuas. Ambos métodos no pueden ser aplicados directamente en la ecuación diferencial en el tiempo inicial, porque necesitan de un término estabilizador. Es conocido en la literatura científica que los métodos mencionados sin término de estabilización son inestables y cuando funcionan deben utilizar pasos de tiempo muy pequeños, lo que hace inviable su aplicación mismo a problemas simples.

Como está descrito en los subitems del ítem 5, la información de la reconstrucción del gradiente puede ser mejor explotada, aprovechando la identificación de elementos con altos gradientes, sobre los cuales y sus vecinos se puede aplicar un h -refinamiento, disminuyendo el tamaño de los elementos finitos, lo que significa aumento de grados de libertad para una mejor resolución. También se puede aplicar p -refinamiento, disminuyendo el orden de los polinomios sobre los elementos con alto gradiente y aumentando el orden sobre los elementos con gradiente pequeño. Utilizar ambos refinamientos es aplicar hp -adaptabilidad. El algoritmo de la reconstrucción del gradiente expuesto en esta tesis implementa una hp auto adaptabilidad, donde fue implementada una técnica automática que será explicada en el capítulo de adaptabilidad correspondiente, Capítulo 5.

Como el proceso es realizado sobre cada intervalo discretizado, se puede escribir el algoritmo de forma general, considerando conocida la solución en el tiempo t_k y un orden definido para el método de Runge-Kutta previamente:

1. Dada $u_k = u(t_k, \mathbf{x})$ y dada una medida h^{t_k} de la malla sobre Ω , $\mathcal{M}_h^{t_k}$, en el tiempo t_k .
2. Se aplica la condición (3.1) con $CFL \leq 1$ para determinar Δt_k .
3. Se determina $t_{k+1} = t_k + \Delta t_k$. Y si $t_{k+1} > T_f$ entonces $t_{k+1} = T_f$ y se modifica $\Delta t_k = T_f - t_k$.
4. Sobre el intervalo discretizado $[t_k, t_{k+1}]$ se resuelve numéricamente en las variables del espacio:
 - se aplica la técnica de reconstrucción del gradiente sobre u_k , detectando altos gradientes o regiones probables de singularidad;

- esa información permite aplicar un h -refinamiento de elementos de la malla sobre Ω ;
- esa información permite escoger el grado de los polinomios de las bases de los espacios de funciones de aproximación, y eso de forma independiente para cada elemento finito (p -refinamiento);
- la información de la reconstrucción del gradiente permite escoger una formulación débil en funciones discontinuas o en funciones continuas sobre toda la malla.

5. Se calcula la solución aproximada en el tiempo t_{k+1} : $u_{k+1} = u(t_{k+1}, \mathbf{x})$.

6. Se realiza el proceso anterior iterativamente hasta alcanzar $t_{k+1} = T_f$.

La discretización del dominio espacio temporal D al aplicar el Método de Rothe multi-numérico se muestra en la Figura 3.1

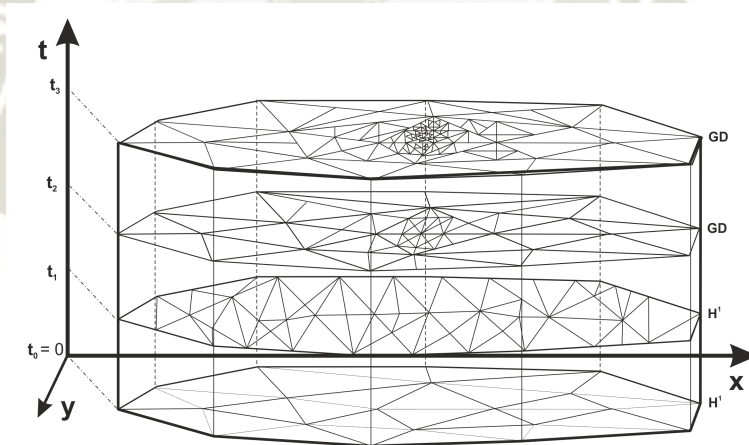


Figura 3.1: Dominio espacio temporal discretizado

3.2.1. Método del residuo ponderado en el dominio del espacio

Considerando el dominio de las variables en el espacio, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, se utilizarán los conocidos espacios de funciones sobre las variables en el espacio:

$$C^0(\Omega) = \{u : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} / u \text{ es una función continua sobre } \Omega\}$$

$$L^1(\Omega) = \{u : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} / \int_{\Omega} |u| \, d\Omega < \infty\}$$

$$L^2(\Omega) = \{u : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} \text{ medible} / \int_{\Omega} |u|^2 \, d\Omega < \infty\}$$

$$H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega) / D_s u \in L^2(\Omega), \forall s = 1, 2, \dots, d, \Omega \subset \mathbb{R}^d\}$$

$$H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) / u|_{\Gamma_\Omega} = 0\}.$$

Para completar el trabajo debe resolverse el ítem 4 de la última enumeración. Sin pérdida de generalidad se asume un tiempo discretizado con solución inicial conocida, denotado por \bar{t} . Observar que no se considera $\bar{t} = t_k$, para algún k , porque el tiempo \bar{t} puede ser también algún tiempo intermedio que depende del orden del método Runge-Kutta.

En este tiempo dado, las ecuaciones diferenciales obtenidas, vistas como estacionarias, pueden ser resueltas aplicando formulaciones débiles desde espacios de funciones continuas o discontinuas generadas a partir de un conjunto de funciones base polinómicas por partes sobre los elementos finitos de la malla $\mathcal{M}_h^{\bar{t}}$. Para aplicar se identifica el problema a ser resuelto:

Encontrar una función $u(\bar{t}, \mathbf{x}) = \tilde{u}^l(\mathbf{x}) \in L^2(\Omega)$ donde $\mathbf{x} \in \Omega$ tal que

$$\tilde{u}^l(\mathbf{x}) = \tilde{u}^0(\mathbf{x}) - \Delta t_k \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \nabla \cdot f(\tilde{u}^r)(\mathbf{x}), \quad l = 1, 2, \dots, L$$

Para resolver se aplica el método del residuo ponderado, véase la sección 2.4 de (Calle, 2002). El método del residuo ponderado utiliza dos espacios de funciones, que en la presente tesis son diferentes y además dependen del tiempo en el que se aplica. El primero es un espacio de funciones de aproximación definidas sobre Ω , $V^{\bar{t}}(\Omega) \subset L^2(\Omega)$, o simplemente $V^{\bar{t}} \subset L^2$, donde se buscará una solución aproximada a \tilde{u}^l , y el segundo es un espacio de funciones de prueba definidas sobre Ω , $W^{\bar{t}}(\Omega) \subset L^2(\Omega)$, o simplemente $W^{\bar{t}} \subset L^2$, que permitirá obtener una formulación débil.

Con el método del residuo ponderado se genera un sistema de ecuaciones lineales considerando sub-espacios finito dimensionales de $V^{\bar{t}}$ y $W^{\bar{t}}$. Se denotan por $V_h^{\bar{t}} \subset V^{\bar{t}}$ y $W_h^{\bar{t}} \subset W^{\bar{t}}$. Suponiendo que $V_h^{\bar{t}}$ es n -dimensional y $W_h^{\bar{t}}$ es m -dimensional, se escriben sus bases como

$$\beta_{V_h^{\bar{t}}} = \{\varphi_i : i = 0, 1, 2, \dots, (n-1)\} \text{ y } \beta_{W_h^{\bar{t}}} = \{\omega_j : j = 0, 1, 2, \dots, (m-1)\}.$$

Así el problema (discretizado) busca una función $\tilde{u}_h^l(\mathbf{x}) \in V_h^{\bar{t}}(\Omega)$, o simplemente $\tilde{u}_h^l \in V_h^{\bar{t}}$, tal que

$$\int_{\Omega} \tilde{u}_h^l \omega_j = \int_{\Omega} \tilde{u}_h^0 \omega_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_{\Omega} \nabla \cdot f(\tilde{u}_h^r) \omega_j \right) \quad (3.5)$$

donde $l = 1, 2, \dots, L$ y $j = 0, 1, 2, \dots, (m-1)$.

Considerando que el dominio espacial Ω está particionado en una malla $\mathcal{M}_h^{\bar{t}}$ de elementos finitos con dimensión igual a la dimensión de Ω , la ecuación (3.5) es válida sobre cada elemento finito. Y aplicando sobre todos los elementos finitos de la malla se tendrá sobre todo el dominio Ω . Entonces el problema puede ser escrito como:

Encontrar una función $\tilde{u}_h^l \in V_h^{\bar{t}}(\Omega)$ tal que

$$\int_E \tilde{u}_h^l \omega_j = \int_E \tilde{u}_h^0 \omega_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E \nabla \cdot f(\tilde{u}^r) \omega_j \right) \quad (3.6)$$

donde $l = 1, 2, \dots, L$, $j = 0, 1, 2, \dots, (m-1)$ y para todo elemento finito $E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}$.

Para escoger los espacios finito dimensionales se utiliza las ideas del método de elementos finitos. $V_h^{\bar{t}}$ es un espacio de funciones simples sobre el dominio, que pueden ser polinomios por partes sobre los elementos finitos. En esta tesis se consideran solo polinomios por partes que pueden ser continuos o discontinuos sobre el dominio Ω . Cuando se utiliza funciones continuas sobre el dominio Ω , se dice que se está utilizando un espacio de aproximación H^1 -conforme, y cuando se utiliza funciones discontinuas, se dice que se está utilizando un espacio de aproximación del tipo DG (Galerkin discontinuo).

Como ya es conocido en la literatura científica, considerar $V_h^{\bar{t}} = W_h^{\bar{t}}$ lleva a esquemas inestables, por lo tanto se asume $V_h^{\bar{t}} \neq W_h^{\bar{t}}$, como se mencionó anteriormente.

Siguiendo las ideas expuestas en (Calle, 2002), dado el espacio $V_h^{\bar{t}}$ de funciones aproximantes polinomiales por partes (existen muchas y diversas opciones), se construye el espacio de funciones test de la forma:

$$W_h^{\bar{t}} = \{\omega_j = \varphi_j + \delta \nabla \varphi_j \cdot \beta \mid \varphi_j \in \beta_{V_h^{\bar{t}}}\}$$

donde δ es un número real y β es un vector. En la literatura científica, existen diversas expresiones para determinar β . En el presente trabajo se usa la expresión expuesta en (Calle, 2002). Con el término $\nabla \varphi_j \cdot \beta$ se obtienen los términos de estabilización de los esquemas numéricos que funcionan para la resolución de leyes de conservación. δ es un real, llamado coeficiente de difusión, que permitirá utilizar poco o mucho del término de estabilización. Diversos esquemas de estabilización pueden encontrarse en (Henao, 2011). Se destaca el método Streamline Upwind - Petrov Galerkin (SUPG), el cual fue uno de los primeros esquemas estabilizados para las leyes de conservación.

Observar que con la construcción del espacio $W_h^{\bar{t}}$, la dimensión de los dos espacios

es igual y $\dim(W_h^{\bar{t}}) = \dim(V_h^{\bar{t}}) = n$. Así $m = n$.

Para explicar de forma simple la obtención del término de estabilización, se sustituye las funciones base de $W_h^{\bar{t}}$ en la ecuación 3.6. Por lo tanto, la ecuación toma la forma:

$$\begin{aligned} \int_E \tilde{u}^l [\varphi_j + \delta \nabla \varphi_j \cdot \beta] &= \int_E \tilde{u}^0 [\varphi_j + \delta \nabla \varphi_j \cdot \beta] \\ &- \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E \nabla \cdot f(\tilde{u}^r) [\varphi_j + \delta \nabla \varphi_j \cdot \beta] \right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

donde $l = 1, 2, \dots, L$, $j = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ y para todo elemento finito $E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}$.

Esquemas como los obtenidos a partir de la ecuación (3.7) son llamados de explícitos, donde la solución buscada \tilde{u}^l es encontrada directamente desde los valores de las soluciones conocidas en tiempos anteriores, $\tilde{u}^0, \tilde{u}^1, \dots, \tilde{u}^{l-1}$. En la literatura científica es conocido que los esquemas son mas estables si ellos son implícitos o semi-implícitos. Esto significa que en las ecuaciones obtenidas es mejor, siempre que sea posible, sustituir soluciones conocidas en tiempos anteriores por la solución desconocida \tilde{u}^l . Debe realizarse con cuidado, verificando que el sistema de ecuaciones lineales tenga solución. En la presente tesis, se manipula la ecuación 3.7 a fin de obtener un esquema semi-implícito. A continuación se describe el proceso considerando para todas las próximas ecuaciones $l = 1, 2, \dots, L$, $j = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ y para todo elemento finito $E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}$:

$$\begin{aligned} \int_E \tilde{u}^l \varphi_j + \delta \int_E \tilde{u}^l \nabla \varphi_j \cdot \beta &= \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j + \delta \int_E \tilde{u}^0 \nabla \varphi_j \cdot \beta \\ &- \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_E \nabla \cdot f(\tilde{u}^r) \varphi_j + \delta \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \nabla \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Si en la cuarta integral sustituimos \tilde{u}^0 por \tilde{u}^l , con la idea de hacer el esquema menos explícito, entonces la segunda y la cuarta integral son iguales, y así se cancelan. Y si además se aplica el Teorema de Green en la quinta integral se obtiene la siguiente ecuación simplificada:

$$\begin{aligned} \int_E \tilde{u}^l \varphi_j &= \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \delta \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \nabla \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde Γ_E es la frontera del elemento E y η representa la normal unitaria exterior de

esta frontera.

La última integral contiene el divergente de la función flujo de la ley de conservación, y este se puede representar utilizando el jacobiano de estas funciones flujo. Luego:

$$\begin{aligned} \int_E \tilde{u}^l \varphi_j = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right. \right. \\ \left. \left. + \delta \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \tilde{u}^r}{\partial x_s} \right) \right] \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

En la ecuación (3.10), no se pretende sustituir las soluciones conocidas en la tercera y cuarta integral, porque se necesitará calcular el valor de las funciones flujo sobre soluciones conocidas. Sin embargo en la última integral, dentro de la sumatoria se tiene dos situaciones. La primera solución \tilde{u}^r tampoco se puede sustituir porque se debe calcular las componentes del jacobiano $f'_s(\tilde{u}^r)$, sin embargo en la $\partial_s \tilde{u}^r$ si se puede sustituir esas soluciones conocidas por la solución buscada \tilde{u}^l . Así se tiene un esquema semi-implícito:

$$\begin{aligned} \int_E \tilde{u}^l \varphi_j = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right. \right. \\ \left. \left. + \delta \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \tilde{u}^l}{\partial x_s} \right) \right] \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Como los últimos sumandos también dependen de \tilde{u}^l , son pasados al primer miembro:

$$\begin{aligned} \int_E \tilde{u}^l \varphi_j + \Delta t_k \delta \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \tilde{u}^l}{\partial x_s} \right) = \\ \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Como el espacio $V_h^{\bar{t}}$ es de dimensión finita y $\tilde{u}^l(\mathbf{x}) \in V_h^{\bar{t}}$, se escribe

$$\tilde{u}^l = \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{u}_i^l \varphi_i.$$

Entonces la ecuación 3.12 se expresa como

$$\sum_{i=0}^{n-1} \tilde{u}_i^l \left[\int_E \varphi_i \varphi_j + \Delta t_k \delta \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_s} \right) \right] = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right) \quad (3.13)$$

donde $l = 1, 2, \dots, L$, $i = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$, $j = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ y para todo elemento finito $E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}$ siendo Γ_E la frontera del elemento E y η representa la normal unitaria exterior de esta frontera.

En las próximas secciones se estudian dos espacios de funciones $V_h^{\bar{t}}$.

3.2.2. Formulación débil con funciones continuas

Se determina en esta sección el primer espacio de funciones de aproximación, en el tiempo \bar{t} . Y el espacio es referenciado como el espacio de funciones continuas de aproximación.

$$V_h^{\bar{t}} = \{u \in C^0(\bar{\Omega})/u|_E \in \mathcal{P}_p(E), \quad \forall E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}\}$$

donde $\mathcal{P}_p(E)$ es el espacio de polinomios de grado hasta p , definido sobre el elemento E , y $\mathcal{M}_h^{\bar{t}}$ es la malla que particiona Ω . Observar que las funciones son continuamente diferenciables en el interior de cada elemento finito, pero en las fronteras de los elementos finitos son continuas y pueden no tener derivada, sin embargo todas tienen derivada débil. Por lo tanto: $V_h^{\bar{t}} \subset H_0^1$.

Como las funciones son continuas sobre todo el dominio, entonces considerando la ecuación (3.13) se tiene que la integral sobre las fronteras de los elementos E , que están en el interior del dominio Ω , son nulas. Apenas puede no ser nula sobre la frontera de algunos elementos que también son frontera del dominio Γ_Ω , (puede existir condiciones de Dirichlet o Neumann), donde el valor debe coincidir con la condición frontera $\bar{u}(\bar{t})$, vea ecuación (2.4). Por simplicidad, también se considera los valores de la condición frontera nula.

Formulación débil utilizando funciones continuas

Así el problema consiste en buscar una función $\tilde{u}_h^l \in V_h^{\bar{t}}(\Omega)$, tal que

$$\sum_{i=0}^{n-1} \tilde{u}_i^l \left[\int_E \varphi_i \varphi_j + \Delta t_k \delta \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_s} \right) \right] = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j + \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right) \quad (3.14)$$

donde $l = 1, 2, \dots, L$, $i = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$, $j = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ y para todo elemento finito $E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}$.

En la ecuación (3.14), se tiene expresamente la representación de las entradas de las matrices del sistema lineal $K[u_i^l] = F$, donde

$$k_{ij} = \int_E \varphi_i \varphi_j + \Delta t_k \delta \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_s} \right)$$

y

$$f_i = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j + \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right).$$

Un sistema de ecuaciones lineales que hay que resolver por métodos directos o iterativos y se obtendrá la solución buscada \tilde{u}^l .

3.2.3. Formulación débil con funciones discontinuas

Se considera, en esta sección, un espacio de funciones de aproximación que son discontinuas sobre el dominio pero continuas sobre cada elemento. Realmente, las funciones discontinuas en el dominio del espacio de funciones de aproximación, son polinomios por partes sobre los elementos sin la exigencia de continuidad en las interfaces de los elementos. Esto significa que como las funciones son polinómios sobre cada elemento finito, ellas son continuas apenas en el interior de cada elemento. Estas funciones no tienen restricción de continuidad entre los elementos finitos, por lo tanto, se permite discontinuidades en la interface de los elementos.

En este contexto, el espacio de funciones de aproximación se define como:

$$V_h^{\bar{t}} = \{u \in L^2(\Omega) / u|_E \in \mathcal{P}_p(E), \forall E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}\}$$

donde $\mathcal{P}_p(E)$ es el espacio de polinomios de grado hasta p , definido sobre el elemento E , y $\mathcal{M}_h^{\bar{t}}$ es una partición de Ω en el tiempo \bar{t} .

Este espacio de funciones no es conforme y es conocido como un espacio "broken" (quebrado) de funciones discontinuas.

Formulación débil utilizando funciones discontinuas

En este caso el problema consiste en buscar una función $\tilde{u}_h^l \in V_h^{\bar{t}}(\Omega)$, tal que

$$\sum_{i=0}^{n-1} \tilde{u}_i^l \left[\int_E \varphi_i \varphi_j + \Delta t_k \delta \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_s} \right) \right] = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right) \quad (3.15)$$

donde $l = 1, 2, \dots, L$, $i = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$, $j = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$ y para todo elemento finito $E \in \mathcal{M}_h^{\bar{t}}$ siendo Γ_E la frontera del elemento E y η representa la normal unitaria exterior de esta frontera.

En la ecuación (3.15), se tiene expresamente la representación de las entradas de las matrices del sistema lineal $K[u_i^l] = F$, donde

$$k_{ij} = \int_E \varphi_i \varphi_j + \Delta t_k \delta \sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \int_E (\nabla \varphi_j \cdot \beta) \left(\sum_{s=1}^d f'_s(\tilde{u}^r) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_s} \right)$$

y

$$f_i = \int_E \tilde{u}^0 \varphi_j - \Delta t_k \left(\sum_{r=0}^{l-1} c_{lr} \left[\int_{\Gamma_E} \varphi_j f(\tilde{u}^r) \cdot \eta - \int_E \nabla \varphi_j \cdot f(\tilde{u}^r) \right] \right).$$

El sistema de ecuaciones lineales se debe resolver por métodos directos o iterativos para obtener la solución buscada \tilde{u}^l .

Sea $\mathbf{x} \in \Gamma_E$. Si el punto \mathbf{x} está sobre la interface entre un elemento E y algún elemento finito vecino o conectado F , $\mathbf{x} \in \Gamma_F$, entonces el valor de la función flujo para la variable \tilde{u}^r no está bien definida, porque cuando se calcula a partir del elemento E se puede tener un valor numérico muy diferente que cuando se calcula a partir del elemento vecino o conectado F . Computacionalmente, se ha resuelto el problema considerando el cálculo de todas las integrales sobre cada elemento finito primero, calculando sus contribuciones, y posteriormente calculando las integrales sobre cada interface entre elementos y se incrementa una única contribución (un valor igual) para los elementos

vecinos en los puntos comunes.

Por otro lado, el cálculo de la integral sobre las interfaces debe considerar los valores de la función flujo por la derecha y por la izquierda. Para obtener un único valor se utiliza el llamado "Flujo Numérico", esquemas numéricos muy trabajados en el método de diferencias finitas y bastante estables. Existen muchos flujos numéricos definidos en la literatura científica, de orden bajo y alto de aproximación. Infelizmente los de orden alto de aproximación (mismo los de segundo orden) pueden generar oscilaciones, por lo que se ha optado por el esquema del Flujo Numérico de Lax-Friedrichs, muy estable y de gran uso incluso en aplicaciones prácticas.

Flujo numérico

Es importante estar consciente que las interfaces pueden darse en el interior del dominio Ω (por lo tanto entre dos elementos finitos), o ser una interface en la frontera del dominio Γ_Ω . Por las características del espacio $V_h^{\bar{t}}$, se definen los siguientes valores límites próximo a cualquier punto en la frontera $\mathbf{x} \in \Gamma_E$, donde E es un elemento finito de la malla $\mathcal{M}_h^{\bar{t}}$.

El primer valor es el valor obtenido desde el interior del elemento finito E , denotado por

$$\tilde{u}_-^r(\mathbf{x}) = \lim_{s \rightarrow 0^-} \tilde{u}^r(\mathbf{x} + s\eta) \quad (3.16)$$

El segundo valor es denotado por

$$\tilde{u}_+^r(\mathbf{x}) = \begin{cases} \gamma_h(\mathbf{x}, \bar{t}), & \mathbf{x} \in \Gamma_\Omega \\ \lim_{s \rightarrow 0^+} \tilde{u}^r(\mathbf{x} + s\eta), & \mathbf{x} \notin \Gamma_\Omega \end{cases} \quad (3.17)$$

donde γ_h es la condición frontera discretizada dada sobre la frontera del dominio Γ_Ω . Entonces, se destaca que para el segundo valor se calcula usando las condiciones frontera del problema cuando se está sobre un punto $\mathbf{x} \in \Gamma_E$ y $\mathbf{x} \in \Gamma_\Omega$, y si $\mathbf{x} \notin \Gamma_\Omega$ se calcula utilizando los valores de \tilde{u}^r desde un elemento vecino F tal que $\mathbf{x} \in \Gamma_F$.

