

03095



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO 3

INSTITUTO DE GEOFISICA
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

DESARROLLO DEL METODO DE COLOCACION
TREFFETZ-HERRERA.
APLICACION A PROBLEMAS DE TRANSPORTE
EN LAS GEOCIENCIAS

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(MODELACION DE SISTEMAS TERRESTRES)
P R E S E N T A :
MARTIN A. DIAZ VIERA

DIRECTOR DE LA TESIS: DR. ISMAEL HERRERA REVILLA

297925

MEXICO, D. F.

2001



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

RESUMEN

El método de colocación convencional, que se basa en el uso de polinomios cúbicos de Hermite, posee un gran atractivo por su elevada exactitud y la simplicidad de su formulación. Sin embargo tiene algunas desventajas computacionales debido al gran número de grados de libertad asociados con cada nodo de la malla de la partición del dominio.

En la presente tesis doctoral se aplica la teoría unificada de descomposición de dominio de Herrera en combinación con colocación ortogonal, lo que produce una familia de "métodos indirectos de colocación (colocación Trefftz-Herrera)". Los métodos de Trefftz-Herrera están basados en un tipo especial de fórmula de Green definida en campos discontinuos. Una característica esencial de estos métodos es el uso de funciones de peso que suministran información acerca de la solución buscada en las fronteras interiores de la partición exclusivamente.

En particular, si el operador diferencial de la ecuación es positivo definido y simétrico, la matriz resultante también es positiva definida y simétrica, lo cual no ocurre en los métodos convencionales de colocación. Por otro lado, al aplicar colocación en la construcción de las funciones de peso se obtiene una reducción dramática del número de grados de libertad asociados con cada nodo. En efecto, mientras en colocación convencional el número de grados de libertad es 2^n para n -dimensiones, en colocación TH se pueden obtener algoritmos con un solo grado de libertad para cualquier dimensión arbitraria. Resulta interesante destacar que el tratamiento de problemas con saltos prescritos en las fronteras interiores posee el mismo grado de complejidad que los problemas sin saltos, ya que la matriz global es exactamente la misma para ambos casos. A manera de ilustración, el método es aplicado a problemas elípticos de segundo orden y a problemas parabólicos de advección-difusión, también conocidos como de transporte, para diferentes ejemplos numéricos en una y dos dimensiones.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quiero expresar mi gratitud a mi tutor, el Dr. Ismael Herrera, de quién no sólo he recibido un cúmulo de enseñanzas decisivas en mi formación, sino también su firme apoyo durante todos estos años del doctorado. Mi agradecimiento al Dr. Robert Yates, por sus brillantes consejos computacionales, que fueron fundamentales para la conclusión de la presente tesis. Al Dr. Ricardo Berlanga, por su amable asesoría y esclarecedoras disertaciones en temas avanzados de matemáticas, las cuales he disfrutado profundamente. Agradezco en particular el apoyo y comprensión que me brindó en todo momento la dirección del Instituto de Geofísica y Astronomía de Cuba del cuál a pesar de la distancia me siento parte. A las secretarias: Julia Melchor y Clara Pérez, por su paciencia y colaboración en cuanta gestión necesaria. A la UNAM por sus magníficas instalaciones que todos debemos aprender a valorar más.

ÍNDICE

	Pags.
Resumen	ii
Dedicatoria	iii
Agradecimientos	iv
Índice	v
Lista de Tablas	vii
Lista de Figuras	viii
Capítulos	
1 Introducción	1
2 Teoría General del Método de Trefftz	7
2.1 Notación y Resultados Preliminares	7
2.2 Fórmulas de Green-Herrera	10
2.3 Formulaciones Variacionales de Problemas de Contorno con Saltos Prescritos	14
2.4 Método de Trefftz y su Formulación Variacional	16
3 Métodos Indirectos de Trefftz-Herrera	20
3.1 Formulación Trefftz-Herrera de la Descomposición de Dominio	20
3.2 Sistemas de Funciones TH-Completo	25
3.3 Rango de Aplicaciones	27
3.3.1 Operadores Elípticos de Segundo Orden	27
3.3.2 Ecuación Biarmónica	28
3.3.3 Problema de Stokes	28
3.3.4 Ecuaciones de Elasticidad	29
4 Métodos de Colocación	31
4.1 Clasificación	31
4.2 Breve Reseña Histórica	31
4.3 Problema Modelo: Ecuación Elíptica General de Segundo Orden	32
4.4 Método Convencional de Colocación	33
4.5 Colocación Convencional en 2-D	36
4.6 Características Numéricas de Colocación convencional	41
5 Método de Colocación Trefftz-Herrera	43
5.1 Procedimiento Trefftz-Herrera	43
5.2 Estrategia para la Construcción de un Sistema de Funciones de Peso TH-Completo usando Polinomios.	48
5.3 Construcción de las Funciones de Peso usando Colocación	50
5.3.1 Funciones de Peso Lineales	50
5.3.2 Funciones de Peso Cúbicas	55
5.4 Colocación Trefftz-Herrera en 2-D	59
5.5 Características Numéricas de Colocación Trefftz-Herrera	63
6 Aplicación de Colocación Trefftz-Herrera a Problemas de Transporte	66
6.1 Problema Modelo: Ecuación Parabólica	66
6.2 Esquemas Theta (θ) de Discretización en el Tiempo.	67