Aquí se utiliza la idea de sustituir la función $f(\tilde{u}^r) \cdot \eta$ en la integral sobre la frontera Γ_E en la ecuación (3.15) por una función llamada "flujo numérico", denotada por \mathbf{F}_{Γ_E} . Esta función se aplica en los puntos sobre la frontera de los elementos finitos y

dependerá de los dos valores límites definidos en las ecuaciones (3.16) y (3.17). Se tiene:

$$f(\tilde{u}^r(\mathbf{x}, \bar{t})) \cdot \eta \simeq \mathbf{F}_{\Gamma_E}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}_{\Gamma_E}(\tilde{u}_-^r(\mathbf{x}), \tilde{u}_+^r(\mathbf{x})). \quad (3.18)$$

Se destacan las propiedades que un flujo numérico satisface:

1. debe ser una función Lipschitz en sus dos argumentos;
2. debe ser monótona cuando es un caso escalar y debe ser un solver de Riemann exacto o aproximado cuando es un caso de sistemas;
3. debe ser consistente con $f(\tilde{u}^r) \cdot \eta$, es decir: $\mathbf{F}_{\Gamma_E}(u, u) = f(u) \cdot \eta$;
4. debe ser conservativa, es decir: si E y F son elementos vecinos con frontera común, entonces

$$\mathbf{F}_{\Gamma_E}(\tilde{u}_-^r(\mathbf{x}), \tilde{u}_+^r(\mathbf{x})) + \mathbf{F}_{\Gamma_F}(\tilde{u}_-^r(\mathbf{x}), \tilde{u}_+^r(\mathbf{x})) = 0. \quad (3.19)$$

En la literatura científica está bastante documentado que cuando se utiliza un flujo numérico de orden alto en las regiones de singularidad o próximo de ellas, como el conocido flujo numérico de Lax-Wendroff, el esquema pierde estabilidad. Esto sucede porque se generan oscilaciones en el interior de los elementos. Por lo tanto, es recomendable utilizar flujos numéricos de orden uno, que aunque es menos aproximado pero es bien estable. Por esta razón se utiliza en la presente tesis el flujo numérico de Lax-Friedrichs (como comentado anteriormente).

Flujo numérico de Lax Friedrichs

$$\mathbf{F}(u, v) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\alpha}(u - v) + \mathbf{f}(u) + \mathbf{f}(v) \right] \quad (3.20)$$

donde $\alpha = \max_{\min(u,v) \leq s \leq \max(u,v)} |\mathbf{f}'(s)|$

3.2.4. Costo computacional en el dominio espacial

Se sabe que el número de grados de libertad del método Galerkin discontinuo es mucho mayor que del método H^1 -conforme. Por lo tanto, el tiempo de ensamblaje de las matrices y de resolución del sistema, para el método de Galerkin discontinuo es mayor.

Para dejar el estudio completo, se utiliza el problema del cono rotando sobre dos mallas fijas, la primera para $h = 0.3125$ y la segunda para $h = 0.15625$ sobre el dominio $\Omega = [-5, 5] \times [-5, 5] \subset \mathbf{R}^2$. Se utilizó el intervalo de tiempo $[0.0, 0.25]$ para todas las simulaciones numéricas. El tiempo de ejecución de las simulaciones fue medido en **clock ticks**.

En un computador, la central de procesamiento (CPU) funciona en alguna frecuencia, y el período de esta frecuencia se llama clock tick. Es la unidad de tiempo más pequeña reconocida por el dispositivo. Como ese parámetro depende del dispositivo utilizado, las mediciones se realizaron en el mismo computador y de forma exclusiva (ningún otro proceso fue llamado por el usuario durante las simulaciones realizadas). Sin embargo, se sabe que en el computador siempre están funcionando diversos procesos independiente del conocimiento del usuario (actualizaciones, chequeos de memoria, etc). Esto significa que la simulación realizada no es la única tarea del procesador, entonces se ha realizado 5 simulaciones para cada caso y se ha calculado la media aritmética como la medida de la simulación en cada una de las mallas. Los resultados son presentados en los Cuadros (3.2) y (3.3). Observar que no estamos interesados en el tiempo que demoró la simulación sino en la medida del procesamiento.

Para estas simulaciones se ha utilizado el parámetro $CFL = 0.1$ y el coeficiente de difusión para el término de difusión implícita $\delta = 0.3$. Se ha utilizado en ambos métodos el grado polinómico $p = 2$ para la construcción de los espacios de aproximación polinómicos por partes.

Cuadro 3.2: Costo computacional de los métodos. $h = 0.3125$

Ejecución	GD con difusividad implícita	H^1 con difusividad implícita
Primera	251516546	63989726
Segunda	250657676	63483645
Tercera	254193797	64097598
Cuarta	255831252	63986529
Quinta	255211065	62840214
Media	253482067.2	63679542.4

De el Cuadro (3.2) se observa que el tiempo de ejecución del método H^1 con difusividad implícita es aproximadamente el 25 % del tiempo de ejecución del GD con difusividad implícita.

De el Cuadro (3.3) se observa que el tiempo de ejecución del método H^1 con difusividad implícita es aproximadamente el 17 % del tiempo de ejecución del GD con

Cuadro 3.3: Costo computacional de los métodos. $h = 0,15625$

Ejecución	GD con difusividad implícita	H^1 con difusividad implícita
Primera	7964351873	1352611518
Segunda	7992368257	1351143809
Tercera	8290352030	1365905077
Cuarta	8160133550	1365778666
Quinta	8326459332	1364096873
Media	8146733008.4	1359907188.6

difusividad implícita. Es natural que la diferencia del costo computacional crezca aún mas por el tamaño mayor del sistema para el caso del método Galerkin discontinuo con difusividad implícita sobre una misma malla de elementos finitos.

En el método propuesto, la primera opción para utilizar en la discretización espacial será el método H^1 con difusividad implícita. Teniendo la herramienta computacional que permite recuperar el gradiente de la solución aproximada en un tiempo determinado, entonces verificamos con ella si existe gradientes altos que indicarían el probable aparecimiento de una singularidad. Aunque no haya el surgimiento de una singularidad, indicaría la presencia de una variación alta de la variable en estudio, por lo tanto, aplicamos reducción del orden p y/o refinamiento h para evitar oscilaciones espurias. También es una buena posibilidad de cambiar el método H^1 por el método GD para la aproximación espacial en el próximo paso de tiempo. Así el método es multinumérico, permitiendo el uso de diferentes espacios de aproximación en cada paso de tiempo.

Capítulo 4

Ambiente Computacional NeoPZ

El NeoPZ es un ambiente de computación científica orientada a objetos, que posibilita implementar algoritmos en elementos finitos utilizando espacios de funciones aproximantes de diversas posibilidades, tanto funciones escalares como vectoriales, y las bases para estos espacios de aproximación de orden superior para escalares y vectoriales están implementadas de forma jerárquica. Es una biblioteca de propósito general de código abierto (libre) para la investigación científica y aplicaciones en problemas de la ciencia e ingeniería, para mayores detalles ver el sitio <https://github.com/labmec/neopz>. Además realiza simulaciones con características multifísicas y multiescala, y aplica técnicas *hp*-adaptativas para obtener eficientes computaciones numéricas (Calle, Devloo, y Gomes, 2015).

El NeoPZ está en continua evolución, hasta el año 2000 ya consideraba herramientas para realizar *hp*-adaptatividad con espacios de funciones continuas. En la década siguiente hasta el año 2010 incrementó espacios de aproximación de funciones continuas, posibilitando aplicar el método de Galerkin discontinuo, e incrementó patrones de refinamiento que podían ser definidas por el usuario. En el año 2012 ya incorporó espacios de aproximación Hdiv y el año 2013 espacios multifísicos. Por último, a partir del año 2017 está consolidando herramientas para tener la propiedad de ser multiescala.

El ambiente científico NeoPZ, en lenguaje orientado a objetos C++, ha sido desarrollado bajo la coordinación del Dr. Philippe Devloo, en el Laboratorio de Mecánica Computacional (Labmec) de la Universidad Estadual de Campinas Brasil. Entre sus principales características del ambiente científico destaca ser modular, multifísico y multiescala (Devloo, 2000).

El ambiente NeoPZ está organizada en módulos independientes entre sí, los cuales posibilitan desarrollar diversos algoritmos en elementos finitos para resolver numéricamente problemas descritos en ecuaciones diferenciales parciales. El esquema modular del ambiente computacional NeoPZ se presenta en la Figura 4.1

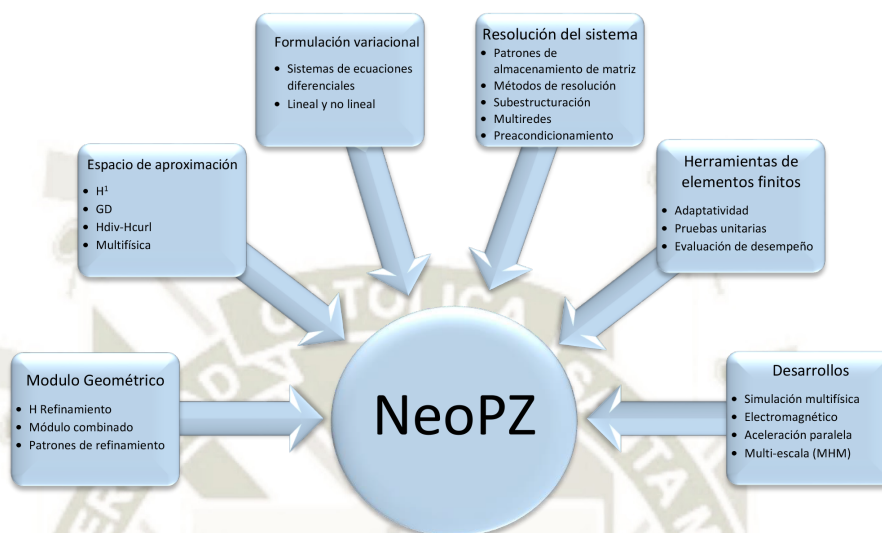


Figura 4.1: Forma modular del NeoPZ

4.1. Módulo topológico

En el NeoPZ, la fundamentación matemática es vital, así para la construcción de la geometría se inicia definiendo su topología. En este primer módulo se llaman elementos de referencia abiertos, cero, uni, bi y tri-dimensionales, a las figuras geométricas mostradas en la Figura 4.2.

A partir de los elementos de referencia abiertos se construyen todos los elementos de referencia cerrados que serán necesarios para definir la geometría.

4.2. Elementos de referencia geométricos

El NeoPZ tiene implementados los elementos de referencia geométricos para cero, uno, dos y tres dimensiones. El elemento de referencia cero dimensional es $\{0\}$. El elemento de referencia unidimensional es el intervalo $[-1, 1]$. Existen dos elementos de referencia bidimensionales: triángulos y cuadriláteros. Y existen cuatro elementos de referencia tridimensionales: hexaedro, tetraedro, pirámide y prisma.

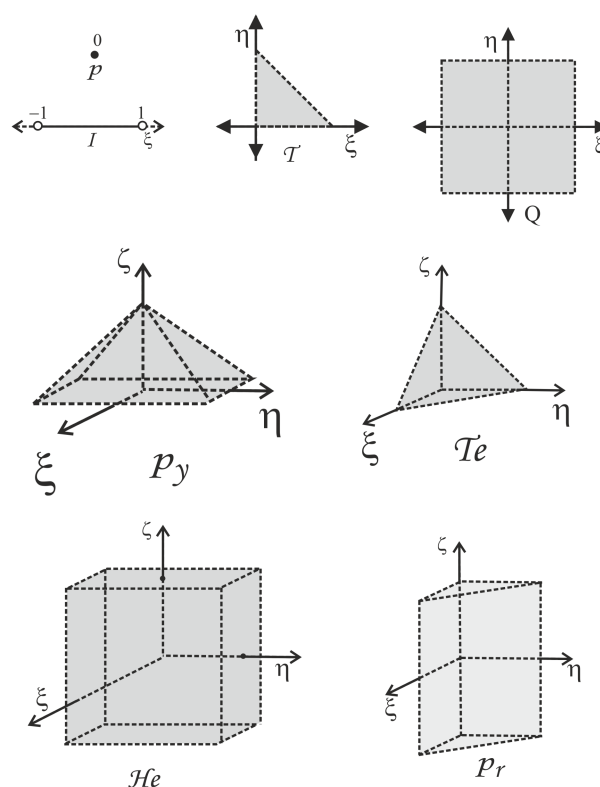


Figura 4.2: Elementos de referencia abiertos cero, uni, bi y tri-dimensionales del NeoPZ

Un elemento de referencia cerrado o simplemente elemento de referencia es una partición de un conjunto de lados y cada uno de sus lados es una transformación afín de un elemento de referencia abierto de dimensión igual o menor. Como un ejemplo, en la Figura 4.3 se muestra la construcción del elemento cuadrilátero desde los conjuntos abiertos que corresponden a las dimensiones cero, uno y dos.

Observar que el elemento cuadrilátero cerrado es una partición de sus lados, considerándose como lado a la imagen de cada transformación desde un elemento de referencia abierto.

En la Figura 4.4 se presentan todos los elementos de referencia mencionados, con sus lados correspondientes y sus orientaciones adecuadas que serán necesarias para una correcta integración numérica entre los elementos vecinos (Calle y cols., 2015).

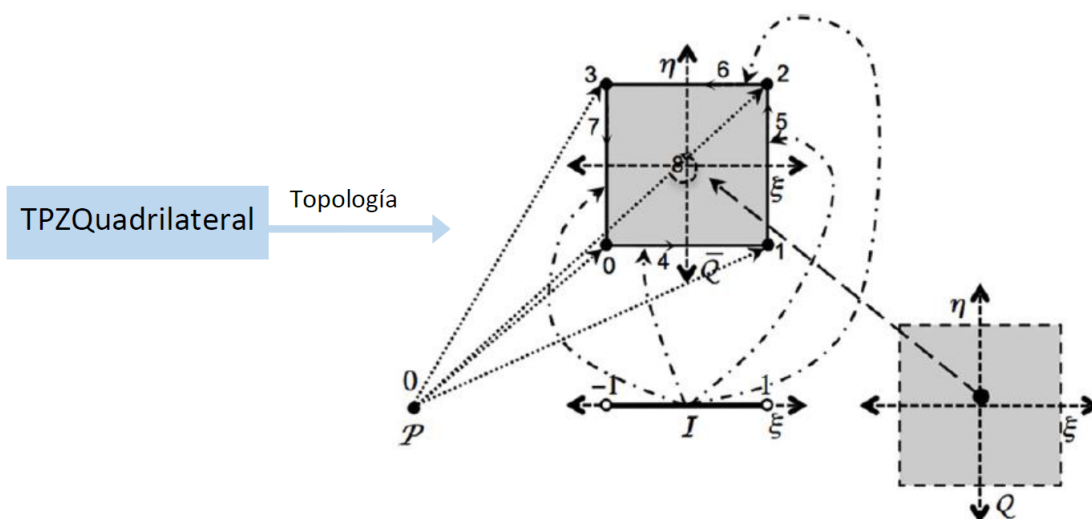


Figura 4.3: Transformaciones desde los elementos de referencia abiertos (topología) sobre el elemento cuadrilátero cerrado

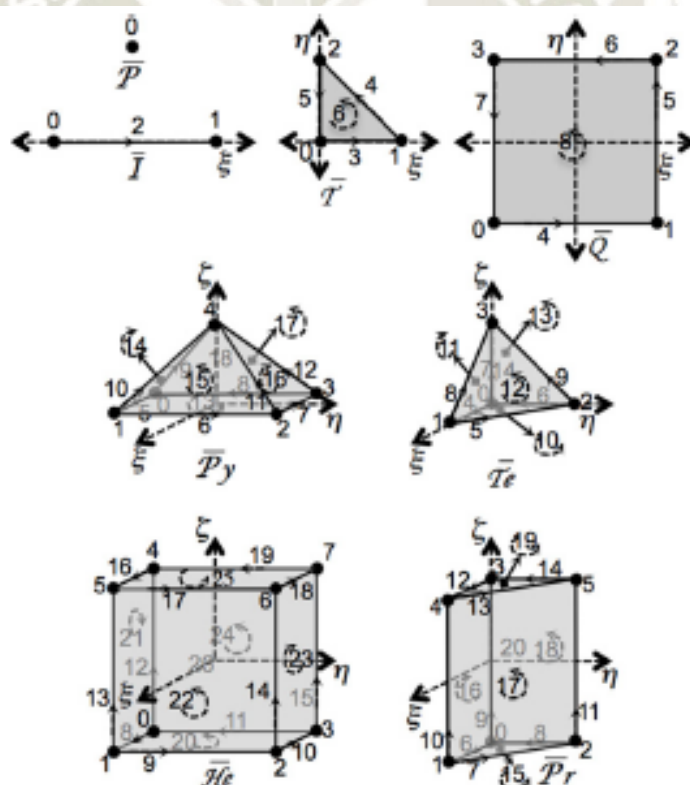


Figura 4.4: Elementos de referencia cero, uni, bi y tri-dimensionales

4.3. Relación entre la topología y la geometría

Para construir un elemento de referencia cerrado usamos conjuntos abiertos y a partir de este elemento cerrado se construye todas las transformaciones biyectivas a los elementos geométricos de la malla. Y como ese elemento cerrado viene de conjun-

tos abiertos, entonces el elemento geométrico se puede considerar como una partición generada por las imágenes de los lados de los elementos de referencia. Los módulos topología y geometría se relacionan como en la Figura 4.5

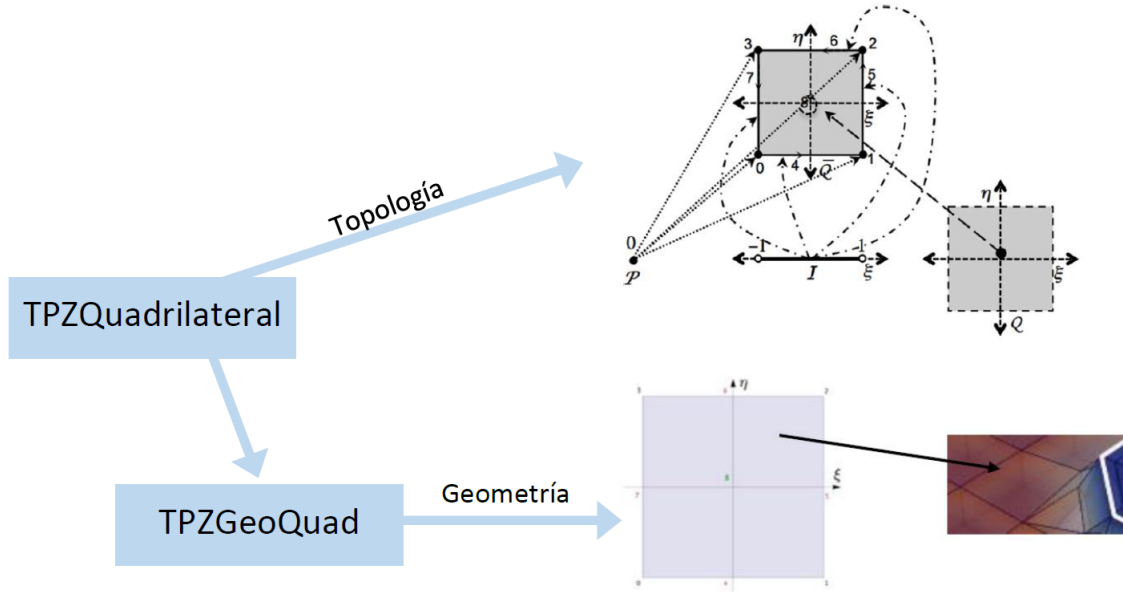


Figura 4.5: Relación entre la topología y la geometría del elemento de referencia cuadrilátero

4.4. Malla Geométrica

Un **elemento geométrico** en \mathbb{R}^d , donde d puede ser 1, 2 o 3, es un conjunto no vacío $E \subset \mathbb{R}^d$, y es construido por una transformación biyectiva y diferenciable desde un elemento de referencia cerrado. Como los elementos de referencia cerrados son construidos vía transformaciones afín desde los elementos de referencia abiertos, entonces un elemento geométrico se puede considerar como una partición de lados disjuntos.

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un dominio. Un conjunto finito con $N_{\mathcal{M}}$ elementos geométricos

$$\mathcal{M} = \{E_i \subset \mathbb{R}^d / E_i \cap \Omega \neq \emptyset, i = 0, 1, 2, \dots, N_{\mathcal{M}} - 1\}$$

se llama **malla geométrica** de Ω , si $\Omega \subset \bigcup_{i=0}^{N_{\mathcal{M}}-1} E_i$.

Si Ω es un dominio rectangular en el plano, en la Figura 4.6 se muestra un ejemplo de una malla geométrica \mathcal{M} de Ω con dos elementos E y F .

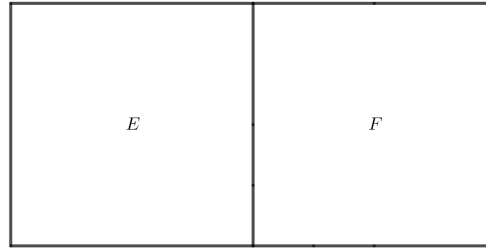


Figura 4.6: Malla geométrica $\mathcal{M} = \{E, F\}$

4.5. Refinamiento de una malla geométrica

Se dice que un elemento geométrico $E \subset \mathbb{R}^d$ es h -refinado en N_E elementos geométricos E_i , $i = 0, 1, 2, \dots, N_E - 1$, si:

- $\dim(E_i) = \dim(E)$, $\forall i = 0, 1, 2, \dots, N_E - 1$
- El conjunto formado por los lados de $E_0, E_1, E_2, \dots, E_{N_E-1}$ es una partición de E .

En este caso decimos que E es un elemento padre y los E_i son subelementos de E .

Un lado que es un subconjunto propio de otro lado de un elemento conectado se llama **lado colgante**. En NeoPZ hay dos conceptos muy importantes, el de vecindad y el de conectividad, que consiguen determinar correctamente cuando tenemos lados colgantes. Para mayores informes ver (Calle y cols., 2015).

Al aplicar el h -refinamiento a los elementos de una malla geométrica \mathcal{M} , los subelementos son insertados en la malla, generando una malla enriquecida \mathcal{M}_r , tal que $\mathcal{M} \subset \mathcal{M}_r$.

Se puede construir una malla más fina \mathcal{M}^c de \mathcal{M}_r eliminando de \mathcal{M}_r los elementos padre que fueron h -refinados. Después de un h -refinamiento, también es posible engrosar la malla \mathcal{M}^c recuperando un elemento padre y todos sus subelementos.

Para ilustrar el concepto de h -refinamiento, se considera la secuencia de mallas refinadas a partir de la malla $\mathcal{M} = \{E, F\}$, como se muestra en la Figura 4.7. En la Figura 4.7, haciendo h -refinamiento sobre el elemento geométrico F y después sobre el subelemento F_0 , se obtiene la malla más fina

$$\mathcal{M}^c = \{E, F_{00}, F_{01}, F_{02}, F_{03}, F_1, F_2, F_3\}$$

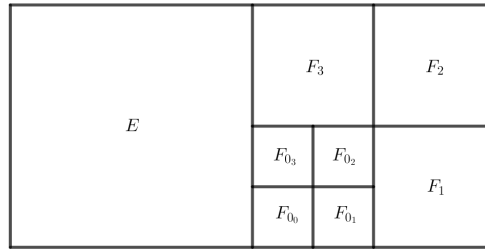


Figura 4.7: Malla geométrica con lados colgantes desde los elementos subdivididos de F

Una malla \mathcal{M}^c que contiene algún lado colgante se llama **malla geométrica no conforme**. Por ejemplo, la malla geométrica mostrada en la Figura 4.7 es no conforme, porque el lado izquierdo del elemento F_{03} es un lado colgante, el cual es un subconjunto propio del lado derecho del elemento E .

En la Figura 4.8 se muestra un ejemplo de h -refinamiento de una malla geométrica elaborado con NeopZ al resolver un problema de Poisson cuya solución es una función con alto gradiente en la circunferencia de radio $r = \frac{1}{2}$ (Calle y cols., 2015).

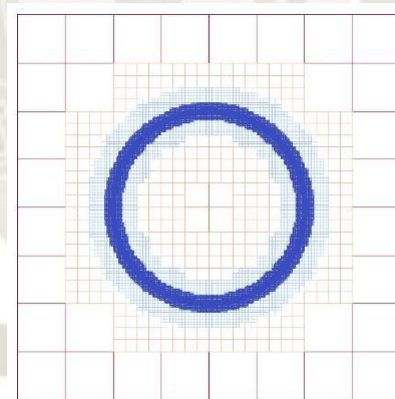


Figura 4.8: h -Refinamiento de una malla geométrica para el problema de Poisson mencionado

4.6. Módulo del espacio de aproximación

Al aplicar el método de elementos finitos, formamos un espacio de funciones de aproximación polinómicas sobre cada elemento geométrico de la malla \mathcal{M} . Este espacio de aproximación se caracteriza por la continuidad de las funciones a través de interfaces de los elementos. Se define como **elemento finito de orden p** , al elemento geométrico $E \in \mathcal{M}$ provisto de un conjunto linealmente independiente de polinomios

definidos sobre E de grado hasta p , donde cada polinomio es asociado a un único lado de E sobre el cual es diferente de cero. Estos polinomios definidos sobre E se llaman funciones de forma. Como cada elemento E es una transformación biyectiva de un elemento de referencia, entonces las funciones de forma son definidas básicamente sobre cada elemento de referencia y posteriormente transformado de forma continua sobre el elemento E . A partir de estas funciones de forma definidas sobre cada elemento geométrico $E \in \mathcal{M}$, se define un espacio finito dimensional de funciones polinómicas por partes y continuas.

4.6.1. Funciones de forma en el elemento de referencia

Para la construcción de funciones de forma jerárquicas se utiliza los polinomios de Chebyshev definido por

$$P_n(x) = \cos(n \arccos(x)) \quad \text{para } n \geq 0$$

que satisface la fórmula de recurrencia:

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_n(x) = 2xP_{n-1} - P_{n-2} \quad \text{para } n \geq 2$$

Funciones de forma sobre el elemento unidimensional

En el elemento de referencia $[-1, 1]$, las funciones de forma lineales asociadas al extremo izquierdo y derecho, están definidas por:

$$\hat{\varphi}_0(\xi) = \frac{1 - \xi}{2} \quad \text{y} \quad \hat{\varphi}_1(\xi) = \frac{1 + \xi}{2}$$

respectivamente. Mientras que las funciones de forma asociadas a la arista a que une los extremos del elemento, son definidas por:

$$\hat{\varphi}_n^a(\xi) = \frac{(1 - \xi)}{2} \frac{(1 + \xi)}{2} P_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \dots, p - 2$$

donde p es el orden de interpolación del elemento.

La gráfica de las funciones de forma asociadas a los extremos del elemento de referencia $[-1, 1]$ se muestra en la Figura 4.9.

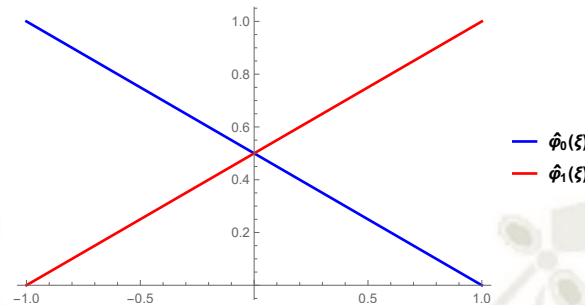


Figura 4.9: Funciones de forma asociadas a los extremos

En la Figura 4.10 se presenta la gráfica de los polinomios de Chebyshev P_n para $p = 4$, esto es $n = 0, 1, 2$.

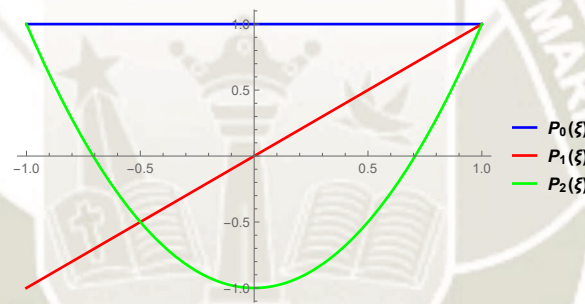


Figura 4.10: Polinomios de Chebyshev para $n = 0, 1, 2$

Por último, en la Figura 4.11 se presenta las gráficas de las funciones de forma $\hat{\varphi}_n^a(\xi)$ asociada a la arista a que une los extremos del elemento de referencia $[-1, 1]$ para $n = 0, 1, 2$.

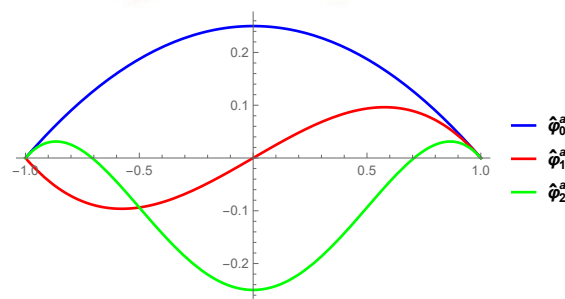


Figura 4.11: Funciones de forma asociada a la arista a para $n = 0, 1, 2$

Funciones de forma sobre el elemento cuadrilátero

Sea \hat{E} el elemento de referencia cuadrilátero con vértices en $v_0 = (-1, -1)$, $v_1 = (1, -1)$, $v_2 = (1, 1)$ y $v_3 = (-1, 1)$. Las funciones de forma asociadas a cada uno de estos vértices están definidas por:

$$\hat{\varphi}_0^{v_0}(\xi, \eta) = \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2}, \quad \hat{\varphi}_1^{v_1}(\xi, \eta) = \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2}$$

$$\hat{\varphi}_2^{v_2}(\xi, \eta) = \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2}, \quad \hat{\varphi}_3^{v_3}(\xi, \eta) = \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2}$$

La gráfica de la función de forma $\hat{\varphi}_0^{v_0}(\xi, \eta)$ se muestra en la Figura 4.12. Estas funciones

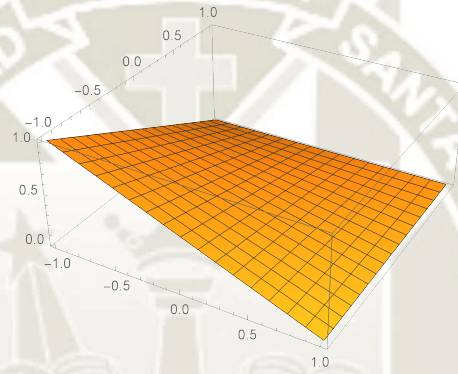


Figura 4.12: Función de forma asociada al vértice $v_0 = (-1, -1)$

de forma tienen la siguiente propiedad: $\hat{\varphi}_i^{v_j}(v_j) = 1$ para $i = j$ y $\hat{\varphi}_i^{v_j}(v_j) = 0$ para $i \neq j$. Son funciones lineales en las aristas. Se anulan en las aristas que no comparten el vértice v_j y no se anulan en el interior del elemento.

Si la arista que une dos vértices consecutivos v_j y v_{j+1} es denotado por a_j , $j = 0, 1, 2, 3$, entonces las funciones de forma asociadas a cada arista están definidas por:

$$\hat{\varphi}_n^{a_0}(\xi, \eta) = \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2} \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2} P_n(\xi)$$

$$\hat{\varphi}_n^{a_1}(\xi, \eta) = \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2} \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2} P_n(\eta)$$

$$\hat{\varphi}_n^{a_2}(\xi, \eta) = \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2} \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2} P_n(-\xi)$$

$$\hat{\varphi}_n^{a_3}(\xi, \eta) = \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2} \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2} P_n(-\eta)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots, p-2$. Aquí el polinomio de Chebyshev P_n se extiende a dos dimensiones variando en una variable según el dominio adecuado.

En la Figura 4.13 se presenta la gráfica de la primera función de forma $\hat{\varphi}_n^{a_0}(\xi, \eta)$ para $n = 0$ y $n = 1$.

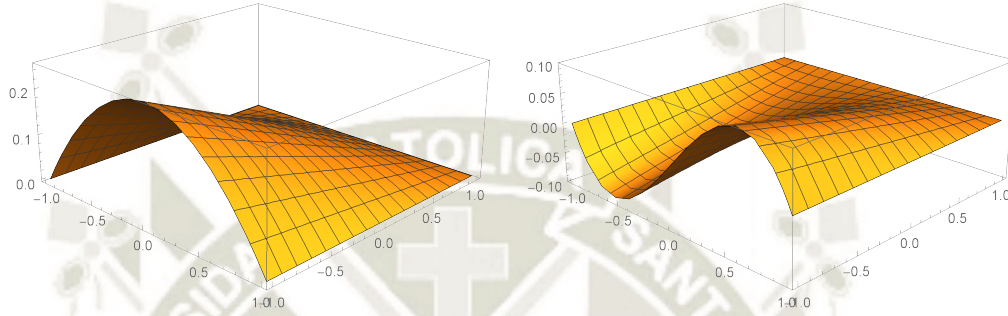


Figura 4.13: Funciones de forma asociada a la arista a_0

Estas funciones de forma se caracterizan por las siguientes propiedades: Se anulan en todos los vértices y cada función $\hat{\varphi}_n^{a_j}$ restringida a la arista a_i es cero para $i \neq j$, y cada función $\hat{\varphi}_n^{a_j}$ restringida a la arista a_j es un polinomio no nulo en $\mathcal{P}_{n+2}(a_j)$, con $n = 0, 1, 2, \dots, p-2$.

Las funciones de forma asociada a la cara del elemento cuadrilátero \hat{E} están dadas por:

$$\hat{\varphi}_{n_1, n_2}^{\hat{E}}(\xi, \eta) = \frac{(1-\xi)}{2} \frac{(1-\eta)}{2} \frac{(1+\xi)}{2} \frac{(1+\eta)}{2} P_{n_1}(\xi) P_{n_2}(\eta)$$

donde $0 \leq n_1, n_2 \leq p-2$.

En la Figura 4.14 se muestra la gráfica de la función de forma $\hat{\varphi}_{n_1, n_2}^{\hat{E}}(\xi, \eta)$ para $n_1 = 0, n_2 = 0$ y $n_1 = 1, n_2 = 1$.

Estas funciones se anulan en todos los vértices y aristas del elemento \hat{E} .

4.6.2. Base de funciones de forma en el espacio H^1

Las funciones de aproximación en el espacio H^1 cuidan la continuidad en las interfaces de los elementos. Como una ilustración se presenta las funciones base para $p = 1, 2$ y 3 , y para elementos cuadriláteros.

En la Figura 4.15 se muestra las funciones base para $p = 1$.

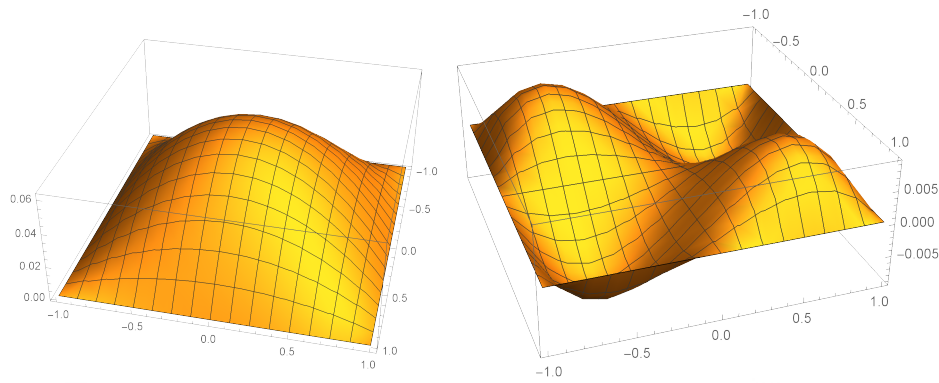


Figura 4.14: Funciones de forma asociada a la cara del elemento \hat{E} para $n_1 = n_2 = 0$ y $n_1 = n_2 = 1$

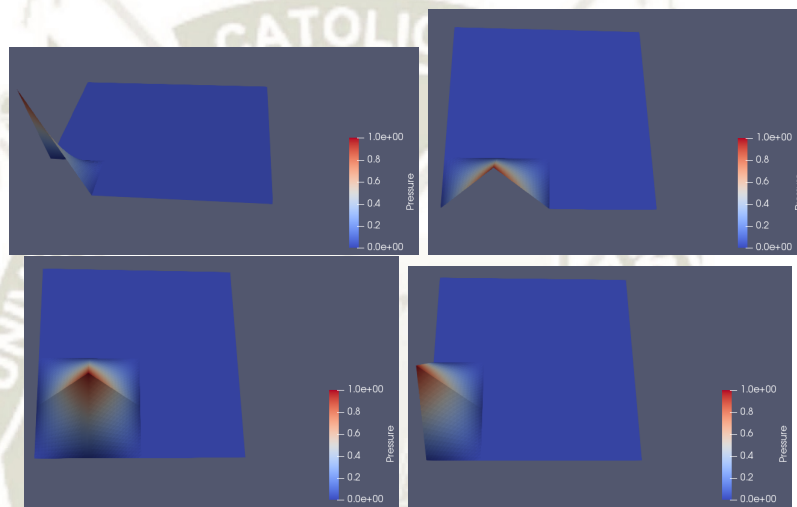


Figura 4.15: Funciones base en el espacio H^1 con $p = 1$

Para $p = 2$ también son base las funciones mostradas para $p = 1$, y que se incrementan las siguientes funciones cuadráticas, que se muestran en la Figura 4.16.

Para $p = 3$ además de las funciones base en $p = 1$ y $p = 2$ son incrementadas funciones cúbicas. En la Figura 4.17 se ilustran algunas de estas funciones cúbicas.

4.6.3. Base de funciones de forma en el espacio Galerkin discontinuo

En Galerkin discontinuo no se exige continuidad entre las funciones base de dos o más elementos conectados, esto significa que sobre las interfaces no hay continuidad. Como una ilustración se presenta las funciones base para $p = 1, 2$ y 3 , y para elementos cuadriláteros. En la Figura 4.18 se muestra las funciones base para $p = 1$.

Las funciones mostradas para $p = 1$ también son bases para $p = 2$. En la Figura

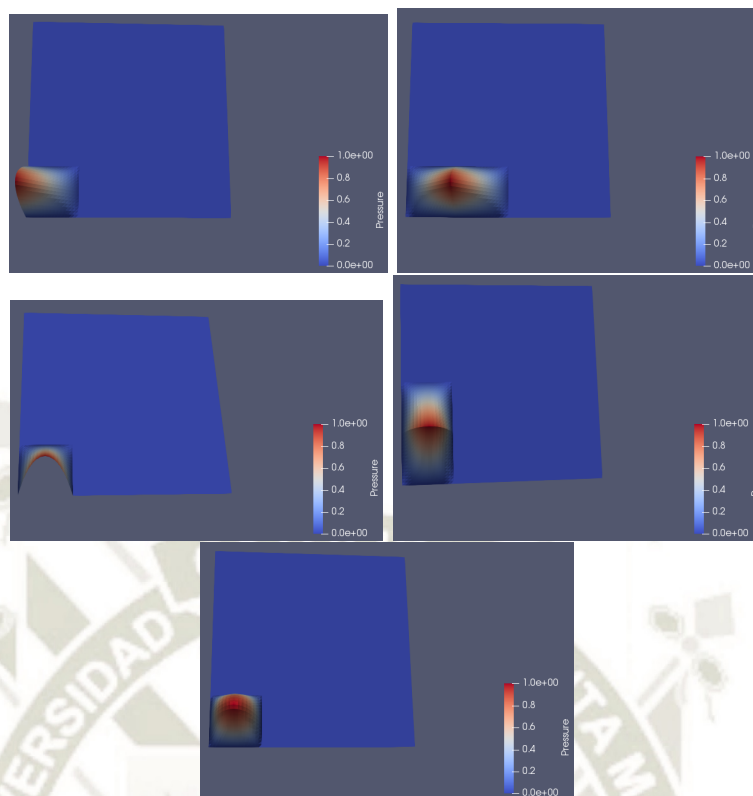


Figura 4.16: Funciones base en el espacio H^1 con $p = 2$

4.19 se incrementan las siguientes funciones cuadráticas para $p = 2$.

Para $p = 3$ se consideran las mismas funciones que $p = 1$ y $p = 2$. En la Figura 4.20 se incrementan algunas funciones cúbicas.

4.7. Módulo Material.

Abstracción de una Ecuación Diferencial

El módulo Material es el responsable por contener todos los métodos y datos relacionados a las ecuaciones diferenciales. Contiene la clase abstracta para implementar las ecuaciones diferenciales tanto estacionarias como transitorios. Sirve de clase base para ecuaciones diferenciales parciales y ordinarias.

4.7.1. TPZMaterial

La clase TPZMaterial es definida para abstraer la idea de ecuación diferencial (puede ser ordinaria o parcial, sin embargo ella puede ser una ecuación integro-diferencial). Decir que es una clase abstracta significa que no pueden crearse objetos de este tipo,

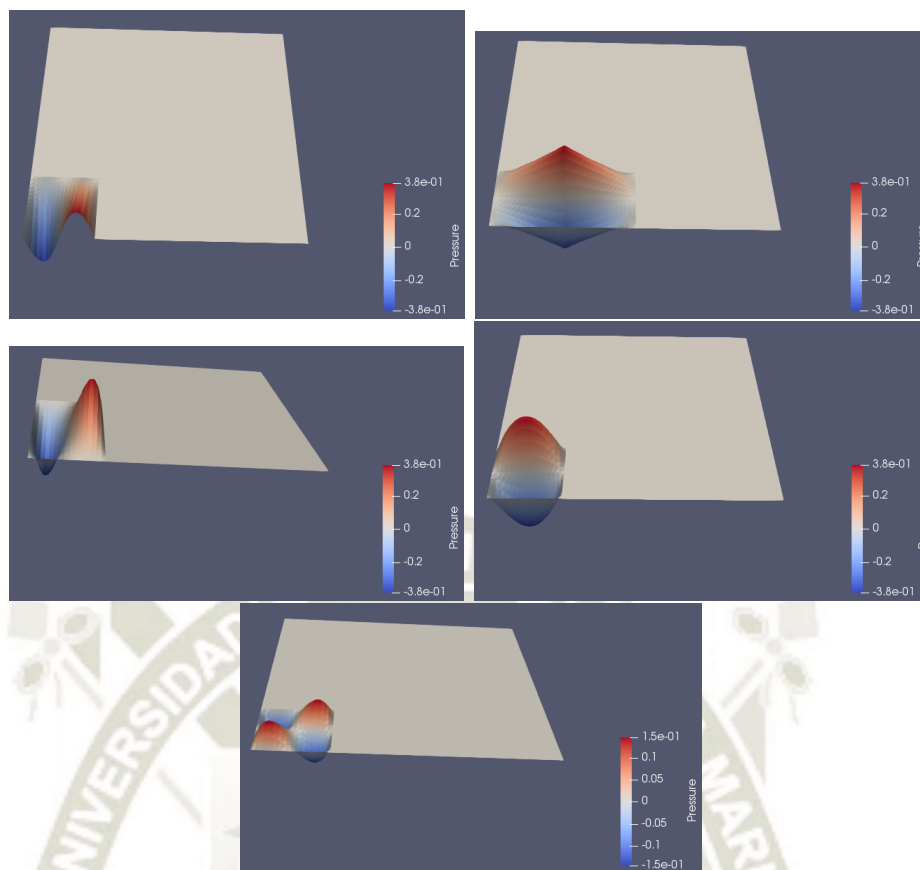


Figura 4.17: Algunas funciones base en el espacio H^1 con $p = 3$

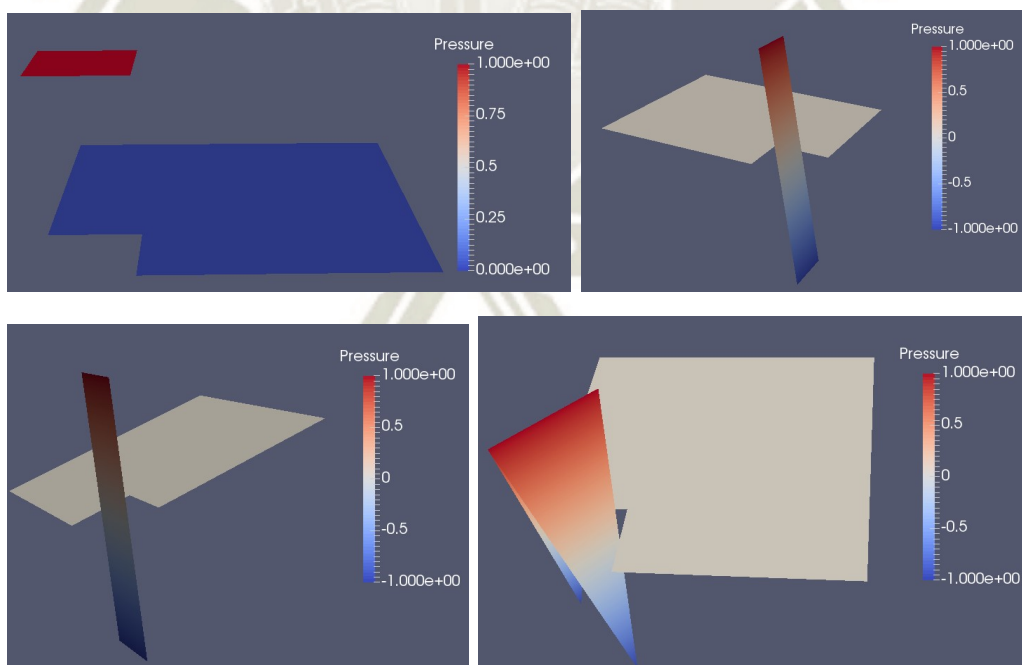
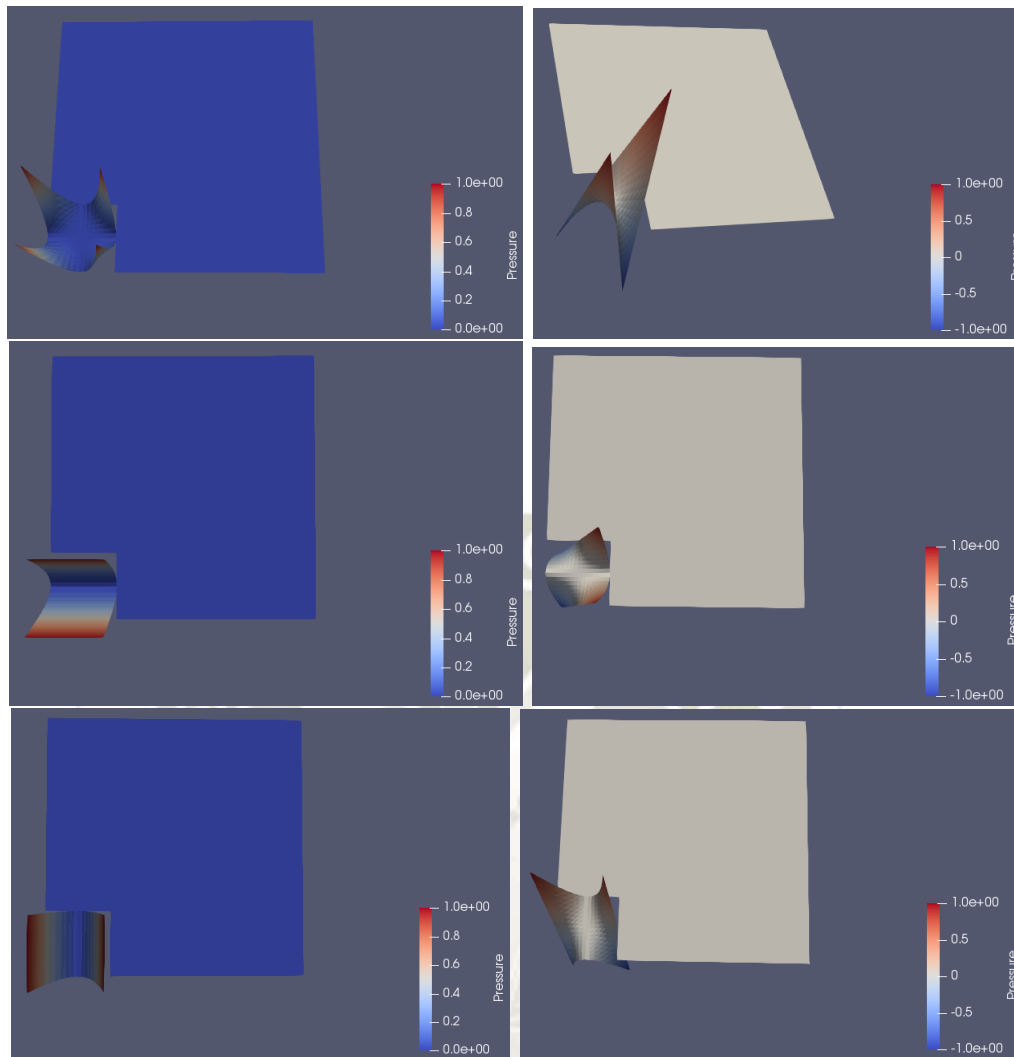


Figura 4.18: Funciones base en GD con $p = 1$

porque es definida para agrupar los principales datos de la ecuación diferencial y los principales métodos que debe considerar, generalmente sin implementación. La imple-


Figura 4.19: Funciones base en GD con $p = 2$

mentación de cómo debe funcionar cada uno de esos métodos deberá ser escrito en cada clase derivada (clase hija) dependiendo de sus características y fórmula correspondiente. Las clases derivadas se muestra en la Figura 4.21. En sus clases derivadas, no puede dejar de implementarse la formulación matemática correspondiente a la ecuación diferencial, tanto en los elementos del interior del dominio cuanto en los elementos que interceptan la frontera del dominio. Esa formulación es conocida como formulación débil del problema en estudio.