6.3	Semi-discretización en el Tiempo de la Ecuación Parabólica	70
6.4	Colocación TH para la Ecuación Parabólica en 2-D	71
6.5	Tratamiento del Caso con Advección Dominante	74
7	Simulación Numérica	77
7.1	Problemas Elípticos en 1-D	77
7.2	Problemas Elípticos en 2-D	88
7.3	Problemas Parabólicos en 1-D	98
7.4	Problemas Parabólicos en 2-D	102
8	Discusión y Análisis de Resultados Numéricos	107
8.1	Problemas Elípticos	107
8.2	Problemas Parabólicos	109
9	Conclusiones y Perspectivas	112
9.1	Conclusiones	112
9.2	Perspectivas	114
	Referencias	116
	Bibliografía sobre Métodos de Colocación	122
Anexos		
A	Cálculo de la Matriz y Término Derecho en Colocación TH	134
A.1	Casos para los coeficientes de la matriz	134
A.2	Casos para el Término Derecho	140
B	Modelo General de Flujo y Transporte en Medios Porosos	150
B.1	Conceptos y Resultados usados en la Modelación de Sistemas Continuos	150
B.1.1	El concepto de sistema continuo	150
B.1.2	Propiedades Extensivas e Intensivas	150
B.1.3	Ecuación de Balance Global	151
B.1.4	Ecuaciones de Balance Local	151
B.2	Flujo de Fluidos en Medios Porosos	152
B.2.1	Caracterización de un medio poroso	152
B.2.2	Ley de Darcy	152
B.2.3	Balance de masa	153
B.2.4	Problemas de flujo bien planteados	156
B.3	Transporte de Solutos en Fluidos en Medios Porosos	156
B.3.1	Ecuación general de transporte monofásico	156
B.3.2	Restricciones en el movimiento: incompresibilidad	158
B.3.3	Transporte conservativo	160
B.3.4	Transporte no conservativo	162
B.3.5	Transporte difusivo	163
B.3.6	Procesos de transporte: advección, difusión y generación	166
B.3.7	Problemas de transporte bien planteados	166
C	Estimación del Orden de Error de Colocación TH en una Dimensión	168

Lista de Tablas

No. Tabla	Título de la Tabla	Pags.
4.1	Resumen de las características numéricas del método convencional de colocación.	42
5.1	Resumen de las características numéricas del método de colocación TH.	65
7.1	Definiciones de los coeficientes de los ejemplos elípticos en 1-D.	79
7.2	Soluciones analíticas de los ejemplos elípticos en 1-D.	79
7.3	Definiciones de los coeficientes de los ejemplos elípticos en 2-D.	90
7.4	Soluciones analíticas de los ejemplos elípticos en 2-D.	90
7.5	Definiciones de los coeficientes de los ejemplos parabólicos en 1-D.	98
7.6	Soluciones analíticas de los ejemplos parabólicos en 1-D.	99
7.7	Definiciones de los coeficientes de los ejemplos parabólicos en 2-D.	103
7.8	Soluciones analíticas de los ejemplos parabólicos en 2-D.	103
8.1	Características del caso 1 del Ejemplo P1D-3 ($D=0.01$, $v=1.0$, $h=\Delta x=0.01$ y $k=\Delta t=0.1$)	109
8.2	Características del caso 2 del Ejemplo P1D-3 ($D=0.01$, $v=0.5$, $h=\Delta x=0.1$ y $k=\Delta t=0.1$)	110
8.3	Características de los casos del Ejemplo P2D-3	111