Obviamente los métodos que implementan las formulaciones débiles tanto en el interior del dominio y en la frontera, son los más importantes en cada clase derivada, y ellos son llamados `Contribute(.)` y `ContributeBC(.)`, respectivamente. El problema algebraico es asociado a los espacios de aproximación y a la formulación débil. Cualquier sistema de ecuaciones diferenciales puede ser implementado, como por ejemplo

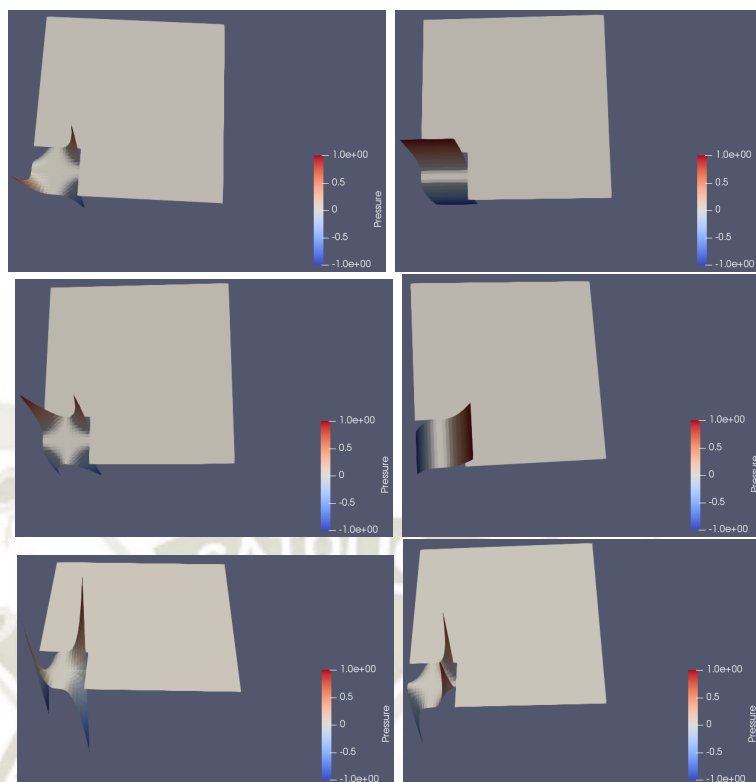


Figura 4.20: Algunas funciones base en GD con $p = 3$

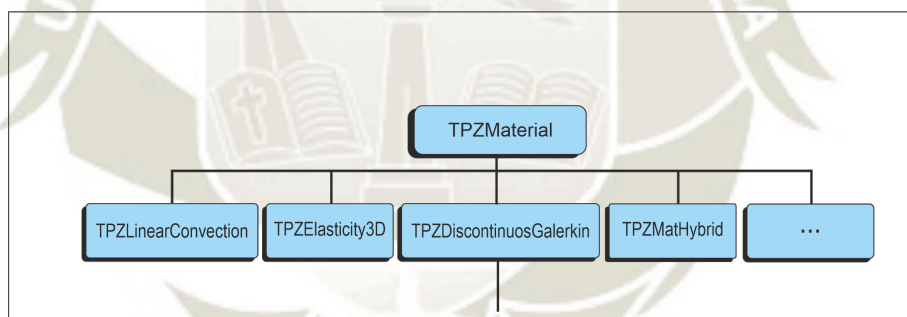


Figura 4.21: La clase TPZMaterial y algunas clases derivadas que tienen implementación de las contribuciones para el uso de espacios de aproximación de funciones continuas.

las leyes de conservación. En la biblioteca del NeoPZ existen ya implementadas diferentes ecuaciones diferenciales parciales, como por ejemplo: para la ecuación lineal uni-, bi- y tri-dimensional, para la ecuación lineal con convección, para la ecuación de la elasticidad, etc. Estas ecuaciones solo son resueltas con espacios de aproximación de funciones continuas.

Sin embargo, muchos problemas en ecuaciones diferenciales pueden presentar discontinuidades, dependiendo de sus parámetros. Por esta razón, en el NeoPZ, existe la clase TPZDiscontinuosGalerkin que es derivada de la TPZMaterial, tal como se

muestra en la figura 4.22. En ella se implementan los métodos para el uso adecuado de espacios de aproximación de funciones discontinuas (el método Galerkin discontinuo). En esta clase y sus derivadas además de los dos métodos de contribución mencionados anteriormente se debe implementar el método `ContributeInterface(.)`. En este método se debe implementar la formulación débil de las integrales sobre las fronteras de los elementos internos al dominio, que en el caso no son necesariamente continuas. Esto no significa que solo funciona utilizando funciones discontinuas, también funciona utilizando espacios de funciones continuas. En el NeoPZ ya están implementadas mas de 15 clases derivadas del `TPZDiscontinuousGalerkin`, por tanto pueden ser resueltas con el método de Galerkin discontinuo. Algunos ejemplos son: la ecuación de Laplace, la ecuación de Poisson, la ecuación del transporte, la ecuación de Darcy, etc. La mayoría de estas también pueden ser resueltas por el método mixto en elementos finitos.

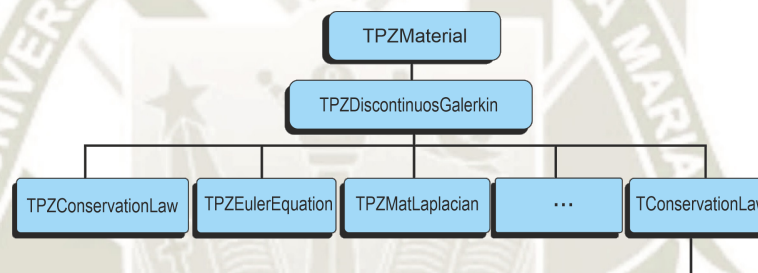


Figura 4.22: Algunas clases derivadas de `TPZDiscontinuousGalerkin`, que es la clase que abstrae la idea de ecuación diferencial parcial para el uso de espacios de aproximación de funciones continuas o discontinuas.

Para el caso de las ecuaciones diferenciales del interés en esta tesis, se implementó una clase derivada llamada de `TConservationLaw`, para abstraer todas las características especiales en una ley de conservación general. Por ejemplo, toda ecuación ley de conservación tiene una función flujo en su ecuación y es importante destacar el jacobiano de ese flujo. Por el hecho de querer utilizar algoritmos en elementos finitos con funciones continuas y/o discontinuas, esta clase es derivada de `TPZDiscontinuousGalerkin`, por lo tanto para otras clases que pueden ser derivadas de ella se necesita implementar los tres métodos de contribución mencionados anteriormente.

Ley de conservación

En esta clase madre, `TConservationLaw`, están implementados todos los métodos comunes para una ley de conservación homogénea o no.

A partir de ella, se han derivado dos clases: `TConeLaw` y `TEulerLaw`, para realizar los experimentos computacionales para demostrar numericamente que el método propuesto funciona, que es estable, robusto y alcanza soluciones aproximadas con hasta menor error que los documentados en la literatura científica. Observar que esta clase es para ecuaciones dependientes del tiempo y que serán resueltas incrementando un término de estabilización llamado difusividad implícita. Una clase para la ley de conservación estacionaria también existe, pero no es interesante para mostrar la estabilidad del método, siendo que apenas utiliza las variables del espacio y no la variable del tiempo.

A continuación se presenta el árbol de leyes de conservación específicos que se derivan de la clase abstracta `TConservationLaw`, ver Figura 4.23. En cada clase de una ley específica se implementa la función flujo y su jacobiano correspondiente.

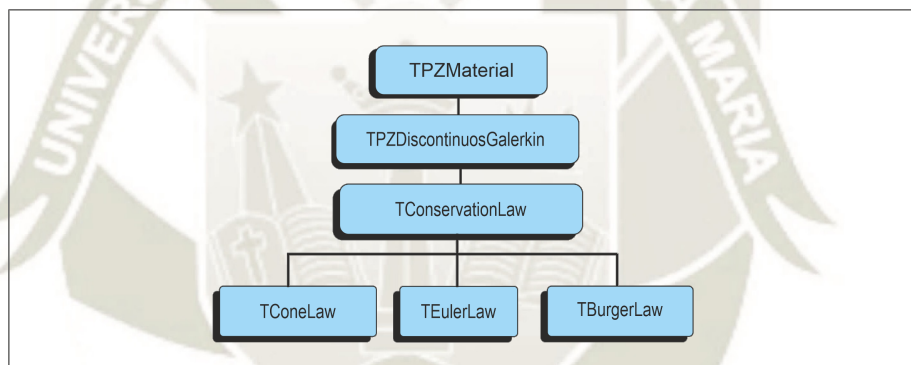


Figura 4.23: Clase abstracta para leyes de conservación y las clases derivadas implementadas en el desarrollo de la presente tesis.

Capítulo 5

hp -Adaptatividad en Elementos Finitos

Al resolver numéricamente una ecuación diferencial y obtener una solución aproximada, puede haberse utilizado un refinamiento que no es suficiente, o un orden de los polinomios de aproximación que es bajo o alto para el problema. Esto, porque generalmente se tiene una cierta tolerancia y se resuelve numéricamente el problema deseando alcanzar una precisión menor a la tolerancia. Existen técnicas para mejorar una solución aproximada obtenida para atender la tolerancia requerida y entre las de mayor suceso están las técnicas de refinamiento h , p y hp .

El h -refinamiento consiste en la división de los elementos componentes de la malla geométrica en elementos más pequeños o en la reagrupación de los elementos generando un elemento mayor. El p -refinamiento consiste en la modificación del orden polinomial, $p \geq 0$, de los polinomios sobre los elementos finitos. El hp -refinamiento consiste en la combinación de los dos refinamientos para la misma malla.

La calidad de la aproximación de una discretización en elementos finitos (FEM o DGM), depende mucho del h -refinamiento y del p -refinamiento. Así, para mejorar la aproximación de la solución y alcanzar el nivel de error deseado, frecuentemente es necesario realizar una combinación óptima de los dos refinamientos. Implementar una versión hp -adaptativa no es una tarea fácil. En la práctica, determinar cuando utilizar apropiadamente uno de los dos refinamientos o ambos requiere de bastante experiencia.

En este contexto, se entiende por adaptatividad, como el uso adecuado de los recursos computacionales procurando reducir la dimensión del modelo matemático dis-

cretizado para obtener la tolerancia exigida modificando los parámetros h y p .

5.1. Reconstrucción del gradiente de una solución aproximada

Al resolver numéricamente la ley de conservación (2.2), (2.3) y (2.4), utilizando el método propuesto, se obtiene la solución aproximada denotada por $u_h(t, \mathbf{x})$. Observar que la solución exacta no es conocida en los problemas prácticos, por lo tanto, no se puede calcular el error de la aproximación de la solución aproximada $u_h(t, \mathbf{x})$ con la solución exacta $u(t, \mathbf{x})$.

En el caso de leyes de conservación es un conocimiento consolidado, que para representar una solución con gradiente alto en alguna región del dominio, se obtiene mejor aproximación si se utiliza el menor orden de aproximación de los polinomios y el tamaño de los elementos debe ser el menor posible. Para la presente tesis, se pretende identificar en qué elementos finitos la solución aproximada tiene los mayores gradientes y entonces refinar estos elementos en elementos de menor tamaño. Además de eso, el orden de aproximación de los polinomios en esos elementos refinados deben ser disminuidos a fin de evitar oscilaciones espurias (ficticias), que muy probablemente harán inestable el esquema numérico que se esté utilizando. Ciertamente que al refinar en elementos menores, el número de grados de libertad crecerá (y puede ser mucho), lo que lleva a un costo computacional alto para resolver sistemas lineales cada vez mayores. Por lo tanto, es necesario también trabajar otro aspecto.

El segundo aspecto, se puede considerar como si fuera la situación contraria, esto significa que en el caso de identificar que sobre algunos elementos finitos la solución es muy suave (gradiente muy bajos), entonces se puede realizar el proceso contrario. Es decir, los elementos en esa región con gradiente pequeño se pueden engrosar creando elementos finitos mayores (lo que disminuye el número de grados de libertad). Además, como los gradientes son pequeños se puede utilizar grados mayores de los polinomios de aproximación en esos elementos.

En resumen, se identifica donde la solución aproximada tiene los mayores o menores gradientes y allí se aplica un hp -refinamiento. Como puede verse, el refinamiento h y el p tienen el mismo sentido: cuando se hace mas fino el elemento finito (menor) se

disminuye el orden del polinomio de aproximación, y cuando se hace mayor el elemento finito (engrosar) se aumenta el orden del polinomio de aproximación. Por lo tanto, el objetivo para esta sección es tener la mejor información del gradiente de la solución aproximada y dependiendo de su magnitud aplicar una estrategia de refinamiento.

Considerando que la solución aproximada es una expansión finita de funciones,

$$u_h = \sum_{i=0}^{n-1} u_{h_i} \varphi_i.$$

se puede considerar una aproximación de su gradiente ∇u_h como resultado de las derivadas de las funciones φ_i , esto es

$$\nabla u_h = \sum_{i=0}^{n-1} u_{h_i} \nabla \varphi_i.$$

Sin embargo, es conocido en la literatura científica que es muy pobre esa aproximación del gradiente. Por ejemplo, si la función está aproximada por polinomios lineales en un elemento finito, sus derivadas son funciones constantes sobre ese elemento finito. Así, dependiendo del tamaño de los elementos finitos (*grandes*), se tendrá una aproximación muy pobre del gradiente de la solución aproximada. Se precisa de otras alternativas para determinar la magnitud de los gradientes de la solución aproximada.

Una segunda alternativa. Para determinar una aproximación del gradiente de la solución aproximada ∇u_h (por ejemplo en los centros de masa de cada elemento finito), se puede aplicar la expansión de Taylor de u_h en el centro de masa de cada elemento finito. Así, se consigue otra aproximación del gradiente en el centro de masa de cada elemento finito a partir de los valores de u_h en el centro de masa de todos sus elementos finitos vecinos. Esta segunda aproximación del gradiente se denomina: **reconstrucción del gradiente** de u_h y ese gradiente reconstruido indirectamente se denota por $\tilde{\nabla} u_h$. Como este gradiente reconstruido debe ser calculado en cada elemento finito, se precisa de un proceso de cálculo suficientemente barato para que el costo computacional no sea grande cuando la malla tenga un número elevado de elementos finitos. Por esta razón se optó por escoger realizar la reconstrucción del gradiente utilizando el método de mínimos cuadrados, porque este método es una simple multiplicación de una matriz con su transpuesta.

Con lo descrito, la estrategia asumida para tener información de la presencia de altos gradientes en una solución aproximada u_h es la siguiente:

- Para cada elemento finito E , se determina su centro de masa y se construye una lista de todos los elementos finitos vecinos a E y sus respectivos centros de masa.
- En el centro de masa de E se aplica la expansión de Taylor a partir de los valores de u_h sobre el centro de masa de todos los elementos finitos vecinos de E .
- Aplicando la fórmula de la expansión de Taylor para el centro de masa de cada elemento vecino, se tiene un sistema de ecuaciones lineales. Este sistema se escribe en forma matricial.
- Observar que el vector gradiente reconstruido tiene tantas entradas como la dimensión del problema (1 si es uni-dimensional, 2 si es bi-dimensional, 3 si es tri-dimensional). Sin embargo el número de elementos vecinos es siempre mayor (si es uni-dimensional el mínimo de vecinos es 2, si es bi-dimensional es 3, si es tri-dimensional el mínimo es 4). Por lo tanto, es un sistema sobre dimensionado y será resuelto utilizando el método de los mínimos cuadrados.
- Al aplicar el método de elementos finitos se utiliza una matriz de pesos que considera la inversa de la distancia del centro de un vecino al centro de E . Esto procura dar mayor peso a los valores desde los centros más próximos y menos peso a los valores sobre los centros de los elementos vecinos mas alejados (la fórmula de Taylor que es mas precisa para puntos en el entorno del punto de aplicación).
- El vector resultante se asume como el gradiente reconstruido $\tilde{\nabla}u_h$ para el elemento E .

Observar, que además de la información del gradiente reconstruido $\tilde{\nabla}u_h$ para aplicar alguna estrategia de refinamiento, se tiene la aproximación del gradiente ∇u_h a partir de las funciones φ_i . Teniendo esas dos informaciones para cada centro de masa de todos los elementos, se puede analizar la aproximación entre esos dos vectores. Es natural que si la solución aproximada u_h está convergiendo a la solución del problema, su gradiente también esté. En el caso, las dos aproximaciones del gradiente $\tilde{\nabla}u_h$ y ∇u_h deben ser próximas. Con esta idea, se puede estimar un error para la solución aproximada u_h

utilizando de forma indirecta, por ejemplo, dos criterios. El primer criterio considera la diferencia de las normas de los vectores gradientes, $||\tilde{\nabla}u_h|| - ||\nabla u_h||$. El segundo criterio es verificar el ángulo entre esos dos vectores, porque el gradiente debería estar orientado en la dirección de la mayor variación de la solución, entonces estará mas aproximado cuanto mas próximo de zero sea el ángulo entre los vectores.

El esquema de reconstrucción del gradiente por mínimos cuadrados implementado y descrito en este capítulo, es validado con un experimento numérico de un modelo estacionario que considera una función con alto gradiente (arco tangente). Después de validado se utiliza en los experimentos numéricos expuestos en el siguiente capítulo que muestran la estabilidad y convergencia del método propuesto en la tesis.

5.2. Descripción del cálculo del gradiente reconstruido

Sea $u : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ una función definida sobre un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Sea \mathcal{M}_Ω una malla de elementos finitos que discretiza el dominio Ω .

Sea $\mathbf{x} \in \Omega$ el centro de masa de un elemento finito $E \in \mathcal{M}_\Omega$. Aplicando la fórmula de Taylor en el centro de masa se tiene

$$u(\mathbf{y}) = u(\mathbf{x}) + (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \nabla u + \sum_{|\alpha| \geq 2} \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x})^\alpha}{\alpha!} \nabla^\alpha u(\mathbf{x}) \quad (5.1)$$

Utilizando la expansión de Taylor, se determina una función lineal (linearizando) próxima a la función u en el punto \mathbf{x} , que se denota por \tilde{u} y que se representa por

$$\tilde{u}(\mathbf{y}) = u(\mathbf{x}) + \mathbf{v} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega. \quad (5.2)$$

Se observa que el gradiente de la función linealizada es $\nabla \tilde{u} = \mathbf{v}$, para \mathbf{x} fijo. Si los \mathbf{y} están suficientemente próximos al \mathbf{x} y bajo condiciones suficientes de regularidad se tiene $\tilde{u}(\mathbf{y}) \cong u(\mathbf{y})$. Entonces, para esos puntos próximos el gradiente de la función u puede ser aproximado con el gradiente de su linealización. Si la malla \mathcal{M}_Ω es suficientemente refinada, podemos considerar los centros de elementos geométricos vecinos

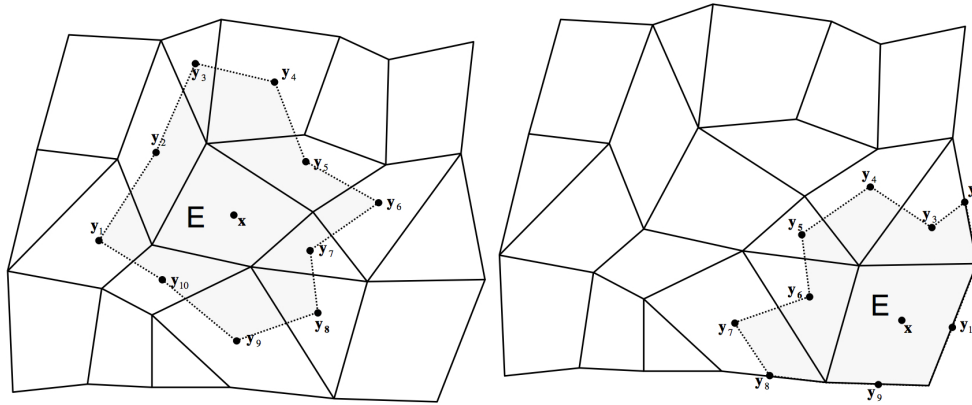


Figura 5.1: A la izquierda, detalle de un elemento en el interior del dominio con su centro de masa y los centros de masa de sus vecinos. A la derecha un elemento conectado a la frontera del dominio con su centro de masa y los centros de masa de sus vecinos.

suficientemente próximos. Entonces,

$$u(\mathbf{y}) \cong u(\mathbf{x}) + \mathbf{v} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (5.3)$$

para cualquier \mathbf{y} suficientemente próximo de \mathbf{x} .

Observar el ejemplo en la Figura 5.1. La figura a la izquierda presenta un elemento $E \in \mathcal{M}_\Omega$ incluido en el interior del dominio Ω . E tiene 10 elementos vecinos, a través de sus 9 lados. La \mathbf{x} representa el centro del elemento E y los \mathbf{y}_i representan el centro del elemento vecino i -ésimo. La segunda figura representa un elemento $E \cap \partial\Omega \neq \emptyset$, con 9 elementos vecinos. Los puntos \mathbf{y}_1 , \mathbf{y}_2 , \mathbf{y}_8 y \mathbf{y}_9 son centros de masa de los elementos frontera unidimensionales (con condiciones frontera). También \mathbf{x} representa el centro de masa del elemento E . Las regiones sombreadas son aproximadamente las áreas de influencia para el cálculo del gradiente reconstruido.

Sea $E \in \mathcal{M}_\Omega$ un elemento de la malla. Se identifican todos los elementos vecinos de E por cualquiera de sus lados. Conforme lo expuesto en la geometría, cada vértice del elemento E es un lado de dimensión cero. Si existen m vecinos de E , agrupamos todos en el conjunto de los vecinos de E , $\mathcal{V}_E = \{F \in \mathcal{M}_\Omega / F \cap E = s \wedge s \in \mathcal{S}^E\}$, donde \mathcal{S}^E denota al conjunto de lados de E . Numéricamente, en cada elemento E de la malla, se recorre cada lado s de E procurando por los elementos vecinos con ese lado común (conectividad del par (E, s)), es decir, conectados a E por el lado s , y los agrupamos en una lista de punteros de elementos vecinos a E , sin repetición.