Lista de Figuras

No. Figura	Título de la Figura	Pags.
2.1	El dominio Ω , su frontera externa $\partial\Omega$ y las fronteras internas Σ .	7
4.1	Partición del dominio $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ dividido en $E_x \times E_y$ elementos, donde $h_x = x_i - x_{i-1}$; $i = 1, \dots, E_x$ y $h_y = y_j - y_{j-1}$; $j = 1, \dots, E_y$.	36
4.2	Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{00}(x, y) = H_0^0(x)H_0^0(y)$	38
4.3	Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{01}(x, y) = H_0^0(x)H_0^1(y)$	38
4.4	Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{10}(x, y) = H_0^1(x)H_0^0(y)$	39
4.5	Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{11}(x, y) = H_0^1(x)H_0^1(y)$	39
4.6	Estructura de la matriz del método de Colocación Convencional en dos dimensiones usando funciones de peso cúbicas para una partición de 5x5 elementos.	40
5.1a	Subregión Ω_{ij} asociada con el nodo (x_i, y_j) .	49
5.1b	Soportes de las funciones de peso.	49
5.2a	Soporte del primer cuadrante Ω_{ij}^I de la función de peso lineal $w_y^0(x, y)$.	51
5.2b	Soporte del segundo cuadrante Ω_{ij}^{II} de la función de peso $w_y^0(x, y)$.	51
5.2c	Soporte del tercer cuadrante Ω_{ij}^{III} de la función de peso $w_y^0(x, y)$.	52
5.2d	Soporte del cuarto cuadrante Ω_{ij}^{IV} de la función de peso $w_y^0(x, y)$.	52
5.3	Gráfico de la función bilineal $B_{00}^{0I}(x, y)$	54
5.4	Gráfico de la función $N_{00}^{II}(x, y) = H_0^1(x)H_0^1(y)$	54
5.5	Soporte de la función de peso cúbica $w_y^0(x, y)$.	55
5.6	Soporte de la función de peso cúbica $w_y^1(x, y)$.	56
5.7	Soporte de la función de peso cúbica $w_y^2(x, y)$.	56
5.8	Gráfico de la función bicúbica $B_{00}^{0I}(x, y) = H_0^0(x)H_0^0(y)$	57
5.9	Gráfico de la función bicúbica $B_{00}^{II}(x, y) = H_0^1(x)H_0^0(y)$	57

5.10	Gráfico de la función bicúbica $B_{00}^{2l}(x, y) = H_0^0(x)H_0^1(y)$	58
5.11	Estructura de la Matriz de Colocación TH usando funciones de peso lineales para una partición de 5x5 elementos.	61
5.12	Estructura de la Matriz de Colocación TH usando funciones de peso cúbicas para una partición de 5x5 elementos.	62
6.1	Dominio rectangular $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$.	72
7.1	Partición del dominio $[x_{\min}, x_{\max}]$ dividido en E elementos, donde $h = x_i - x_{i-1}; i = 1, \dots, E$.	77
7.2	Ejemplo 1D-1. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.	80
7.3	Ejemplo 1D-2. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.	81
7.4	Ejemplo 1D-3. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.	82
7.5	Ejemplo 1D-4. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.	83
7.6	Ejemplo 1D-5 (caso $\alpha=20$). Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.	84
7.7	Ejemplo 1D-5 (caso $\alpha=100$). Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.	85
7.8	Ejemplo 1D-6. Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas en presencia de saltos prescritos.	86
7.9	Ejemplo 1D-7. Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas en presencia de coeficientes discontinuos.	87
7.10	Partición del dominio $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ dividido en $E_x \times E_y$ elementos, donde $h_x = x_i - x_{i-1}; i = 1, \dots, E_x$ y $h_y = y_j - y_{j-1}; j = 1, \dots, E_y$.	89
7.11	Ejemplo 2D-1: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.	91

7.12	Ejemplo 2D-2: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.	92
7.13	Ejemplo 2D-3: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.	93
7.14	Ejemplo 2D-4: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.	94
7.15	Ejemplo 2D-5: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.	95
7.16	Ejemplo 2D-6: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas en presencia de saltos prescritos.	96
7.17	Ejemplo 2D-7: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas en presencia de coeficientes discontinuos.	97
7.18	Ejemplo P1D-1: Convergencia del método de colocación TH en $t = 0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.	99
7.19	Ejemplo P1D-2: Convergencia del método de colocación TH en $t = 0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.	100
7.20	Ejemplo P1D-3: Comparación del método de Colocación TH (cúbicas) usando un esquema completamente implícito en el tiempo para diferentes números de Courant (Cr) y Peclet (Pe).	101
7.21	Ejemplo P2D-1: Convergencia del método de colocación TH en $t = 0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.	104
7.22	Ejemplo P2D-2: Convergencia del método de colocación TH en $t = 0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.	105
7.23	Ejemplo P2D-3: Comparación de Colocación TH (cúbicas) usando un esquema completamente implícito en el tiempo para diferentes números de Courant (Cr) y Peclet (Pe).	106

1 Introducción

En los últimos años se ha incrementado el interés teórico y práctico por los métodos de descomposición de dominio [65,89] para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales que modelan sistemas continuos, puesto que mediante su aplicación se pueden desarrollar algoritmos que trabajen en paralelo, los cuales hacen un uso más eficiente de los recursos que ofrecen las modernas supercomputadoras. El empleo de estos métodos hace posible la solución de problemas cada vez más complejos por su naturaleza (dominios con una forma altamente irregular pueden ser descompuestos en subdominios regulares) y por el tamaño de los datos que se pueden manejar (pueden llegar a ser del orden de los millones) lo cual es muy común en la modelación de diversos fenómenos en las Ciencias de la Tierra.