Es importante resaltar que por la construcción realizada de las mallas en el NeoPZ,

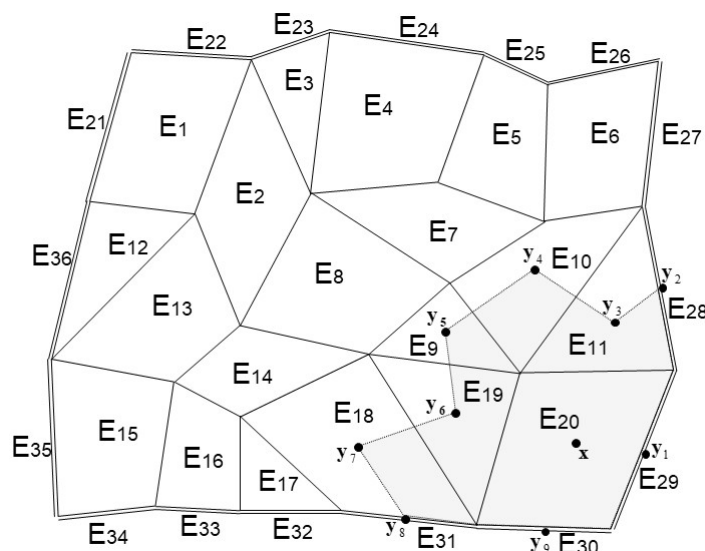


Figura 5.2: Detalle de la construcción de los elementos internos y de frontera en una malla bi-dimensional. Los elementos son denotados por E y están enumerados.

los elementos conectados en la frontera del dominio, siempre tienen elementos vecinos de codimensión 1 sobre la frontera del dominio. Observar en la Figura 5.1, del lado derecho. Por ejemplo, el punto y_9 es el centro de masa del elemento unidimensional sobre la frontera. Esto significa que existe un elemento finito unidimensional en el segmento horizontal inferior, que es frontera del elemento E y también frontera del dominio. En esos elementos sobre las fronteras que se aplica las condiciones de frontera del modelo que se desea estudiar. Se expone una visualización de la construcción de la malla, para un caso bi-dimensional, en la Figura 5.2.

Aplicando la Ecuación (5.3) a los m centros de masa de los elementos vecinos de E , tenemos un sistema de ecuaciones lineales a resolver con m ecuaciones y d incógnitas (número de componentes de \mathbf{v}). Para el caso uni-dimensional tenemos $d = 1$, observar que todo elemento uni-dimensional de la malla tendrá por lo menos dos vecinos (peor caso, serían los puntos en la frontera del dominio, $m \geq 2$). Para el caso bi-dimensional, $d = 2$, cada elemento bi-dimensional de la malla tendrá por lo menos 3 vecinos (cuando son triángulos), entonces $m \geq 3$. Para el caso tri-dimensional, $d = 3$, el tetraedro tiene 4 vecinos de codimensión 1, el tetraedro es el elemento finito con el menor número de vecinos en tres dimensiones, $m \geq 4$. Por lo tanto, para todas las dimensiones se tiene $m > d$, lo que es un sistema sobre-dimensionado.

Escribiendo el sistema de ecuaciones como ecuación matricial tenemos:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 - \mathbf{x} \\ \mathbf{y}_2 - \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{y}_m - \mathbf{x} \end{bmatrix} \mathbf{v}^t = \begin{bmatrix} u(\mathbf{y}_1) - u(\mathbf{x}) \\ u(\mathbf{y}_2) - u(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ u(\mathbf{y}_m) - u(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

que será representado por

$$H\mathbf{v}^t = U.$$

Para obtener una solución única proyectamos el sistema para el espacio de dimensión d utilizando el método de los mínimos cuadrados. Así, resolvemos el sistema

$$H^t H\mathbf{v}^t = H^t U.$$

y este sistema es de orden igual a la dimensión del dominio. Es fácil demostrar que existe una solución única, como consecuencia de que los elementos finitos no tienen medida nula. La solución que obtenemos es el gradiente de la función linealizada $\nabla \tilde{u} = \mathbf{v}$.

Por otro lado, considerando que podemos refinar unos elementos y otros no, significa que podemos tener algunos elementos vecinos muy pequeños y otros mayores, así, los centros de masa pueden estar mas cercanos al centro de masa \mathbf{x} de un elemento E y otros estar mas alejados. Observe la Figura 5.3, donde después de varios h -refinamientos los centros de masa \mathbf{y}_2 y \mathbf{y}_6 están mas cercanos al centro de masa \mathbf{x} . El centro de masa \mathbf{y}_1 está un poco mas alejado al \mathbf{x} . Los centros \mathbf{y}_3 y \mathbf{y}_5 están mucho más alejados comparados con los anteriormente mencionados y por último el centro \mathbf{y}_4 es el más alejado del centro \mathbf{x} . Ciertamente, al utilizar como base de la reconstrucción del gradiente, la fórmula de Taylor, los centros de masa de los vecinos \mathbf{y} , obtendrán mejor aproximación a la fórmula cuanto más cercanos estén del centro de masa en estudio, de \mathbf{x} . Esto hace necesario realizar un ajuste en el cálculo del sistema sobre dimensionado, ponderando la influencia de los cálculos desde los centros de masa dependiendo de su distancia al centro \mathbf{x} .

El peso adecuado para ponderar cada ecuación lineal, desde cada centro vecino, es la inversa de la distancia $dist(\mathbf{y} - \mathbf{x})$. Construimos entonces una matriz diagonal

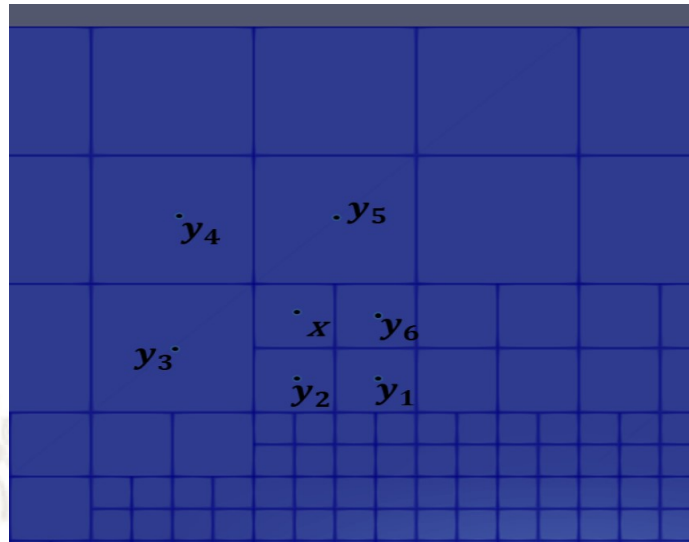


Figura 5.3: Detalle de elementos vecinos más refinados, con su centro de masas más cercano a \mathbf{x} y otros vecinos mayores con centros de masa más alejados.

formada por las inversas de esas distancias, que denotaremos por

$$W = \begin{bmatrix} \text{dist}(\mathbf{y}_1 - \mathbf{x}) & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \text{dist}(\mathbf{y}_2 - \mathbf{x}) & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \text{dist}(\mathbf{y}_m - \mathbf{x}) \end{bmatrix}$$

Por lo tanto la ecuación matricial toma la forma:

$$WH\mathbf{v}^t = WU.$$

Nuevamente el sistema sobre dimensionado lo proyectamos para el espacio de dimensión d utilizando el método de los mínimos cuadrados, multiplicando por la transpuesta de la matriz (WH) , esto es, por $(WH)^t = H^tW^t = H^tW$.

Así, realizando manipulaciones algebraicas:

$$(WH)^t(WH)\mathbf{v}^t = (WH)^tWU$$

$$H^tW^t(WH)\mathbf{v}^t = H^tW^tWU$$

$$H^tW^2H\mathbf{v}^t = H^tW^2U.$$

La solución obtenida será considerada como el gradiente reconstruido $\nabla \tilde{u} = \mathbf{v}$.

En la siguiente sección se utiliza un modelo estacionario para aplicar el método de reconstrucción del gradiente por mínimos cuadrados y validar su eficacia.

5.3. Validando la reconstrucción propuesta

Se considera un modelo estacionario bidimensional, con la función $u(\mathbf{x})$ definida sobre el dominio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$,

$$u(\mathbf{x}) = u(x, y) = 8x(x-1)y(y-1) \left[1 + \frac{2}{\pi} \arctan [2\sqrt{\varepsilon} w(x, y)] \right]$$

$$w(x, y) = \left(\left(\frac{1}{4} \right)^2 - \left(x - \frac{1}{2} \right)^2 - \left(y - \frac{1}{2} \right)^2 \right)$$

donde la constante positiva es $\varepsilon = 10^3$.

El vector gradiente de la función es

$$\nabla u = \left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right)$$

donde

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{8}{\pi} (2x-1)y(y-1) \left[\pi + 2 \arctan [2\sqrt{\varepsilon} w(x, y)] - \frac{4\sqrt{\varepsilon} x(x-1)}{(1+4\varepsilon(w(x, y))^2)} \right]$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{8}{\pi} (2y-1)x(x-1) \left[\pi + 2 \arctan [2\sqrt{\varepsilon} w(x, y)] - \frac{4\sqrt{\varepsilon} y(y-1)}{(1+4\varepsilon(w(x, y))^2)} \right].$$

El dominio es un cuadrado de centro $C = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. En el argumento del arctan aparece el número $r = 0,25$, por tanto la función $u(\mathbf{x})$ tendrá un fuerte gradiente sobre la circunferencia \mathcal{C} de centro C y radio r .

Siendo $u(x, y)$ una función conocida, vemos que el vector gradiente apuntará siempre en la dirección del vector que une el punto (x, y) al punto $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Esto es, el vector gradiente es muy próximo al vector

$$\bar{v}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{2} - x\right)^2 + \left(\frac{1}{2} - y\right)^2}} \left(\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y \right).$$

Para validar la implementación del método gradiente reconstruido por mínimos cuadrados utilizamos diversas mallas del dominio Ω , considerando sobre cada elemento

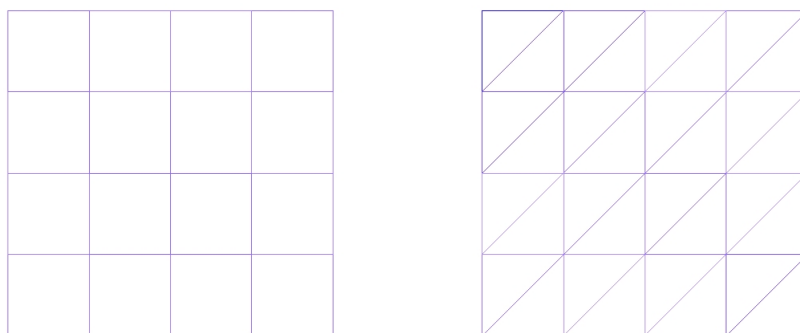


Figura 5.4: Mallas uniformes iniciales de elementos cuadriláteros y triángulos.

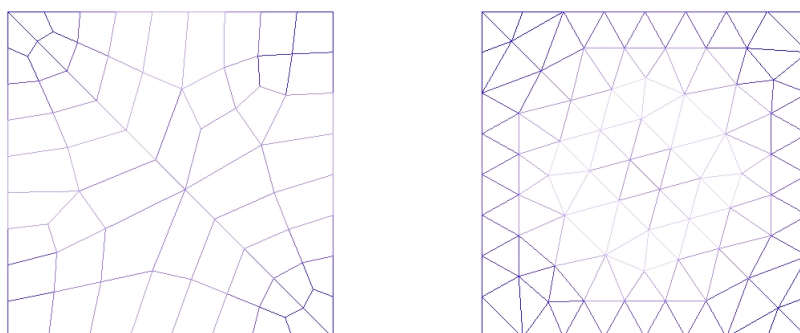


Figura 5.5: Mallas iniciales no uniformes de cuadriláteros y triángulos.

geométrico de las mallas la integral de la solución exacta. La función obtenida por las integrales al aplicar el método de Galerkin discontinuo es considerada como la solución aproximada. Se aplica ahora, el método de reconstrucción de gradientes para una malla regular la cual es refinada en cada iteración en los elementos próximos a la circunferencia de centro C y radio r . Inicialmente es utilizada una malla regular de cuadriláteros y posteriormente una regular de elementos triangulares, que se muestra en la Figura 5.3. Por último, se generó una malla no regular de cuadriláteros y otra no regular de triángulos, mostrada en la Figura 5.5. Los resultados son muy similares. Se presentan los gráficos de los errores para el caso de mallas regulares y no regulares, tanto para el caso de elementos cuadriláteros cuanto de elementos triangulares.

A partir de las mallas iniciales realizamos dos tipos de refinamientos en las mallas

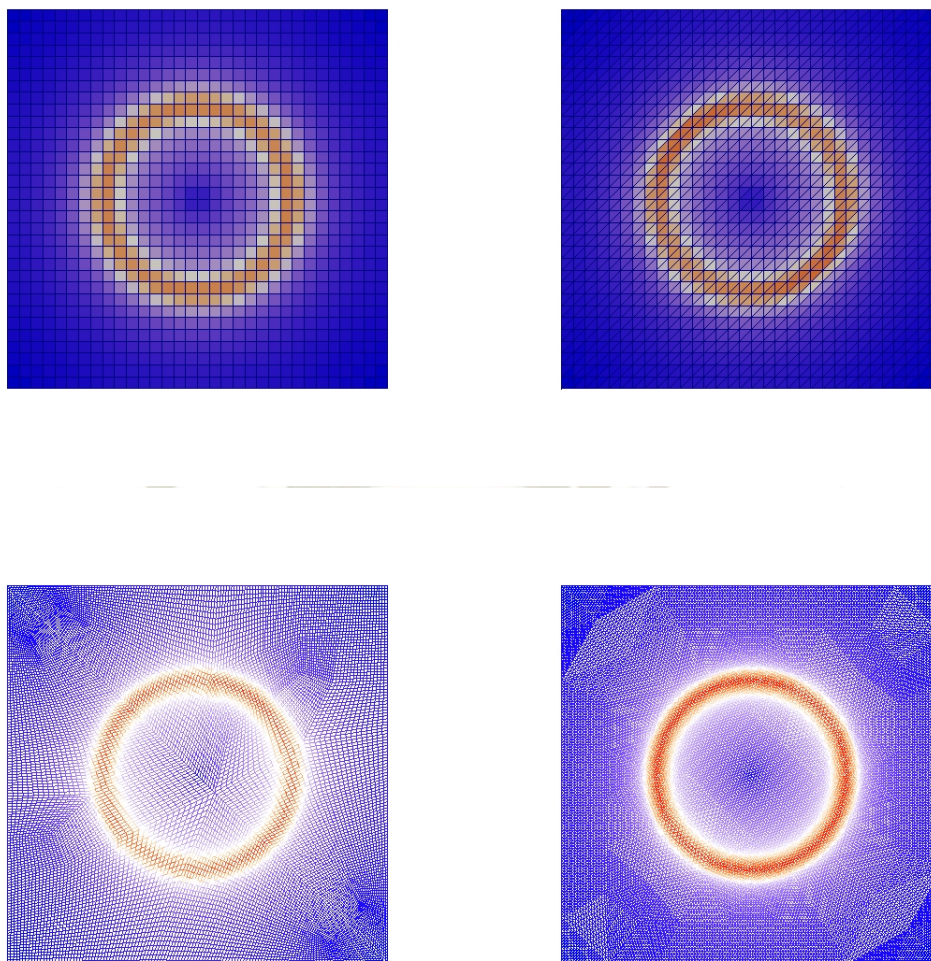


Figura 5.6: Mallas refinadas uniformemente hasta el nivel 4, a partir de las 4 mallas iniciales.

iterando hasta obtener 4 niveles de refinamiento. El primer tipo es un refinamiento uniforme y el segundo tipo es un refinamiento localizado en los elementos próximos de la circunferencia \mathcal{C} . En la Figura 5.6, se presentan las mallas obtenidas desde las mallas iniciales refinadas uniformemente hasta el nivel 4.

En la Figura 5.7, presentamos las mallas refinadas hasta el nivel 4 en los elementos próximos a la circunferencia \mathcal{C} .

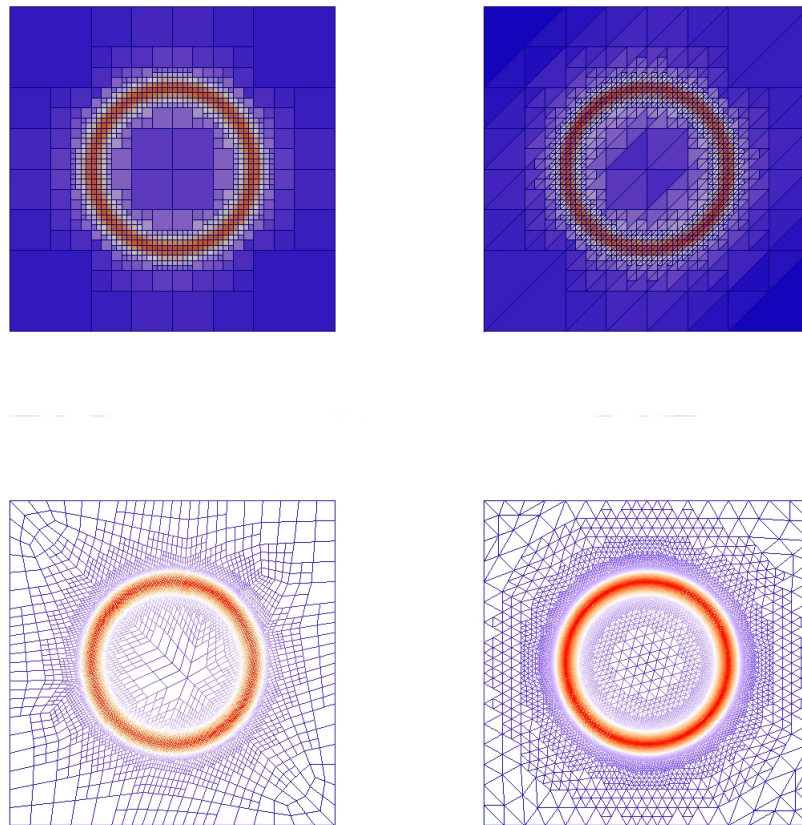


Figura 5.7: Mallas refinadas en los elementos próximos a la circunferencia \mathcal{C} hasta el nivel 4 de refinamiento.

Para mostrar que el esquema implementado es útil para nuestros objetivos, necesitamos ver si los gradientes reconstruidos convergen cuando el refinamiento es mayor. El cuadro de los errores del gradiente reconstruido para mallas uniformes y refinamiento uniforme, se presenta en el Cuadro 5.1 , y su gráfica correspondiente se presenta en la Figura 5.8. Para ilustrar también se presentan los errores obtenidos para el refinamiento no uniforme (localizado) en las diferentes mallas en la Figura 5.10.

En la Figura 5.9, se presenta también los errores para el caso de las mallas iniciales no uniformes y en las cuales se aplica refinamiento uniforme. La convergencia parece cuadrática, pero solo parece, observar que los valores de h utilizados son una media de todos los elementos de la malla, dado que es una malla no regular.

La tasa de convergencia aparece exponencial para el caso de refinamiento no uniforme pues hemos utilizado la técnica de refinamiento hp -adaptativa, esto por que estamos

h	Erro - Quadriláteros	h	Erro - Triângulos
0.25	0.313131	0.25	0.342316
0.125	0.148688	0.125	0.095682
0.0625	0.04605	0.0625	0.033343
0.03125	0.0126856	0.03125	0.00831309
0.015625	0.00223861	0.015625	0.00153148
0.0078125	0.000313903	0.0078125	0.000265754

Cuadro 5.1: El Cuadro contiene los errores, en la seminorma H^1 , del gradiente reconstruido para refinamiento uniforme y mallas uniformes.

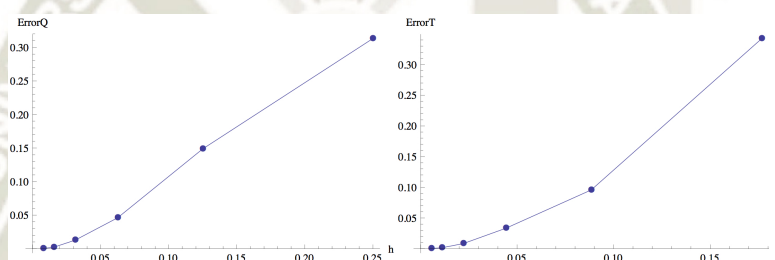


Figura 5.8: Gráficas de los errores en la seminorma H^1 para las normas de los gradientes reconstruidos para el caso de refinamientos uniformes.

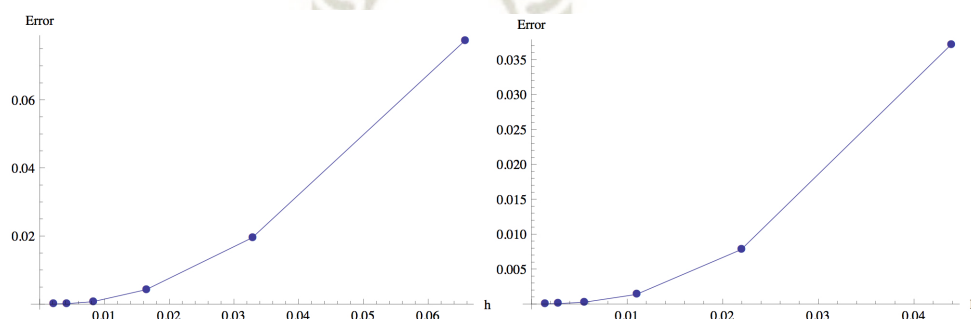


Figura 5.9: Para las mallas no regulares y con refinamiento uniforme (h medio). El primer gráfico corresponde a la malla de cuadriláteros y el segundo para triángulos.

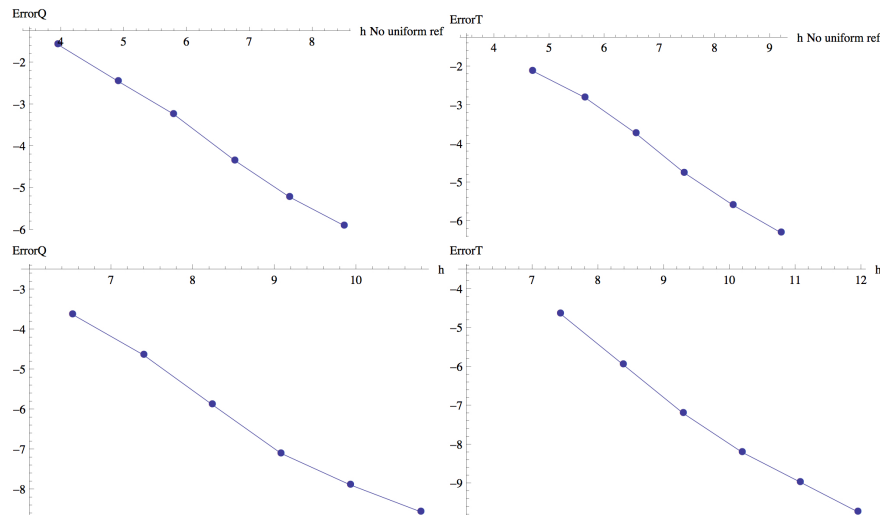


Figura 5.10: Gráficas de los errores en la seminorma H^1 ($\text{Log} \times \text{Log}$) para las normas de los gradientes reconstruidos para el caso de refinamientos no uniformes, y para las mallas regulares (arriba) y no regulares (abajo).

utilizando el número de elementos para los valores de los errores. Ahora, cuando generamos los gráficos de los errores de refinamiento uniforme tenemos una convergencia lineal, lo mismo está ocurriendo en el caso de refinamiento no uniforme, pues el tamaño de los elementos menores en ambos casos es el mismo.