En los métodos de descomposición de dominio, como bien lo dice el nombre, se divide la región o dominio donde se formula el problema en subregiones, por lo que el problema global inicial se transforma en resolver la ecuación diferencial dada en cada subdominio. Para esto se imponen algunas condiciones de enlace o de continuidad entre las subregiones que debe satisfacer la solución de cada subproblema.

Estos métodos generalmente se clasifican en dos grandes categorías: métodos con traslape o de dominios yuxtapuestos y métodos sin traslape o de dominios ajenos. La diferencia esencial entre estos dos métodos estriba en las condiciones de enlace o transmisión que se impongan en las interfaces o fronteras que separan las subregiones. Por ejemplo para ecuaciones elípticas de segundo orden el método sin traslape requiere que la solución junto con su derivada normal a lo largo de las fronteras comunes de las subregiones sean continuas, mientras que el método con traslape solo exige que sea continua la solución. Es importante observar que para las ecuaciones diferenciales elípticas de segundo orden, el conocimiento de las restricciones de la solución en las fronteras de las subregiones permite determinar de forma única la solución en el interior de cada subregión. Debido a este hecho los procedimientos de descomposición de dominio frecuentemente se reducen a la obtención de las restricciones de la solución en las fronteras de las subregiones.

Los desarrollos teóricos que se presentan en esta tesis están basados en gran medida en [58], donde se expone una estrategia general unificadora para la formulación de métodos de descomposición de dominio consistente en obtener información acerca de la solución buscada en la frontera interior (Σ) que separa las subregiones, suficiente para definir problemas locales bien planteados en cada una de ellas [60]. De este modo la solución del problema de contorno global en toda la región puede ser reconstruida resolviendo problemas locales en cada subregión exclusivamente.

Existen dos procedimientos generales para obtener información en Σ ; a ellos nos referiremos como métodos '*directos*' e '*indirectos*' o de *Trefftz-Herrera*. Los métodos directos se caracterizan por juntar, como si fueran ladrillos, las soluciones locales del problema para construir la solución global. Sin embargo, cuando éstos son interpretados como procedimientos para obtener información en la frontera interior conducen a la formulación de las condiciones de compatibilidad que tiene que satisfacer la solución buscada en Σ .

Por otra parte, los métodos indirectos o de *Trefftz-Herrera* se distinguen por el uso de funciones de peso especializadas que permiten obtener la información deseada en la frontera interior Σ . Estos parten de la siguiente observación: cuando se aplica el método de los residuos pesados, la información acerca de la solución exacta que está contenida en la solución aproximada está determinada exclusivamente por la familia de funciones de peso que se use [37].

Debido a la observación anterior, para el desarrollo de métodos indirectos se requiere de un marco teórico apropiado que permita identificar la información que es producida por diferentes funciones de peso. Algunas de las formulaciones de descomposición de dominio más conocidas están basadas en el análisis de las condiciones de transmisión en las interfaces de las subregiones haciendo uso de los operadores de *Steklov-Poincaré* [89]. Sin embargo la manera clásica o natural de realizar dicho análisis es a través de las fórmulas de *Green*, pero éstas en su modo convencional no resultan adecuadas para ser aplicadas en los métodos de descomposición de dominio.

En efecto, si tenemos el siguiente problema de contorno

$$\mathcal{L}u = f_\Omega; \quad \text{en } \Omega \quad (1.1)$$

con condiciones de frontera homogéneas, donde Ω es una región dada donde está definido el operador diferencial lineal \mathcal{L} , entonces según el enfoque convencional [84], se cumple la siguiente fórmula de Green

$$\int_\Omega w \mathcal{L}u dx = \int_\Omega u \mathcal{L}^* w dx \quad (1.2)$$

donde \mathcal{L}^* es el adjunto formal del operador \mathcal{L} .

Como es usual en el método de residuos pesados [27], se dice que una función \hat{u} es una solución aproximada del problema (1.1) cuando

$$\int_\Omega w^\alpha (\mathcal{L}\hat{u} - f_\Omega) dx = 0; \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (1.3)$$

donde $\{w^1, \dots, w^N\}$ es una familia de funciones de peso. Usualmente para que el sistema de ecuaciones (1.3) tenga solución única se representa a la solución aproximada como una combinación lineal de funciones bases $\hat{u} = \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha \phi^\alpha$, donde $\{\phi^1, \dots, \phi^N\}$ es el sistema de funciones bases.

Para poder analizar cual es la información de la solución exacta contenida en la solución aproximada, como la primera también satisface la Ec.(1.3) y aplicando la fórmula de Green (1.2), resulta

$$\int_\Omega w^\alpha (\mathcal{L}\hat{u} - \mathcal{L}u) dx = \int_\Omega (\hat{u} - u) \mathcal{L}^* w^\alpha dx = 0; \quad (1.4)$$

La ecuación (1.4) nos lleva a la conclusión de que el error $u - \hat{u}$ es ortogonal al espacio generado por la familia de funciones $\{\mathcal{L}^* w^1, \dots, \mathcal{L}^* w^N\}$. Sin embargo este resultado tiene poca aplicación en métodos de descomposición de dominio donde pueden existir discontinuidades en las fronteras que separan las subregiones. En estos casos es necesario usar fórmulas de Green aplicables a situaciones en las cuales tanto las funciones de peso como las funciones bases puedan ser discontinuas simultáneamente. He aquí la motivación para introducir fórmulas de Green especialmente desarrolladas para operadores en campos

discontinuos. Esta clase de fórmulas de Green fueron introducidas en [37], y se conocen como fórmulas de “Green-Herrera”. El desarrollo de los métodos de Trefftz-Herrera están basados en este tipo de fórmulas bajo un enfoque variacional, las cuales a su vez se sustentan en la teoría algebraica abstracta de gran generalidad formulada por Herrera en [32,35] y que posteriormente ha sido aplicada a ecuaciones diferenciales [37-58].

Una vez que se ha establecido el marco teórico apropiado para poder analizar la información contenida en las soluciones aproximadas en campos discontinuos, entonces es posible diseñar estrategias para la construcción óptima de funciones de peso que produzcan precisamente la información deseada. En general, dado un operador diferencial, existen varios tipos de condiciones de frontera que pueden ser impuestos localmente para definir problemas bien planteados en cada una de las subregiones de la partición del dominio. Según la elección que se haga del tipo de condiciones de fronteras se obtendrán un tipo u otro de procedimiento de descomposición de dominio y consecuentemente serán diferentes las condiciones que deberán satisfacer las funciones de peso.

Cuando se admiten funciones discontinuas como funciones bases, entonces se puede considerar un problema de contorno más general donde los saltos en la solución buscada y sus derivadas están prescritos en las fronteras interiores Σ de la partición del dominio.

La metodología así obtenida de esta manera, en primer lugar, posee una gran generalidad ya que es aplicable a cualquier *Problema de Contorno con Saltos Prescritos* (PCSP) de ecuaciones diferenciales lineales o sistemas de éstas de cualquier tipo (elípticas, parabólicas o hiperbólicas) y cuyos coeficientes pueden ser discontinuos. En segundo lugar es muy flexible ya que permite incorporar de manera natural las diferentes variantes de condiciones de frontera y de salto del problema. Y en tercer lugar, es sistemática, debido a que bajo su marco teórico permite desarrollar toda una gran variedad de procedimientos según sea la información buscada acerca de la solución en Σ .

Bajo la óptica de los métodos de Trefftz, el procedimiento de Trefftz-Herrera debe en parte su nombre y su carácter de indirecto a que las funciones especializadas de peso son

soluciones de la ecuación diferencial adjunta homogénea, en contraposición con los métodos directos de Trefftz en los que se usa un sistema de funciones que satisfacen al operador diferencial como funciones bases para la construcción de la solución aproximada del problema de contorno.

Las ideas básicas del método indirecto de Trefftz-Herrera, también conocido en otro contexto como método del Adjunto Localizado (LAM) [43-46], han sido aplicadas para desarrollar diversos procedimientos numéricos, como son los métodos Euleriano-Lagrangianos del Adjunto Localizado (ELLAM) [15,18,19,24,48-50], empleados con éxito en la solución numérica de problemas de transporte dominados por el término de primer orden o de advección.

El hecho de que las funciones de peso especializadas se construyan haciendo uso del método de colocación ortogonal nos conduce a un nuevo tipo de método “no estándar” de colocación: el método de colocación indirecto o de Trefftz-Herrera. Algunos resultados preliminares de su aplicación al caso de la ecuación elíptica de segundo orden en una dimensión han sido publicados en [55] y forman parte de la presente tesis.

Parte de los resultados de esta tesis están incluidos en [61], donde se analiza la implementación numérica del problema de contorno con saltos prescritos para la ecuación elíptica general de segundo orden en varias dimensiones.