En la Figura 5.10, se presentan las gráficas de los errores en la seminorma H^1 para las normas de los gradientes reconstruidos utilizando refinamientos no uniformes y refinando los elementos próximos a la circunferencia \mathcal{C} . Las curvas son del tipo $\text{Log} \times \text{Log}$, es decir, relacionan el logaritmo del número de grados de libertad con el logaritmo de error calculado. Dado que se está utilizando h -adaptatividad se presenta una curva con convergencia exponencial para todos los casos. Los dos primeros corresponden a las mallas regulares de cuadriláteros y triángulos, y los dos últimos a las mallas oriundas de las mallas iniciales no regulares.

Para comparar los resultados, se realiza una traslación del origen al punto $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ y a partir de esa traslación consideramos como variable de las abscisas la distancia del centro de cada elemento al nuevo origen (radio). Para cada radio correspondiente a cada centro calculamos tres valores escalares: la norma del gradiente reconstruido, el producto escalar del gradiente reconstruido por el vector v unitario desde el origen al centro de cada elemento, y por último el producto escalar del gradiente reconstruido por el vector normal a v .

Los resultados esperados para el primer caso, es una curva con el máximo valor en

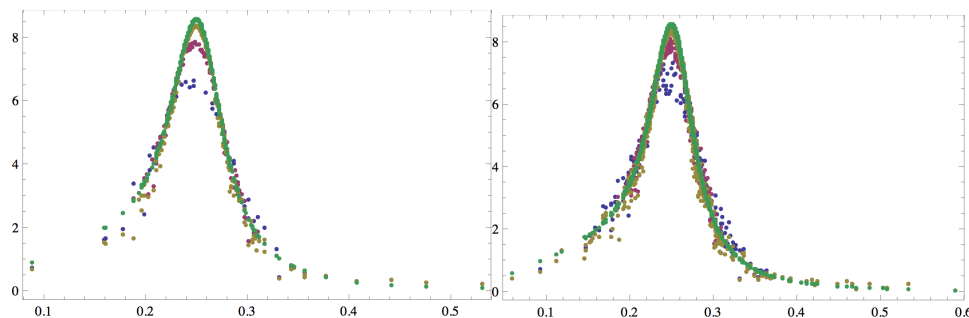


Figura 5.11: Gráfico comparativo de las normas de los gradientes reconstruidos, nivel 3(azul), 4(rojo) y 5(verde), con la norma del gradiente exacto (violeta). Cuadriláteros y triángulos en ese orden.

$r = 0,25$. En el segundo caso esperamos valores negativos, pues el producto escalar será de vectores con dirección contraria y que tendrá su máximo valor también en $r = 0,25$. En el tercer caso, esperamos valores próximos de cero, pues el gradiente y el vector ortogonal a v deberá ser casi ortogonales.

En la Figura 5.11, se presenta el gráfico comparativo de las normas de los gradientes reconstruidos para una malla refinada de nivel 3, 4 y 5, con el valor de la norma del gradiente exacto, sobre cada valor del radio del centro de cada elemento desde el punto $(0,5,0,5)$. El primer gráfico corresponde a la utilización de elementos cuadriláteros y el segundo para elementos triangulares.

En la Figura 5.12 se presenta el gráfico comparativo del producto escalar de gradiente reconstruido por el vector v , para una malla refinada de nivel 3, 4 y 5, con el valor del producto escalar del gradiente exacto por el vector v de cada centro del elemento. El primer gráfico corresponde a la utilización de elementos cuadriláteros y el segundo para elementos triangulares.

Por último, en la Figura 5.13 se presenta el gráfico comparativo del producto escalar del gradiente reconstruido por el vector ortogonal a v , para una malla refinada de nivel 3, 4 y 5, con el valor del producto escalar del gradiente exacto por el vector ortogonal a v de cada centro del elemento. El primer gráfico corresponde a la utilización de elementos cuadriláteros y el segundo para elementos triangulares.

5.4. Sobre la estrategia *hp*-auto-adaptativa

Habiendo verificado la eficacia de la reconstrucción del gradiente por el método de los mínimos cuadrados, se define en la presente sección, una estrategia para refinamiento

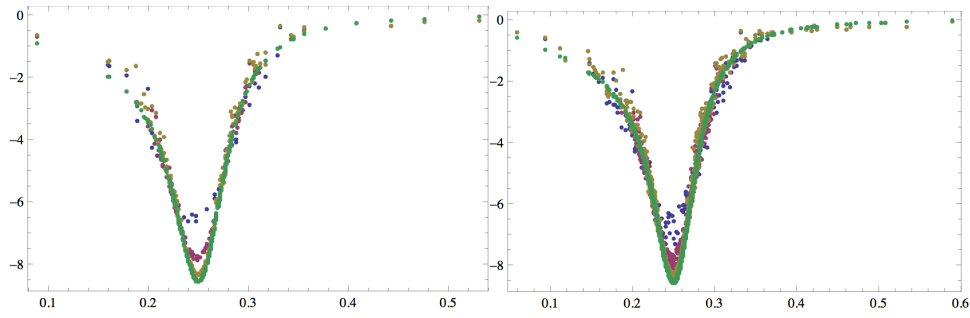


Figura 5.12: Gráfico comparativo del producto escalar del gradiente reconstruido por el vector v . Niveles 3, 4 y 5. Cuadriláteros y triángulos.

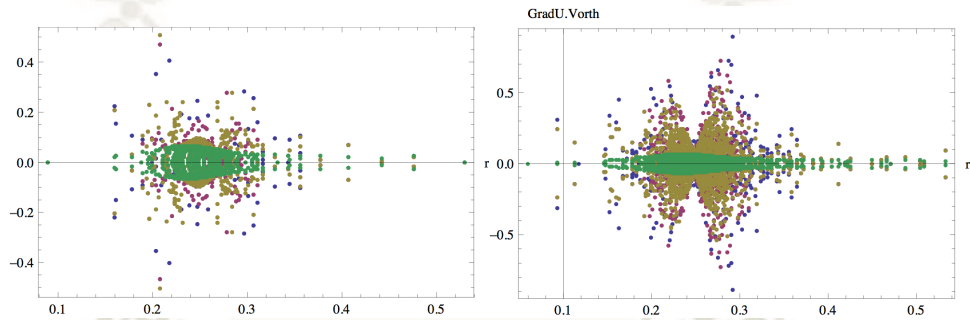


Figura 5.13: Gráfico comparativo del producto escalar del gradiente reconstruido por el vector ortogonal a v . Niveles 3, 4 y 5. Cuadriláteros y triángulos.

hp automático, en el cual se pueda cambiar el método numérico y refinar las mallas tanto en h y/o p simultáneamente, a partir de las informaciones de los vectores de gradiente reconstruidos comparados con los vectores de los gradientes aproximados.

Dado un modelo matemático en ecuaciones diferenciales parciales, se representa por u sobre el dominio Ω a una función que satisface el modelo y es llamada solución del modelo (conocida o desconocida). El gradiente de esta función (si existe) es denotada por ∇u . Por lo expuesto en las secciones anteriores, obteniendo la formulación débil del modelo, se puede resolver numéricamente utilizando algoritmos de elementos finitos con espacios de aproximación de funciones continuas o discontinuas. Se denota por $\varphi_i(\mathbf{x})$ a las funciones de una base del espacio finito dimensional de funciones aproximantes. En cualquiera de los casos, se obtiene una solución aproximada representada por

$$u_h = \sum_{i=0}^{n-1} u_h^i \varphi_i$$

y definida sobre todo el dominio del modelo. También, utilizando los gradientes de las

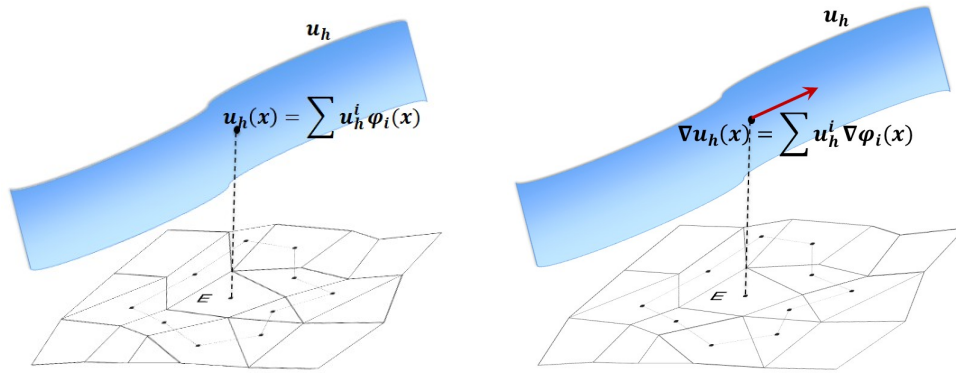


Figura 5.14: A la izquierda, detalle de la solución u_h . A la derecha detalle del gradiente de la solución aproximada ∇u_h .

funciones base, se calcula el gradiente de esta función aproximada

$$\nabla u_h = \sum_{i=0}^{n-1} u_h^i \nabla \varphi_i.$$

En la Figura 5.14, está un esbozo de la solución aproximada y de su gradiente en el punto \mathbf{x} , que es obtenido a partir de la aplicación de algoritmos en elementos finitos que utilizan espacios de aproximación de funciones continuas o discontinuas.

Aunque se obtenga una solución u_h suficientemente aproximada de la función u , generalmente el gradiente de esta función aproximada no lo estará del gradiente de la función ∇u . Por esa razón, si se quisiera analizar por ejemplo, cual es la grandeza del gradiente de la función aproximada para determinar cuan inclinada es la solución, es adecuado utilizar otra información relacionada al gradiente y comparar con el obtenido. Si por ejemplo, la norma de este vector indica que la inclinación es superior a 76° , lo que sugiere pasar del método H^1 -conforme para el uso del método Galerkin discontinuo, es mejor tener otra información similar que nos confirme en parte la existencia de esa fuerte inclinación.

Esa segunda información será tomada de la exposición realizada en la sección anterior. En ella se ha decidido por reconstruir el gradiente a partir de los valores de la solución aproximada en los elementos vecinos conectados a un elemento en estudio. Considerando que fue aplicada la reconstrucción del gradiente utilizando el método de los mínimos cuadrados obteniéndose $\nabla \tilde{u}$, llamada gradiente reconstruido.

En la Figura 5.15, al lado izquierdo se ha diseñado un esbozo de la función linealizada considerando el punto \mathbf{x} fijo. En la figura del lado derecho está el vector del

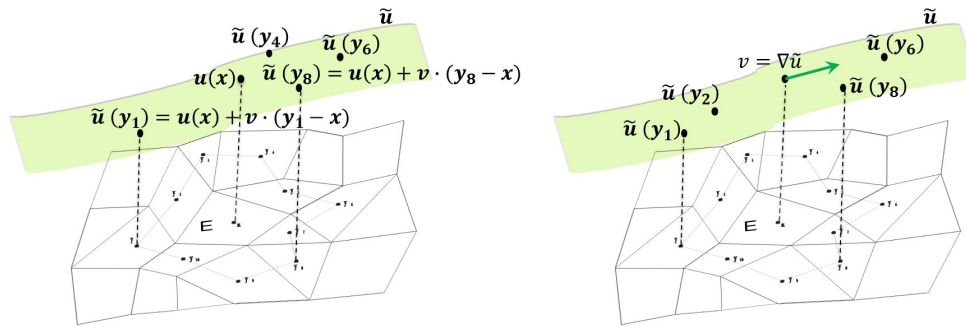


Figura 5.15: A la izquierda, detalle de la función linealizada desde los centros de masa de los vecinos \tilde{u} . A la derecha detalle del gradiente reconstruido $\nabla \tilde{u}$ con los valores de la linealización.

gradiente reconstruido utilizando el método de los mínimos cuadrados, basado en el uso de los valores de la función aproximante u_h sobre cada centro de masa de los elementos vecinos al elemento E .

Así tenemos en el centro de masa de cada elemento E de la malla, dos vectores aproximados al gradiente de la función u , gradiente de la solución aproximada y gradiente reconstruido. Estos dos vectores pueden ser comparados de diversas maneras para determinar si es necesario aplicar alguna técnica de adaptatividad y realizar una nueva resolución numérica para obtener una solución mejor aproximada.

En la Figura 5.16, se observan las dos aproximaciones al vector gradiente ∇u . De allí se pueden obtener las siguientes medidas, las normas de los vectores obtenidos, la diferencia entre esas normas y la medida del ángulo que forman los dos vectores. Con estas cuatro medidas se define una estrategia de adaptatividad numérica (utilización del método de aproximación), h -adaptatividad y p -adaptatividad.

A continuación se construye la estrategia adaptativa definida para ser aplicada en cada elemento de la malla.

Se consideran tres items de medidas para determinar una buena reconstrucción:

- Calcular las normas de los vectores de las aproximaciones al gradiente, es decir $\|\nabla u_h\|$ y $\|\nabla \tilde{u}\|$. Esas normas indicarán si hay la posibilidad de existir un gradiente grande de la función u , lo que puede indicar también un posible surgimiento de alguna singularidad. Así se recomendará aplicar el método de Galerkin discontinuo además de refinar el entorno del elemento con probable gradiente superior a m . El valor de $m = 6$ indica una inclinación superior a 80° . Este último valor se ha mostrado bastante adecuado para servir de indicador de la necesidad de

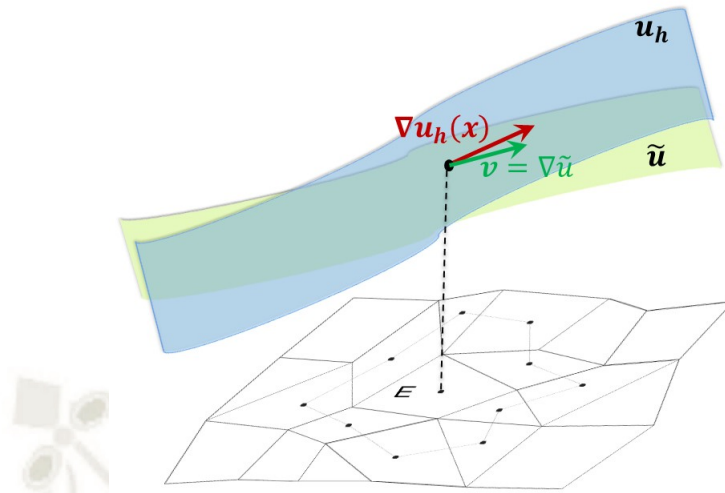


Figura 5.16: Se presentan los dos vectores que aproximan al gradiente de la función u , es decir, el vector del gradiente aproximado ∇u_h y el vector gradiente reconstruido $\nabla \tilde{u}$.

cambiar de método numérico para una nueva resolución (caso de modelos estacionarios), o para la resolución en los próximos pasos de la simulación (caso de modelo transitorio). El valor de $m = 4$ indica una inclinación superior a 76° y puede ser útil dependiendo del conocimiento del usuario del método adaptativo propuesto.

- Calcular la diferencia de las normas de los vectores $||\nabla u_h|| - \|\nabla \tilde{u}\|$ se considera como la grandeza de un estimador de error. Cuanto mayor sea esa diferencia significa que la aproximación debe ser pobre y es necesario mejorar con h -refinamiento (elementos menores) y/o p -refinamiento disminuyendo el orden de los polinomios base.
- Determinar el ángulo entre los dos vectores. Si los vectores gradientes están apuntando para direcciones muy diferentes, significa que la aproximación debe ser pobre. Para una buena aproximación se espera un ángulo $\angle(\nabla u_h, \nabla \tilde{u}) \equiv 0$.

Se asume que la medida del ángulo (tercera medida) entre los vectores gradientes aproximados es prioritaria, porque los vectores gradientes deben apuntar en la dirección de la mayor variación, luego ambos deberían formar un ángulo casi nulo.

La segunda medida indica que las inclinaciones de ambos vectores es muy diferente. Con los valores de la primera y segunda medidas se define la estrategia para aplicar hp -adaptatividad.

La primera medida será utilizada para determinar una posible región donde puede aparecer singularidades (un gradiente grande detectado por los dos gradientes informa la posibilidad que puede continuar aumentando, surgiendo una singularidad), esto significa que es adecuado el uso de funciones discontinuas para representar la solución aproximada, evitando en parte el surgimiento de oscilaciones en las funciones continuas para adecuarse al fuerte gradiente o salto. Esto es adaptar el espacio de aproximación, por lo tanto cambiar el método numérico entre la formulación H^1 -conforme y la formulación Galerkin discontinuo (multi-numérico).

La estrategia propuesta es validada en el próximo capítulo con el uso en la simulación numérica de dos leyes de conservación. La primera un cono rodando alrededor del centro de un cuadrado. La segunda son las ecuaciones de Euler para un canal en el que corre un fluido de forma constante y en un segundo momento entra por la pared de la derecha otro fluido con densidad y velocidades diferentes, generando un choque oblicuo que tiende a un estado estacionario.

5.5. Descripción de la estrategia hp -adaptativa automática

Resumiendo lo expuesto en las anteriores secciones, se describe la estrategia multi-numérica y hp -auto-adaptativa propuesta. Para esto se define los siguientes conceptos sobre adaptatividad a ser aplicada sobre cada elemento finito:

- h^+ -refinamiento (h^+ -refine): cuando se subdivide un elemento finito en elementos menores (elementos hijos), se dice que se está realizando un aumento de nivel de h -refinamiento.
- h^- -refinamiento (h^- -refine): cuando se engrosa varios elementos finitos (elementos hijos) pasando para un elemento mayor (elemento padre), se dice que se está realizando una disminución de nivel de h -refinamiento.
- p^+ -refinamiento (p^+ -refine): cuando se aumenta el orden de los polinomios base en un elemento finito, se dice que se está realizando un incremento de p -refinamiento.
- p^- -refinamiento (p^- -refine): cuando se disminuye el orden de los polinomios ba-

se en un elemento finito, se dice que se está realizando un decremento de p -refinamiento.

El algoritmo del método propuesto implementa el método de Rothe utilizando las herramientas computacionales de la biblioteca NeoPZ y las implementadas en la presente tesis por el autor. El algoritmo se ejecuta para resolver un modelo matemático del tipo ley de conservación con condiciones frontera y condición inicial que determinen un problema bien puesto.

En la primera actividad del algoritmo se realiza la lectura de los datos necesarios para construir la malla del dominio del modelo y los polinomios base para los espacios de aproximación locales en cada elemento finito.

La segunda actividad es la lectura de los datos definidos por el usuario para definir el orden del esquema Runge-Kutta, los coeficientes CFL y del término difusivo, los tiempo inicial y final del dominio en la variable tiempo, y todos los valores necesarios para la hp -adaptatividad. Estos valores para la hp -adaptatividad automática son los valores limite para reconocer cuando las medidas *medida2* y *medida3* son pequeños, medios o grandes. La *medida3* solo considera dos intervalos de valores, por lo tanto debe definirse un único valor limite *SmallCosLimit* (será denotado por *SC*), este valor indica hasta que valor de coseno se considera el ángulo pequeño, por lo tanto debe ser próximo de 1 pero menor:

- Si $SmallCosLimit < medida3 \leq 1$ el ángulo es considerado pequeño.
- Si $-1 \leq medida3 \leq SmallCosLimit$ el ángulo es considerado grande y necesita aplicar refinamiento.

La *medida2* considera tres intervalos de valores por lo que se necesita dos valores limite: *SmallDiffGrad*, *MediumDiffGrad* y los intervalos son definidos de la siguiente manera:

- Si $0 \leq medida2 < SmallDiffGrad$ significa que los vectores tienen módulos muy próximos.
- Si $SmallDiffGrad \leq medida2 < MediumDiffGrad$ representa que la diferencia de tamaño de los vectores es próxima pero no pequeña.

- Si $MediumDiffGrad \leq medida2$ representa que existe una pésima aproximación y debe aplicarse el mayor refinamiento posible, en h y p .

El valor $SmallDiffGrad$ será denotado por SG y el valor $MediumDiffGrad$ será denotado por MG .

La tercera actividad, inicia un proceso iterativo a partir del tiempo inicial, determinando el paso de tiempo adecuado (por la condición CFL) hasta alcanzar el tiempo final solicitado.

En la primera iteración (siempre al comienzo) se ha definido el uso de la formulación débil H^1 -conforme (por su bajo costo computacional).

En cada paso de tiempo se aplica:

- Una formulación débil para obtener una solución aproximada u_h y consecuentemente un gradiente aproximado ∇u_h , conforme lo especificado en la sección anterior.
- La técnica de la reconstrucción de un gradiente por mínimos cuadrados obteniendo $\nabla \tilde{u}$.
- Para cada elemento finito se calcula las tres medidas con los dos gradientes calculados numéricamente:

a. Cálculo de $\|\nabla u_h\|$ y $\|\nabla \tilde{u}\|$ y se determina

$$medida1 = \begin{cases} 1 & \text{si } \|\nabla u_h\| > m \text{ y } \|\nabla \tilde{u}\| > m \\ 0. & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

b. Cálculo de $medida2 = \|\nabla u_h\| - \|\nabla \tilde{u}\|$

c. Cálculo de $medida3 = \cos(\angle(\nabla u_h, \nabla \tilde{u}))$.

- Con esas medidas se aplica el Cuadro (5.2) que define la estrategia multi-numérica y hp -auto-adaptativa.

Cuadro 5.2: hp -auto-adaptatividad numérica sobre las tres medidas

Condición	Acción 1	Acción 2	Acción 3
$medida1 = 0$	Habilita H^1 -conforme para la próxima iteración.		
$medida1 = 1$	Habilita Galerkin discontinuo (GD) para la próxima iteración.	h^+ -refine	p^- -refine
$SC < medida3 \leq 1$ y $0 \leq medida2 < SG$	h^- -refine	p^+ -refine	
$SC < medida3 \leq 1$ y $SG \leq medida2 < MG$	p^+ -refine		
$SC < medida3 \leq 1$ y $MG \leq medida2$	h^+ -refine		
$-1 \leq medida3 \leq SC$ y $0 \leq medida2 < SG$	h^+ -refine		
$-1 \leq medida3 \leq SC$ y $SG \leq medida2 < MG$	h^+ -refine	Si p es el mayor, hacer p^- -refine, caso contrario no hace nada	
$-1 \leq medida3 \leq SC$ y $MG \leq medida2$	h^+ -refine	p^- -refine	

Capítulo 6

Validación numérica del método propuesto

En el presente capítulo se presentan dos modelos matemáticos que envuelven dos leyes de conservación. La ley de conservación en la sección (2.5.2) que es una ecuación diferencial parcial con coeficientes variables, y la ley de conservación de Euler en la sección (2.5.1) con un problema de choque que tiene fuertes discontinuidades. En ambos modelos se ha aplicado el método propuesto y se ha obtenido resultados bastante estables, robustos y eficientes, lo que valida el método propuesto.

En ambos modelos se inicia con el uso de los espacios de aproximación de funciones continuas (se mostró que tiene un costo computacional mucho menor) y se genera una malla suficientemente refinada, que considera subdividir el dominio en la variable x haciendo 64 segmentos y en la variable y se hace una subdivisión de tal forma a tener inicialmente cuadriláteros del tipo cuadrado o rectangulares de lo máximo el doble del tamaño de los segmentos de la variable x . También para ambos modelos se inicia la simulación numérica utilizando orden $p = 2$ en los polinomios base del espacio de funciones continuas locales sobre los elementos finitos. En las próximas dos secciones se describe los modelos por separado, presentando el comportamiento de las soluciones numéricas y la adaptatividad automática que sucede al aplicar el método propuesto.

En el primer modelo se realizaron dos simulaciones numéricas. Esto porque, en una primera simulación numérica, el valor de $m = 6$ que se especificó en la simulación no sucedió el cambio de funciones continuas para funciones discontinuas. Es decir, que en toda la rotación del cono no se presentó un gradiente mayor a esa pendiente. Es decir, la

simulación toda se realizó con funciones continuas y se muestra con figuras correspondientes, la evolución de una rotación completa del cono alrededor del origen. También se muestra la *hp*-adaptatividad que funciona automáticamente (con decrecimiento del orden de los polinomios base y subdivisión de los elementos finitos con mayor gradiente, y también con incremento del orden de los polinomios base y el engrosamiento de los elementos finitos con gradiente pequeño). Sin embargo, como no se presentó el cambio de funciones continuas para discontinuas, se realizó una nueva simulación numérica que inició con $m = 6$ para observar nuevamente el uso de los espacios de funciones continuas, pero en el tiempo $t = \frac{410\pi}{407} \equiv \pi$, se forzó el cambio en el código para $m = 3$ y el esquema funcionó adecuadamente, pasando inmediatamente para el uso de espacios de funciones discontinuas. Se muestran figuras bien cercanas al cono para visualizar de forma evidente las discontinuidades en la superficie solución en las interfaces de los elementos finitos.