En el capítulo 2 se introducen las fórmulas de Green-Herrera y las formulaciones variacionales de los PCSP en el contexto de los métodos de Trefftz. En el capítulo 3 se formulan los métodos indirectos de Trefftz-Herrera y se definen los sistemas de funciones TH-completos. Al final se dan ejemplos de aplicación del método Trefftz-Herrera.

En el capítulo 4 se da una breve revisión de los métodos de colocación y en particular del método convencional de colocación aplicado a la ecuación elíptica general de segundo orden, así como detalles de su implementación y sus características numéricas en dos dimensiones.

Mientras que el capítulo 5 se formula el método de colocación Trefftz-Herrera (TH) para la misma ecuación en dos dimensiones. Se detallan aspectos de la construcción de las funciones de peso para polinomios lineales y cúbicos usando colocación ortogonal. Se muestra la derivación del sistema global de ecuaciones cuando se adopta como funciones bases la restricción de las funciones de peso en Σ . Al final del mismo se ofrece un resumen de las características numéricas del método resultante.

En el capítulo 6 se aplica el método de colocación TH a problemas de tipo parabólico bajo un enfoque euleriano, donde éstos se reducen a la solución de problemas elípticos en cada paso del tiempo una vez que el término que involucra la derivada temporal es discretizada mediante algún esquema en diferencias finitas. En particular se discuten los esquemas completamente implícito y de Crank-Nicolson.

En el capítulo 7 se muestran gráficamente los resultados de los experimentos numéricos con una serie de ejemplos teóricos tanto para la ecuación elíptica como para la parabólica en una y dos dimensiones. La discusión y el análisis de los mismos en cuanto a desempeño y convergencia se ofrecen en el capítulo 8.

Finalmente en el capítulo 9 se hace un análisis comparativo del método de colocación TH con respecto al convencional y se dibujan las perspectivas que se abren en el desarrollo e implementación de los métodos de Trefftz-Herrera.

2 Teoría General del Método de Trefftz

2.1 Notación y resultados preliminares

Consideremos una región $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ y su partición o descomposición en subregiones $\Pi = \{ \Omega_1, \dots, \Omega_E \}$, de manera que la unión de las cerraduras de $\Omega_i, i=1, \dots, E$ es la cerradura de Ω , como se puede observar en la Fig. 1. Designaremos por Σ a la unión de las fronteras internas que separan las subregiones de la partición del dominio Ω y se define como el complemento cerrado de $\partial\Omega$ en $\bigcup_{i=1}^E \partial\Omega_i$.

El vector normal unitario n , apuntando hacia afuera, está definido de manera usual en casi todos los puntos de la frontera exterior $\partial\Omega$. Análogamente, se define de manera única el vector normal unitario n en casi todos los puntos de la frontera interior Σ , con excepción del sentido que es elegido arbitrariamente.

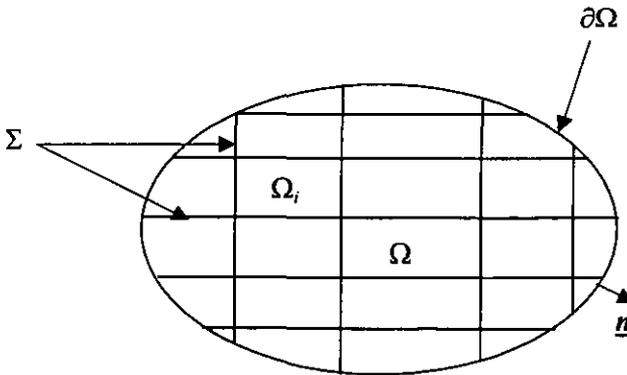


Fig. 2.1: El dominio Ω , su frontera externa $\partial\Omega$ y las fronteras internas Σ .

En lo sucesivo $D_1(\Omega)$ y $D_2(\Omega)$ serán dos espacios de funciones definidas en la región Ω correspondientes a las funciones bases y de peso, respectivamente. En general las funciones

que pertenecen a estos espacios pueden presentar discontinuidades de salto a lo largo de las fronteras internas Σ .

Para todo $i = 1, \dots, E$ y $\alpha = 1, 2$, $D_\alpha(\Omega_i)$ es el espacio cuyos elementos son las restricciones a las subregiones Ω_i , de las funciones que pertenecen al espacio $D_\alpha(\Omega)$. Entonces tenemos que

$$\hat{D}_\alpha(\Omega) \equiv D_\alpha(\Omega_1) \oplus \dots \oplus D_\alpha(\Omega_E); \quad \alpha = 1, 2. \quad (2.1)$$

En vista de la definición anterior, para cada función $v \in \hat{D}_\alpha(\Omega)$, $\alpha = 1, 2$, existe una sucesión de funciones $\{v^1, v^2, \dots, v^E\}$ tal que para cada $i = 1, \dots, E$, v^i está definida en Ω_i .

Sea $\Sigma_{ij} = \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j$, donde $\partial\Omega_i$ y $\partial\Omega_j$ son las fronteras de dos subregiones adyacentes, entonces definimos como traza a la restricción de v^i a Σ_{ij} .

Pero como en Σ_{ij} , para dos subregiones vecinas, hay dos trazas definidas: una que corresponde a v^i y otra a v^j , entonces se requiere introducir la siguiente notación para poderlas distinguir entre sí :

$$v_+ \equiv \text{Tr}(v^i); \quad (2.2)$$

cuando Ω_i cae en el lado positivo de Σ_{ij} y

$$v_- \equiv \text{Tr}(v^j); \quad (2.3)$$

en caso contrario. Aquí $\text{Tr}(v)$ designa al operador traza de la función v . Correspondientemente, el *salto* de la función v a través de Σ_{ij} está definido por:

$$[v] \equiv v_+ - v_-; \quad (2.4)$$

mientras que el *promedio* se define como:

$$\hat{v} \equiv \frac{1}{2}(v_+ + v_-); \quad (2.5)$$

Observe que tanto el promedio de una función \bar{v} , como el producto $[v] \cdot \underline{n}$, no dependen de cómo se elija el sentido del vector normal unitario n en Σ .

Observación 2.1: Aquí resulta importante destacar que los espacios abstractos arriba introducidos $D_1(\Omega)$ y $D_2(\Omega)$, correspondientes a las funciones bases y de peso respectivamente, deben ser formulados en términos de espacios concretos matemáticamente determinados. Una alternativa viable son los espacios de Sobolev $H^s(\Omega)$, ya que éstos ofrecen un marco teórico apropiado para manejar funciones completamente discontinuas. De esta manera se garantiza la existencia y unicidad de la solución de problemas de contorno con coeficientes discontinuos, donde la propia solución incluso puede ser discontinua [82]. Además, proveen un ambiente donde las *trazas* y, por lo tanto, los *saltos* y los *promedios* siempre están definidos y sujetos a las propiedades usuales.

Un espacio de funciones de Sobolev $H^s(\Omega)$ de orden entero no negativo ($s = 0, 1, 2, \dots$) con soporte en Ω se define como:

$$H^s(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) : D^t v \in L^2(\Omega), |t| = t_1 + t_2 + \dots + t_n = s\}; \quad (2.6)$$

donde $D^t = D^{t_1} D^{t_2} \dots D^{t_n} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{t_1} \left(\frac{\partial}{\partial x_2}\right)^{t_2} \dots \left(\frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{t_n}$ y $L^2(\Omega)$ es el espacio de funciones de cuadrado integrable en Ω .

Cuando $\Omega = \mathbb{R}^n$, $H^s(\Omega)$ puede ser definido para $s \in \mathbb{R}$ a través del uso de transformadas de Fourier. Sin embargo, cuando $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ no es todo el espacio euclidiano, entonces hay que usar otras técnicas como las de interpolación de espacios [4] para poder definir $H^s(\Omega)$ con $s \in \mathbb{R}$.

Aunque en nuestros ejemplos sólo trataremos con espacios de Sobolev de orden entero no negativo, existe una razón de peso por la que necesitamos definir en este contexto los espacios de Sobolev $H^s(\Omega)$ para $s \in \mathbb{R}$. Esto se debe al hecho de que las trazas de las funciones en $H^s(\Omega)$ pierden medio grado de diferenciabilidad en la frontera $\partial\Omega$, es decir:

$\text{Tr}: \mathbf{H}^1(\Omega) \rightarrow \mathbf{H}^{-1/2}(\partial\Omega)$. Una discusión más detallada de estos espacios de funciones y su conexión con la solución de ecuaciones diferenciales parciales se puede ver en [83].

2.2 Fórmulas de Green-Herrera

Dada la ecuación diferencial en forma general

$$\mathcal{L}u = f_\Omega; \quad \text{en } \Omega \quad (2.7)$$

donde \mathcal{L} es un operador diferencial lineal, además están dadas ciertas condiciones de frontera en $\partial\Omega$ y ciertas condiciones de salto en las fronteras interiores Σ , de manera tal que tenemos un problema bien planteado; es decir, se garantiza la existencia y unicidad de la solución. El problema enunciado se conoce como *Problema de Contorno con Saltos Prescritos*, el cuál será definido de manera más rigurosa en la próxima sección 2.2. A modo de comentario se debe destacar que este problema es más general que el problema usual de *Contorno* o de *Valores de Frontera*, puesto que permite discontinuidades de salto en las fronteras interiores Σ que involucren a la función u y/o sus derivadas.