En el segundo modelo, se tiene un fluido transitando de forma constante en un canal (densidad, velocidades, presión y energía constantes). Después de una unidad de tiempo, se abre una compuerta lateral del canal y entra un fluido también con variables conservadas constantes pero con mayor densidad. Inmediatamente se genera un choque de los fluidos y por lo tanto aparece una fuerte discontinuidad en la frontera del canal donde se abrió la compuerta. El esquema numérico detectó automáticamente el fuerte gradiente mayor que $m = 6$ y por lo tanto inició el trabajo de simulación del choque con un espacio de funciones discontinuas. En la sección correspondiente se presentan las figuras de la simulación numérica de las discontinuidades avanzando para el interior del canal hasta llegar a la pared contraria de la compuerta donde se refleja (rebota) el choque (hay una condición Neumann zero - simulando que no puede pasar flujo por esa frontera). En ese rebote del choque se produce una nueva discontinuidad que supera a la anterior, teniendo así dos discontinuidades transitando por el canal hasta llegar a un estado estacionario. El estado estacionario se alcanza en tres unidades de tiempo, $t = 3$, lo que realmente da la captura del choque en dos unidades de tiempo, dado que se utilizó una unidad al inicio con el fluido transitando de forma constante para verificar el uso de funciones continuas y su modificación para el uso de funciones discontinuas. La *hp*-adaptatividad también funcionó de forma estable y eficiente refinando los elementos finitos sobre los que se presentaba las discontinuidades y con disminución del orden

polinómico. En los elementos finitos que estaban en regiones de suavidad los elementos finitos fueron automáticamente engrosados, disminuyendo considerablemente el número de grados de libertad.

6.1. Rotación de un cono

En esta sección se presenta los resultados numéricos para el modelo de un cono en estado de rotación aplicando el nuevo método propuesto, que es multi-numérico y con *hp*-adaptatividad automática. Para las simulaciones numéricas se ha utilizado el valor de $CFL = 0.2$ y el valor del coeficiente del término difusivo igual a 0.6. La determinación de estos valores sigue las indicaciones en la tesis (Calle, 2002).

El modelo considera la ley de conservación (2.6), sobre el siguiente dominio: $D = [0, 2\pi] \times \Omega$, donde $\Omega = \{\mathbf{x} = (x, y) / -5 \leq x \leq 5, -5 \leq y \leq 5\}$. El modelo satisface la condición de frontera:

$$u(t, \mathbf{x}) = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad \forall t \in [0, 2\pi]$$

y la condición inicial:

$$u(0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{5}{2} \left(1 + \cos\left(\frac{2\pi}{3} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|\right)\right) & \text{si } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| \leq \frac{3}{2} \\ 0. & \text{si } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| > \frac{3}{2} \end{cases}$$

donde $\mathbf{x}_0 = (0, \frac{5}{2})$. Es decir, el cono tiene centro en \mathbf{x}_0 y radio igual a $\frac{3}{2}$ cm.

La Figura 6.1 presenta a la izquierda el cono en su posición inicial y el refinamiento inicial realizado, donde $h = \frac{5}{32}$, lo que significa que el dominio se ha dividido en 64 intervalos, tanto en x cuanto en y . A la derecha también se presenta el cono en su posición inicial pero ahora con el orden de los polinomios en todos los elementos finitos, que en el caso es $p = 2$. Se inicia utilizando un espacio de aproximación de funciones continuas, que es el espacio de aproximación por defecto y que cambiará para funciones discontinuas solo cuando se tenga algún gradiente en cualquier parte del dominio superando el valor de $m = 6$, conforme ha sido implementado en el código.

La Figura (6.2) deja en evidencia la evolución de la rotación del cono tomando como centro el origen. Se presenta el cono en los tiempos:

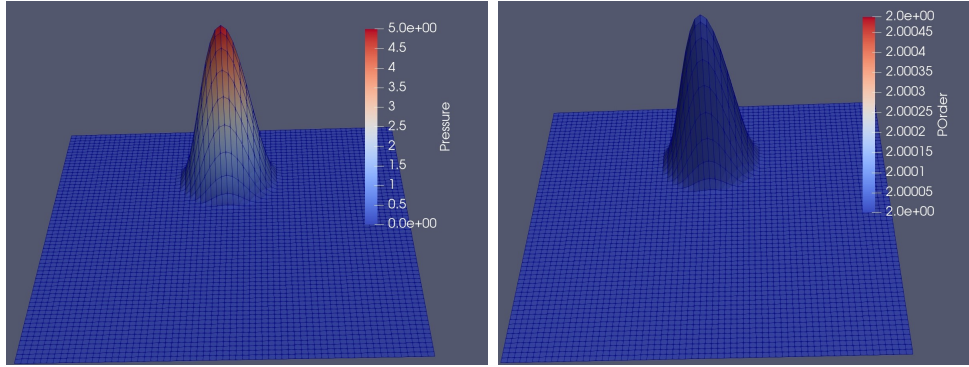


Figura 6.1: Cono en su posición inicial mostrando el refinamiento inicial de la malla $h = \frac{5}{32}$ y el orden de los polinomios base $p = 2$.

$$t_0 = 0, t_1 = \frac{\pi}{2}, t_2 = \frac{410\pi}{407} \text{ y } t_3 = 2\pi.$$

Las figuras presentan el refinamiento h^+ que acompaña el cono, que es el máximo nivel de refinamiento que fue permitido en el código, nivel 5, que representa $h = \frac{5}{64}$. Por otro lado, en las áreas donde el gradiente es nulo, el esquema realizó refinamiento h^- llegando al nivel de engrosamiento máximo que fue configurado en el código, nivel 1, que representa $h = \frac{5}{4}$.

La Figura (6.3) presenta el hp -refinamiento automático después de 6 pasos de tiempo, es decir en el tiempo $t = \frac{6}{407}\pi$. En la figura de la izquierda está evidente el h -refinamiento realizado, h^- -refine en los elementos con gradiente casi nulo, h^+ -refine en los elementos con gradiente mayor al límite establecido. En la figura de la derecha se presenta el p -refinamiento realizado, p^+ -refine en los elementos con gradiente casi nulo llegando a $p = 4$ y el p^- -refine en los elementos con gradiente considerado grande llegando hasta $p = 1$.

En la Figura (6.4) se muestran para cada tiempo mencionado anteriormente un par de figuras, ambas con elevación del cono, en la primera (izquierda) el cono con el h -refinamiento y la segunda (derecha) con el p -refinamiento. Se informa que se utilizó como el orden de polinomio mínimo $p = 1$ y como el máximo $p = 4$, y para el h refinamiento, el nivel mínimo es 1 y el nivel máximo es 5.

Conforme lo informado anteriormente, en esa primera simulación no se presentó el uso de los espacios de funciones discontinuas, entonces se realizó una segunda simulación en la cual se estableció $m = 6$ al inicio de la simulación pero en el tiempo $t = \frac{410}{407}\pi$ (casi en el medio de la rotación) se modificó el valor para $m = 3$, inmediatamente se cambio automáticamente para el uso de las funciones discontinuas hasta el final de la rotación.

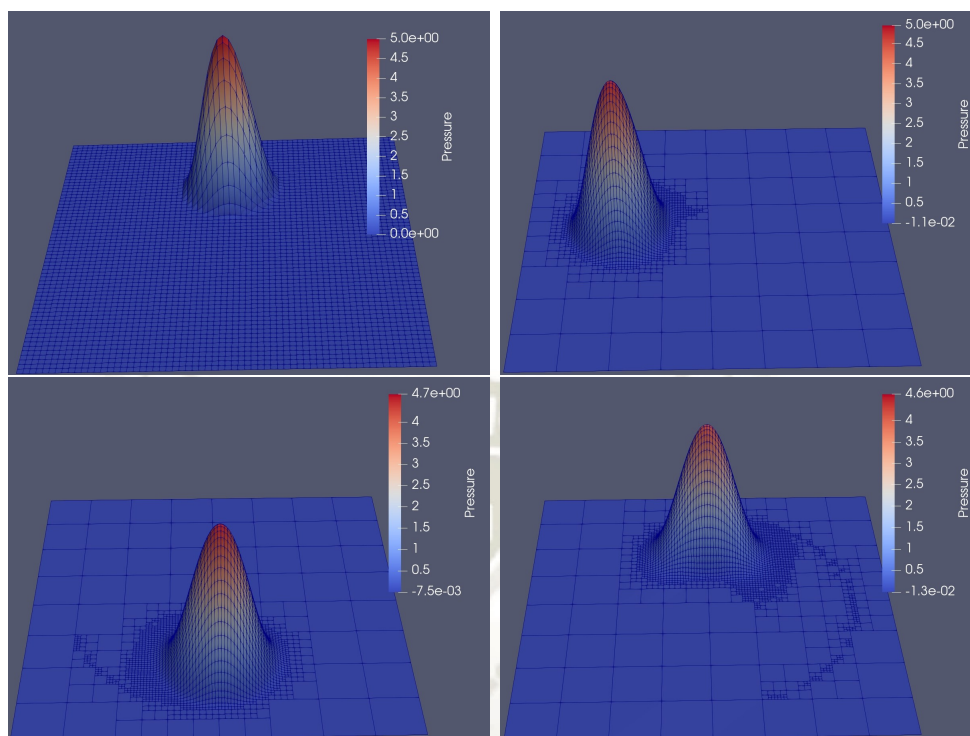


Figura 6.2: Evolución de la rotación del cono sobre la superficie. Altura del cono inicial es de 5 cm.

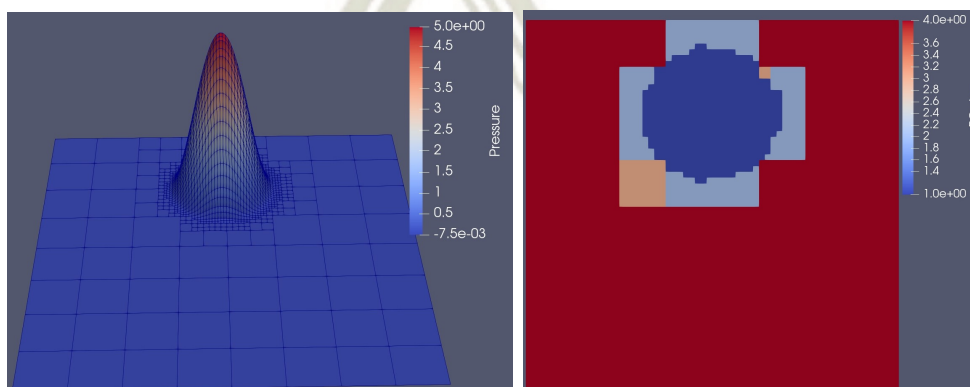


Figura 6.3: Refinamiento automático realizado hasta el tiempo $t = \frac{6}{407}\pi$.

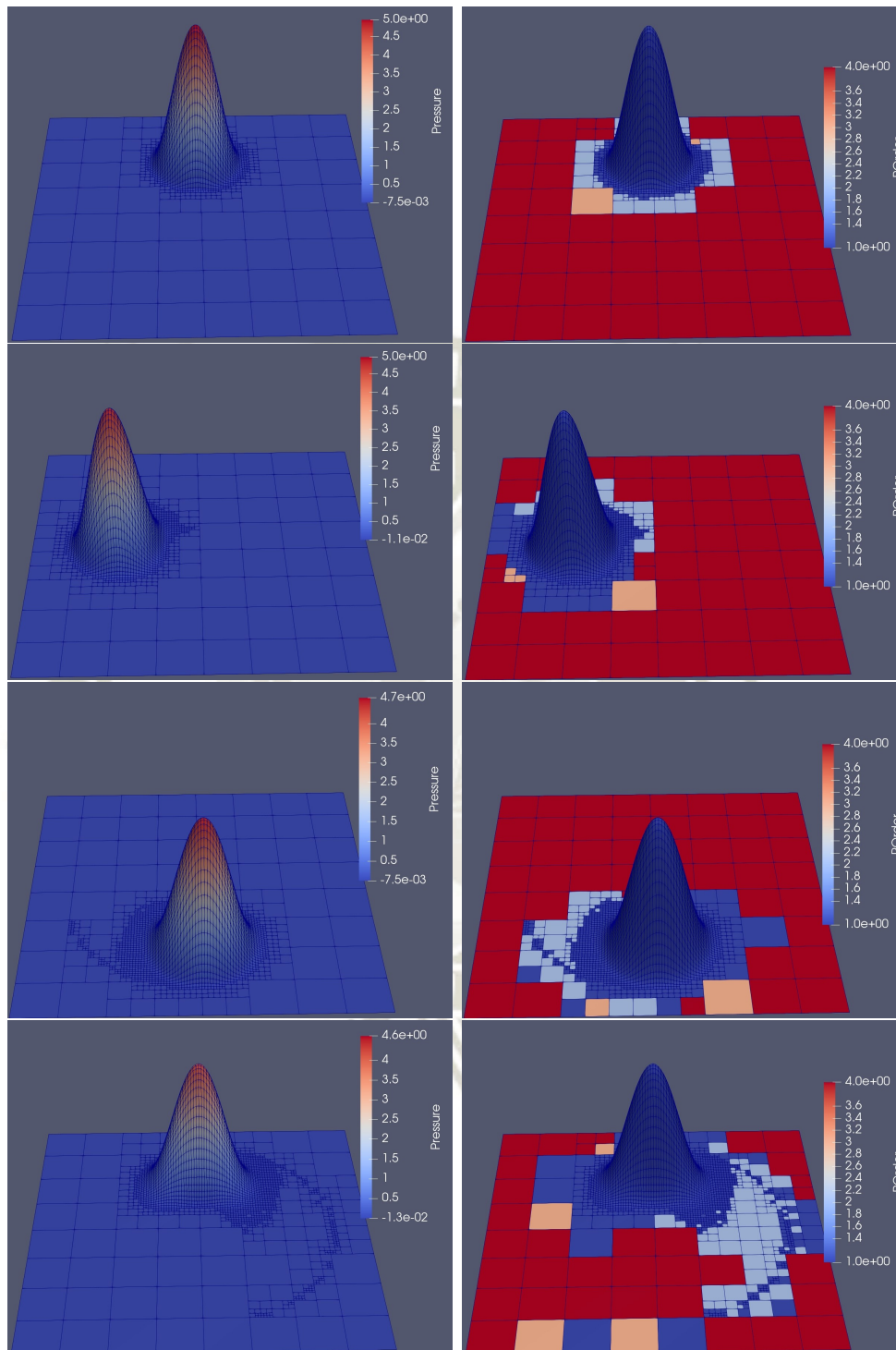


Figura 6.4: Refinamiento h y p automático en los tiempos $t_1 = \frac{6}{407}\pi$, $t_2 = \frac{\pi}{2}$, $t_3 = \frac{410\pi}{407}$ y $t_4 = 2\pi$.

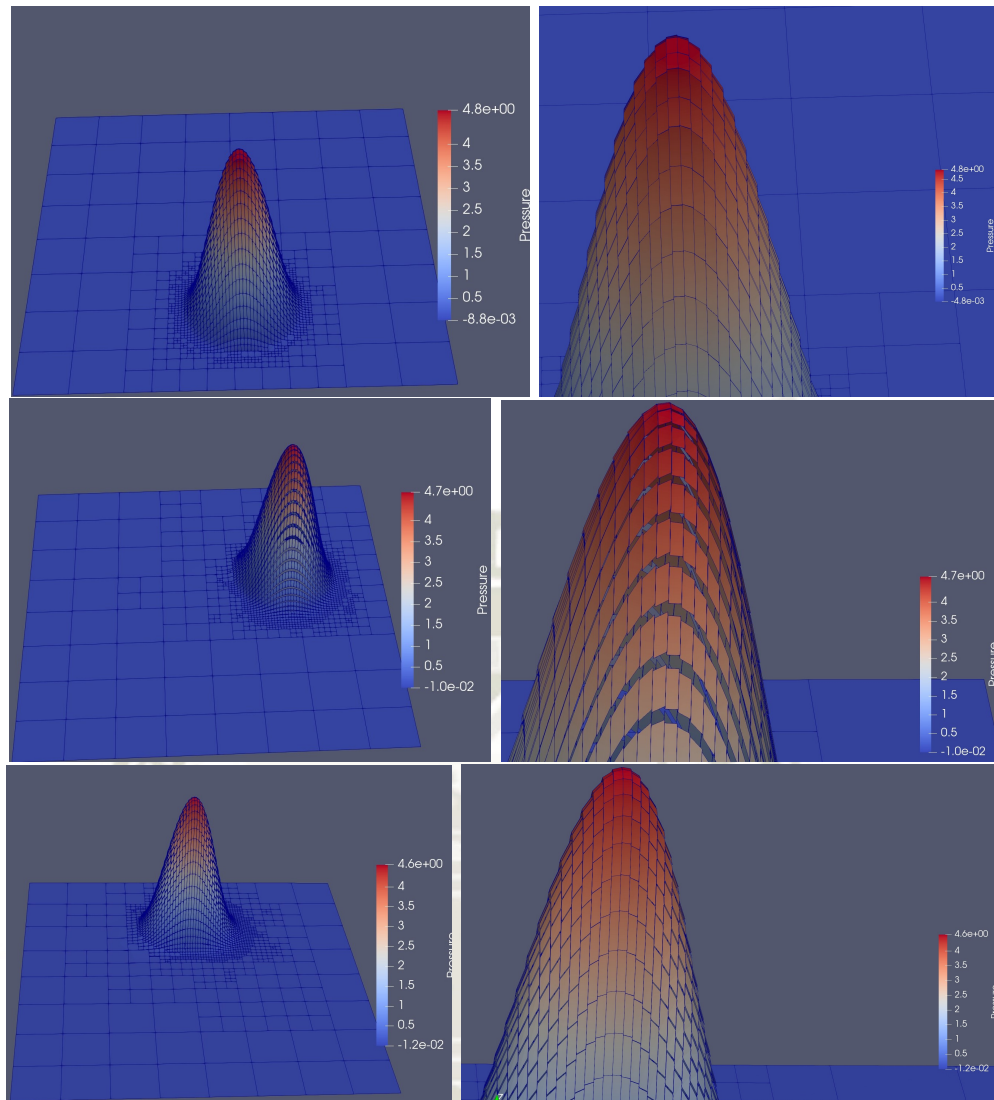


Figura 6.5: Refinamiento h en la elevación del cono y una vista cercana de la elevación para detalles de las funciones discontinuas obtenidas en $t_1 = \frac{410\pi}{407}$, $t_2 = \frac{690\pi}{407}$ y $t_4 = 2\pi$.

En la Figura (6.5) se muestra la elevación del cono con el h -refinamiento a la izquierda y a la derecha se presenta una aproximación al cono para observar las discontinuidades en las interfaces de los elementos finitos. El algoritmo se mostró estable y robusto. Debemos resaltar que el tiempo de ejecución fue mayor al tiempo de ejecución de la primera simulación debido al uso de funciones discontinuas que introduce cálculo del flujo en las interfaces de los elementos finitos, que son las integrales sobre las fronteras de los elementos.

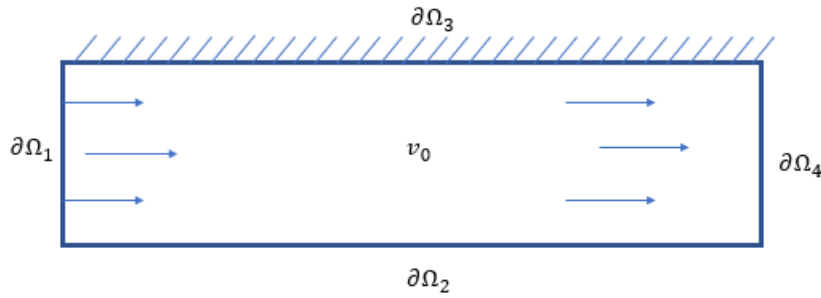


Figura 6.6: Dominio y estado inicial del problema.

6.2. Ecuaciones de Euler - Choque Reflectante

El presente modelo es de dificultad elevada en su resolución numérica por las discontinuidades que se presentan generando hasta tres niveles de las variables conservadas, con dos saltos de discontinuidad cuando se alcanza el estado estacionario. El simulador desarrollado con el esquema propuesto en la presente tesis, consigue representar las discontinuidades y los saltos de las variables conservadas, gracias a la *hp*-adaptabilidad y al término difusivo incrementado. Para las simulaciones presentadas se utilizó un valor de $CFL = 0.2$ y valor del coeficiente difusivo igual a 0.7, siguiendo las instrucciones de la tesis en (Calle, 2002).

Para resolver el problema del choque reflectante, se utiliza la ecuación de Euler considerada en la sección (2.5.1), para el caso $d = 2$, con las condiciones iniciales como en (Calle, 2002):

$$u_0 = \begin{cases} \rho_0 &= 1,0 \\ \rho_0 v_x &= 2,9 \\ \rho_0 v_y &= 0,0 \\ p_0 &= 0,714286 \end{cases}$$

El problema consiste en un fluido que transita por un canal con densidad, velocidades y presión constantes. El canal (dominio espacial) se muestra en la Figura 6.6.

La condición de frontera sobre $\partial\Omega_1$ es del tipo Dirichlet e idénticamente igual a u_0 . La condición de frontera sobre $\partial\Omega_2$ es también del tipo Dirichlet que vale cero al

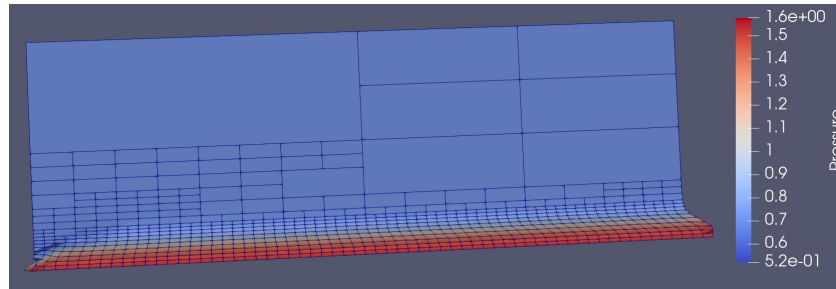


Figura 6.7: Detalle del momento en que ingresa al canal el segundo fluido con presión mayor.

comienzo (como pared), y cuando se abre la compuerta es igual a

$$u_1 = \begin{cases} \rho_1 &= 1,7 \\ \rho_1 v_x &= 2,61934 \\ \rho_1 v_y &= 0,50632 \\ p_1 &= 1,52819 \end{cases}$$

La condición de frontera sobre $\partial\Omega_3$ es del tipo Neumann, cuya derivada vale cero en la dirección de la normal exterior. Esto significa que no entra ni sale flujo por esa frontera, está simulando una pared que no se puede trasponer. Por último, sobre la frontera $\partial\Omega_4$ la condición es libre. Esto significa que el fluido fluye sin restricciones.

Entonces tenemos un fluido transitando de forma constante por el canal mostrado en la Figura 6.6 con variables conservadas igual a u_0 , desde el tiempo $t = -1$ hasta $t = 0$. Por ser nulo el gradiente de las variables conservadas durante esa unidad de tiempo, la malla no se altera y tampoco el espacio de funciones continuas utilizado en la aproximación numérica.

En el tiempo $t = 0$ se abre la compuerta lateral que es todo el lado $\partial\Omega_2$ y entra otro fluido con las variables conservadas en u_1 . Se observa que la densidad y la presión en el segundo fluido son mayores, por lo que se genera un choque y así aparece una fuerte elevación en la frontera del canal donde se abrió la compuerta. Este resultado se muestra en la Figura 6.7, donde se puede apreciar la fuerte elevación entre el fluido que estaba transitando en el canal y el nuevo fluido que está ingresando al canal, para la variable presión. Observar que la solución numérica hasta ese momento es generada por funciones continuas, dado que el espacio de aproximación se va a cambiar solo después de la detección del fuerte gradiente, pasando a utilizar funciones discontinuas.

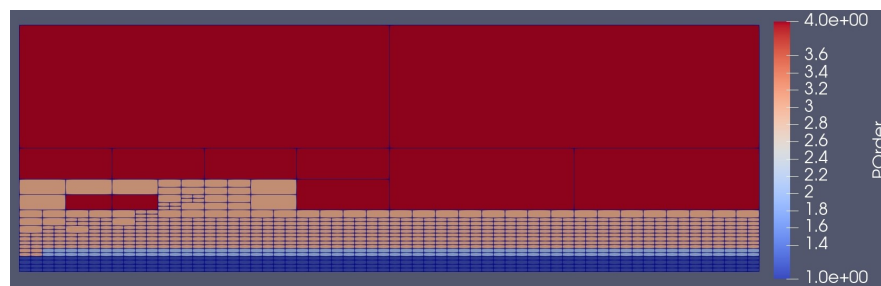


Figura 6.8: Detalle de la captura del choque al momento de ingresar el otro fluido, lo que genera inmediatamente el refinamiento de la malla en elementos pequeños junto a la compuerta y también la disminución del grado de los polinomios locales en esos elementos finitos.

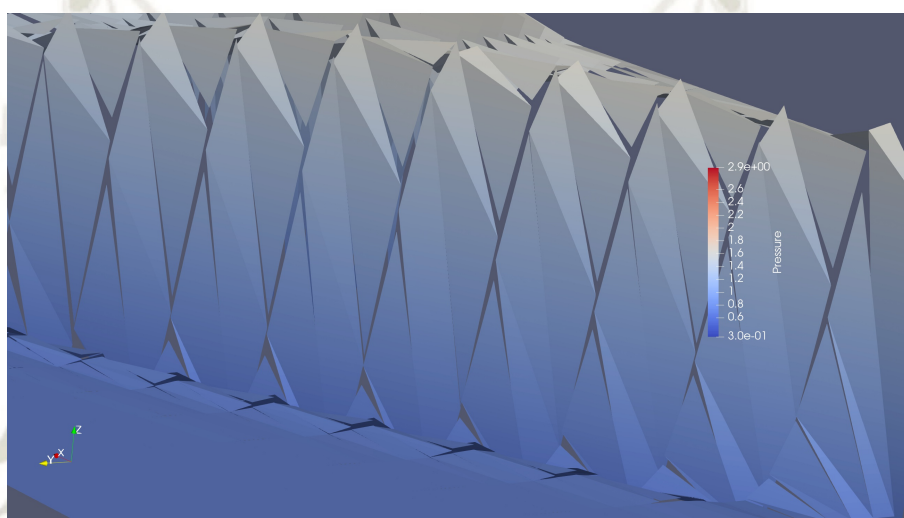


Figura 6.9: Detalle de la superficie (solución numérica) de la densidad aproximada con funciones discontinuas en los elementos finitos próximos a la compuerta en $t = 0.075$.

Cuando se detecta la entrada del nuevo fluido, es decir, la presencia de un fuerte gradiente, el espacio de aproximación de funciones continuas es sustituido por el espacio de aproximación de funciones discontinuas. Además, de forma automática realiza el *hp*-refinamiento, dividiendo en elementos menores los elementos finitos donde existe el fuerte gradiente y disminuyendo el grado de los polinomios aproximantes locales. Se presentan estos efectos en dos figuras, para la variable presión.

En la Figura 6.8, se observa en detalle el refinamiento de la malla que sucede inmediatamente a la detección del fuerte gradiente en la entrada del segundo fluido, es decir a lo largo de la frontera que simula la compuerta, y también se presenta el refinamiento de los grados de los polinomios locales sobre cada elemento finito. Y en la Figura 6.9 se realiza un zoom para visualizar la aproximación utilizando funciones discontinuas de la presión en la proximidad de la frontera compuerta.

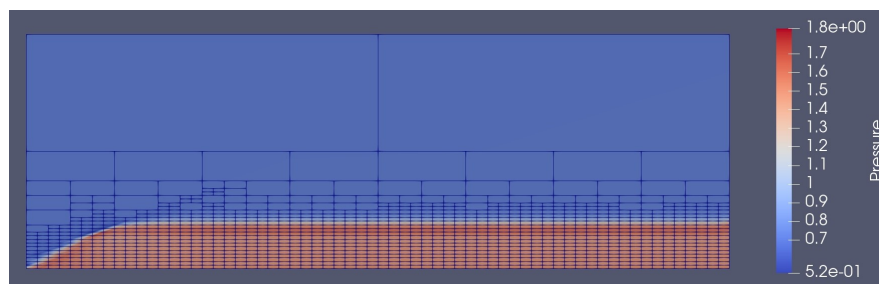


Figura 6.10: Detalle de la captura del choque en $t = 0.15$ mostrando el refinamiento de la malla con elementos divididos junto a la compuerta y engrosados los elementos con solo el primer fluido.

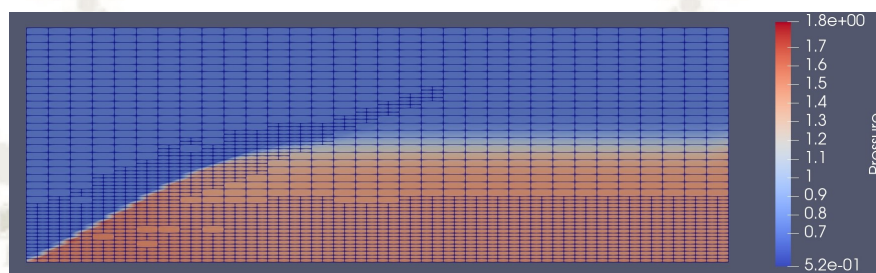


Figura 6.11: Detalle de la malla refinada para el choque en forma oblicua en $t = 0.23$.

Para mostrar de manera mas explícita el refinamiento de la malla a medida que el choque avanza en el interior del canal, se presenta el refinamiento en $t = 0.15$ en la Figura 6.10. Observe como va refinando los elementos que están en la trayectoria del choque oblicuo, además engrosa los elementos que estarán apenas con el primer fluido y no habrá interferencia del segundo fluido.

Con el continuo ingreso del segundo fluido para el interior del canal, se obtiene un choque (*salto de discontinuidad*) de las variables que se propaga hacia el interior del canal, pero de forma oblicua, dado que el primer fluido continua entrando también. En la Figura 6.11 se muestra el detalle de la malla refinada utilizada para la solución numérica del choque oblicuo en $t = 0.23$. En la Figura 6.12 se presenta el avance del salto (frontera entre los fluidos) de la presión en $t = 0.42$. Ese avance debe continuar de forma oblicua hasta llegar a la pared $\partial\Omega_3$.

El momento antes que el choque encuentre la pared y el momento luego después de rebotar en la pared, son presentados en la Figura 6.13. En la figura superior se muestra el momento en que el choque está llegando al encuentro con la pared en $t = 0.49$, y en la figura inferior está el momento en que la onda de choque está rebotando en la frontera que simula una pared en $t = 0.51$.

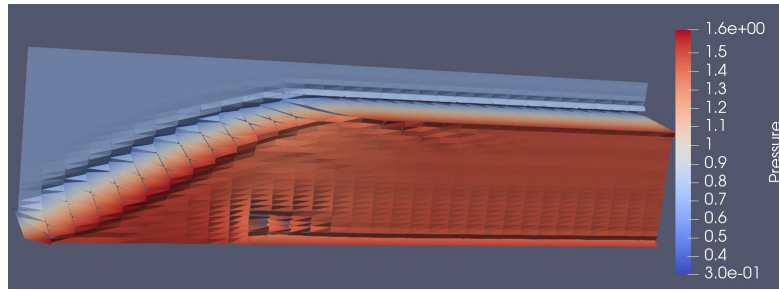


Figura 6.12: Avance del choque en forma oblicua en $t = 0.42$.

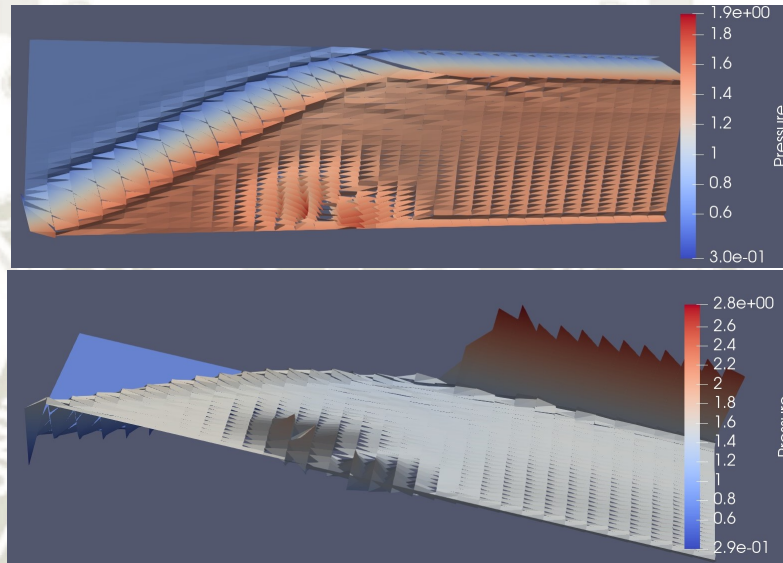


Figura 6.13: En la figura superior, momentos antes de chocar con la pared. En la figura inferior, momentos después de chocar con la pared e iniciar el rebote (reflejado).

Una vez que rebota el segundo fluido en la frontera $\partial\Omega_3$, se genera una segunda discontinuidad tal como se muestra en la Figura 6.14. Teniendo así dos discontinuidades transitando por el canal hasta llegar a un estado estacionario, con solución

$$u_2 = \begin{cases} \rho_2 & = 2,68728 \\ \rho_2 v_x & = 2,4014 \\ \rho_2 v_y & = 0,0 \\ p_2 & = 2,934 \end{cases}$$

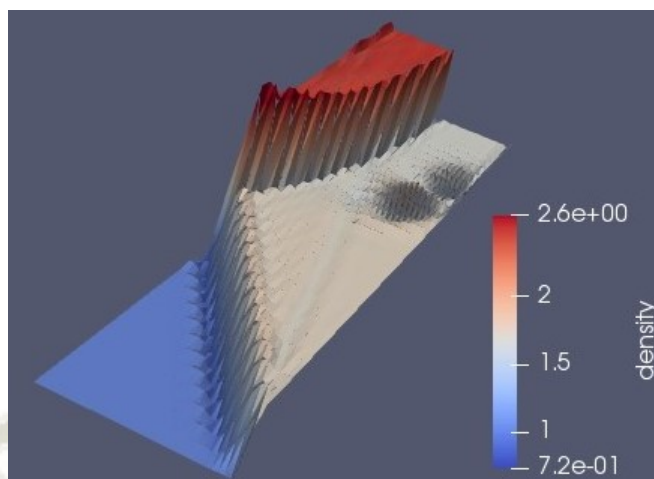


Figura 6.14: Choque que rebotó en la pared generando una nueva discontinuidad. Por lo tanto, se tiene dos saltos de discontinuidad, antes de llegar a la pared y después de rebotar en la pared.

Por último, se presentan las variables de densidad y presión en su estado estacionario. En la Figura 6.15 se coloca en evidencia la elevación de la solución numérica de la variable densidad que es conservada cuando alcanzó su estado estacionario. Y en la Figura 6.16 se expone la elevación de la variable presión cuando alcanzó su estado estacionario.

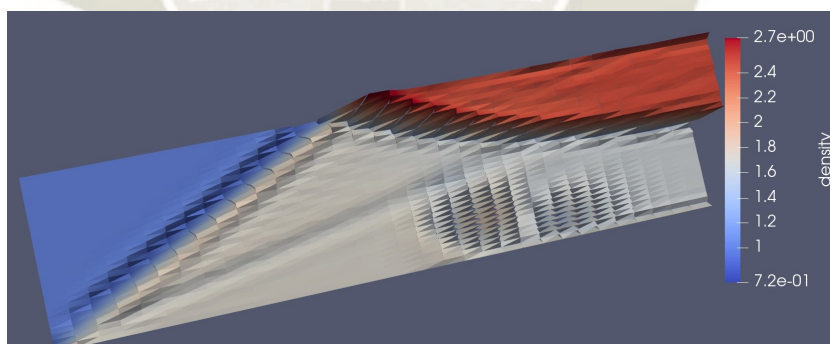


Figura 6.15: Solución numérica estacionaria en $t = 2$ para la variable de la densidad.

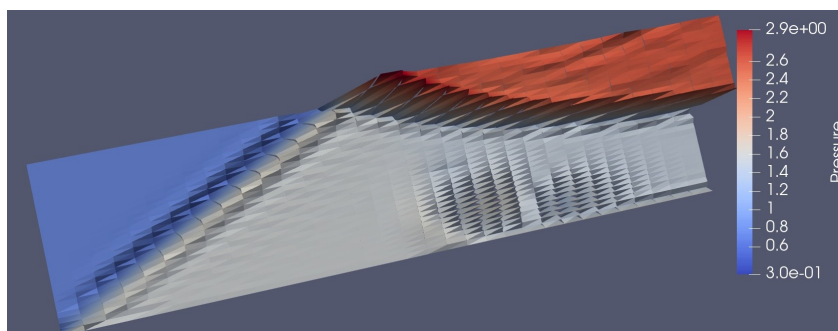


Figura 6.16: Solución numérica estacionaria en $t = 2$ para la variable de la presión.



Conclusiones

Se ha desarrollado un esquema multi-numérico hp - auto-adaptativo para resolver numéricamente leyes de conservación por el método de Rothe y formulaciones débiles en elementos finitos estabilizados con un término de difusividad implícita. El término de difusividad implícita es un operador de difusión del tipo streamline que estabiliza el esquema en el interior de los elementos finitos.

El método de Rothe nos permite discretizar el tiempo en intervalos adecuados y en esos intervalos se puede escoger la formulación numérica a ser utilizada para la resolución numérica en las variables del espacio. Desde ese punto de vista, se ha obtenido un método multi-numérico para las variables espaciales. En la presente tesis se ha trabajado con una formulación H^1 -conforme y una tipo Galerkin discontinuo (DG). Sin embargo se pueden aplicar otras formulaciones, como por ejemplo la formulación H^1 hibridizada o la formulación mas simple de volúmenes finitos.

Tomando como base el ambiente computacional NeoPZ se ha desarrollado el presente algoritmo utilizando el lenguaje de programación C++, orientado a objetos. Con este lenguaje, la abstracción de las ecuaciones diferenciales, en particular las leyes de conservación, se realiza de forma bastante simple. Sin embargo, la definición de la estrategia de adaptatividad requirió mucho trabajo computacional para analizar las diversas posibilidades de refinamiento y probablemente no hubiera sido posible llegar a una conclusión sin las facilidades que provee el paradigma de la programación a objetos.

Utilizando el simulador numérico desarrollado con base en el NeoPZ e implementaciones propias que desarrolle para la estimación del error y aplicar hp -adaptabilidad, se realizaron experimentos numéricos con el término difusivo explícito y no mostró estabilizar el método. Sin embargo, el término difusivo implícito utilizado, que convirtió el esquema en semi-implícito, fue determinante para estabilizar el esquema, mismo en el caso de utilizar números CFL próximos a la unidad.

Por otro lado, si el coeficiente difusivo es próximo de la unidad, la solución es suavizada más de lo necesario y acaba perdiendo aproximación pero el esquema es sumamente estable.

Utilizar el método propuesto con espacios de funciones continuas es muy barato computacionalmente cuando comparado con el uso de espacios de funciones discontinuas. La diferencia es grande, pero se justifica el uso de espacios de funciones discontinuas cuando la solución tiene discontinuidades, dado que en ese caso el uso de espacios de funciones continuas obtendrá soluciones con oscilaciones espurias. Cuando se utiliza una cantidad suficiente de difusividad implícita, las oscilaciones tienden a ser pequeñas, pero no desaparecen.



Recomendaciones

El método propuesto se aplicará en modelos de tres dimensiones. Para esto, se necesitará un mayor poder computacional y para esto se pretende elaborar un proyecto para financiar equipo de última generación, dado que la cantidad de datos aumentará exponencialmente.

Se pretende utilizar el método propuesto, por su estabilidad, en modelos que envuelvan las ecuaciones de Navier-Stokes.

Se pretende implementar un método H^1 -híbrido para aumentar las posibilidades de esquemas para las variables del espacio. En este caso, se tendría un esquema como el método H^1 , pero permitiendo discontinuidades en curvas pre-determinadas. Este tipo de método híbrido ya fue bastante estudiado hasta tres décadas atrás, mas últimamente está retomando interés por las dificultades que el método Galerkin discontinuo presenta.

Con la implementación del método H^1 -híbrido se pretende adecuar el método multi-numérico para considerar en regiones suaves el método H^1 -conforme (con funciones continuas) y en regiones con sospecha de singularidad permitir al usuario elegir entre el método de Galerkin discontinuo o el método H^1 -híbrido.

Referencias

- BREZZI, F., FRANCA, L.P., HUGHES, R., T. J., y RUSSO, A. (1997). $b = \int g$. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 145.
- Brooks, A., y Hughes, T. (1982). Streamline upwind/ Petrov–galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32.
- Calle, J. L. D. (2002). *O método de galerkin descontínuo com difusividade implícita e h-adaptabilidade baseada em técnicas wavelet* (Tesis Doctoral no publicada). IMECC da Universidade Estadual de Campinas.
- Calle, J. L. D., Devloo, P. R. B., y Gomes, S. M. (2015, September). Implementation of continuous hp-adaptive finite element spaces without limitations on hanging sides and distribution of approximation orders. *Computers and Mathematics with Applications*, 70, 1051 - 1069.
- Celia, M. A., y Gray, W. G. (1992). *Numerical methods for differential equations*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall.
- Cockburn, B., Fu, G., y Qiu, W. (2017). A note on the devising of superconvergence hdg methods for Stokes flow by m-decompositions. *IMA Journal of Numerical Analysis*.
- Cockburn, B., Nguyen, N. C., y Peraire, J. (2016). Handbook of numerical analysis. En (p. 173 - 197). Elsevier B. V.
- Correa, C. D., Hero, R., y Ma, K.-L. (2011). A comparison of gradient estimation methods for volume rendering on unstructured meshes. *IEEE Transaction on visualization and computer graphics*, 17.
- Dafermos, C. M. (2016). *Hyperbolic conservation laws in continuum physics*. Heidelberg: Springer-Verlag Berlin.
- de O. FORTUNA, A. (2000). *Técnicas computacionais para a dinâmica dos fluidos*. Editora da Universidade de São Paulo. USP.
- Deshmukh, P. C. (2019). *Foundations of classical mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Devloo, P. R. B. (2000). Object oriented tools for scientific computing. *Engineering with Computers*.

- Donea, J., y Huerta, A. (2003). *Finite element methods for flow problems*. John Wiley & Sons Ltd.
- Fjordholm, U. S., Lanthaler, S., y Mishra, S. (2017). Statistical solutions of hyperbolic conservation laws: foundations. *Arch. Ration. Mech. Anal.*.
- Gerhard, N., y Muller, S. (2016). Adaptive multiresolution discontinuous galerkin scheme for conservation laws: multi-dimensional case. *Comp. Appl. Math.*.
- Godlewski, E., y Raviart, P.-A. (1991). *Hyperbolic systems of conservation laws*. France: Mathématiques & Applications. Ellipses.
- Guo, W., y Cheng, Y. (2017). An adaptive multiresolution discontinuous galerkin method for time dependent transport equations in multidimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*.
- Gustafsson, B. (2011). *Fundamentals of scientific computing*. Heidelberg: Springer-Verlag Berlin.
- HARARI, I., y HAUKE, G. (2007). Semidiscrete formulations for transient transport at small time steps. *International Journal for Numerical Methods in fluids*. 54.
- Henao, C. A. A. (2011). *Uma avaliacao de formulacoes estabilizadas de elementos finitos associadas ao metodo de rothe de discretizacao temporal* (Tesis Doctoral no publicada). UFRJ - COPPE.
- Hesthaven, J. S. (2018). *Numerical methods for conservation laws: from analysis to algorithms*. Philadelphia: SIAM.
- Khakimzyanov, G., Dutykh, D., Milsotakis, D., y Shokina, N. (2019). Numerical simulation of conservation laws with moving grid nodes: application to tsunami wave modelling. *math.NA arXiv:1511.02771v6*.
- KOLEVA, M. N. (2005). Comparison of a rothe two grid method and other numerical schemes for solving semilinear parabolic equations. *Lect. Notes in Comp. Sci., SPRINGER Verlag Heidelberg*, 2401.
- Kozakevicius, A. J., Zeidan, D., Schmidt, A. A., y Jakobsson, S. (2018). Solving a mixture model of two-phase flow with velocity non-equilibrium using weno wavelet methods. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*.
- Langtangen, H. P., y Linge, S. (2017). *Finite difference computing with partial differential equations: a modern software approach*. Springer Open.

- Leveque, R. J. (1992). *Numerical methods for conservation laws*. Basel, Berlin. Birkhauser Verlag.
- Lohner, R. (2008). *Applied computational fluid dynamics techniques: An introduction based on finite element methods*. John Wiley & Sons Ltd.
- MacCormack, R. W. (1969). The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. *AIAA*.
- Mavriplis, D. J. (2003). *Revisiting the last squares procedures for gradient reconstruction on unstructured meshes* (Inf. Téc.). NASA - National Institute of Aerospace.
- Minbashian, H., Adibi, H., y Dehghan, M. (2017). An adaptive wavelet space time supg method for hyperbolic conservation laws. *Numerical methods for partial differential equations*.
- Mishra, S. (2018). On the convergence of numerical schemes for hyperbolic systems of conservation laws. En *Proc. int. cong. of math.*
- Oden, J. T. (s.f.). *Notes on high-order flow solvers for euler and navier-stokes equations*. (August 1989)
- Previati, G., Gobbi, M., y Ballo, F. (2019). A study on the stress gradient reconstruction in finite elements problems with application of radial basis function networks. *Meccanica*.
- RAMOS, J. I. (2007). Numerical methods for nonlinear second order hyperbolic partial differential equations. ii rothe s techniques for 1d problems. *Applied Mathematics and Computation*, 190.
- Robinson, J., Rodrigo, J., y Sadowski, W. (2016). *The three dimensional navier-stokes equations: classical theory*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Rothe, E. (1930). Zweidimensionale parabolic randwertaufgaben als grenzfall eindimensionaler randwertaufgaben. *Mathematische Annalen*.
- SCHEMANN, M., y BORNEMANN, F. (1998). An adaptive rothe method for the wave equation. *Comput. Visual Sci.* 1.
- Shu, C., y Osher, S. (1989). Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes, ii. *Journal of Computational Physics*, 83.
- Tadmor, E. (s.f.). *Approximate solutions of nonlinear conservation laws and related equations*. (Dpt. of Mathematics. UCLA. April 1997)
- Tukaszewicz, G., y Kalita, P. (2016). *Navier-stokes equations. an introduction with*

applications. Switzerland: Springer International Publishing.

Xiong, M., Deng, X., Gao, X., Dong, Y., Xu, C., y Wang, Z. (2018). A novel stencil selection method for the gradient reconstruction on unstructured grid based on openfoam. *Computers and Fluids*.

Zeidler, E. (1990). *Nonlinear functional analysis and its applications ii/b*. New York Inc: Springer-Verlag.

Zienkiewycs, O. C., Taylor, R. L., y Zhu, J. Z. (2013). *The finite element method: Its basis and fundamentals*. Oxford: Butterworth-Heinemann.