Por definición un operador diferencial \mathcal{L} y su adjunto formal \mathcal{L}^* deben satisfacer la siguiente condición:

$$w\mathcal{L}u - u\mathcal{L}^*w = \nabla \cdot \{\underline{\mathcal{D}}(u, w)\} \quad (2.8)$$

donde $\underline{\mathcal{D}}(u, w)$ es una función bilineal vectorial apropiada. Cuando $u \in \hat{D}_1(\Omega)$ y $w \in \hat{D}_2(\Omega)$, se supondrá que $\mathcal{L}u$ está definido en los puntos interiores de las subregiones $\Omega_i (i=1, \dots, E)$. De manera análoga se supone para \mathcal{L}^*w , es decir que está definido en cada punto interior del dominio Ω , excepto en $\Sigma \cup \partial\Omega$.

Si integramos la ecuación (2.8) en Ω y aplicamos el teorema de la divergencia generalizado se obtiene que:

$$\sum_{r=1}^K \int_{\Omega_r} \{w \mathcal{L}u - u \mathcal{L}^* w\} dx = \int_{\partial\Omega} \mathcal{R}_e(u, w) dx + \int_{\Sigma} \mathcal{R}_\Sigma(u, w) dx \quad (2.9)$$

donde

$$\mathcal{R}_e(u, w) \equiv \underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} \quad \text{y} \quad \mathcal{R}_\Sigma(u, w) \equiv -[\underline{\mathcal{D}}(u, w)] \cdot \underline{n} \quad (2.10)$$

y además se cumple la siguiente propiedad

$$[\underline{\mathcal{D}}(u, w)] \cdot \underline{n} = \underline{\mathcal{D}}(\dot{u}, [w]) \cdot \underline{n} + \underline{\mathcal{D}}([u], \dot{w}) \cdot \underline{n} \quad (2.11)$$

Los paréntesis cuadrados significan aquí el salto de la función que contiene dentro, es decir, el límite del lado positivo menos el límite del lado negativo de Σ . El lado positivo de la interfase Σ se elige arbitrariamente y entonces el vector normal unitario \underline{n} se toma apuntando hacia el lado positivo de la misma.

En la teoría general de las ecuaciones diferenciales parciales se hace un uso extensivo de las fórmulas de Green. Un procedimiento estándar para construir tales fórmulas es descomponiendo la función bilineal $\mathcal{R}_e(u, w)$. Esta descomposición tiene la forma general siguiente:

$$\mathcal{R}_e(u, w) \equiv \underline{\mathcal{D}}(u, w) \cdot \underline{n} = \mathcal{B}(u, w) - \mathcal{C}^*(u, w) \quad (2.12)$$

Donde $\mathcal{B}(u, w)$ y $\mathcal{C}^*(u, w) \equiv \mathcal{C}(w, u)$ son dos funciones bilineales definidas en $\partial\Omega$ de manera puntual; es decir que para cada $\underline{x} \in \partial\Omega$, éstas son funciones lineales en u y w separadamente, mientras que el asterisco designa a la transpuesta de la forma bilineal. $\mathcal{B}(u, w)$ incluye los valores prescritos de frontera, mientras que $\mathcal{C}^*(u, w)$ depende de los valores complementarios (no prescritos) de frontera.

En una manera similar se procede para la descomposición de la función bilineal $\mathcal{R}_\Sigma(u, w)$, resultando ésta de la siguiente forma:

$$\mathcal{R}_\Sigma(u, w) \equiv -[\underline{\mathcal{D}}(u, w)] \cdot \underline{n} = \mathcal{J}(u, w) - \mathcal{K}^*(u, w) \quad (2.13)$$

Donde, de manera análoga, $\mathcal{J}(u, w)$ y $\mathcal{K}^*(u, w)$ son dos funciones bilineales definidas de manera puntual en Σ . La función $\mathcal{J}(u, w)$ es una función única de w , independientemente de u , cuando los saltos de u y sus derivadas son especificados. $\mathcal{K}^*(u, w)$ juega un papel similar al de las condiciones complementarias de frontera $\mathcal{C}^*(u, w)$ en los problemas con saltos prescritos.

Dada una función $v \in \hat{D}_1(\Omega)$, la notación $\mathcal{B}(v, \bullet)$ se usará para el funcional lineal cuyos valores para cualquier $w \in \hat{D}_2(\Omega)$ es $\mathcal{B}(v, w)$. Entonces, dadas las funciones $u_\partial \in \hat{D}_1(\Omega)$ y $u_\Sigma \in \hat{D}_1(\Omega)$ se pueden definir las funciones lineales $g_\partial \in \hat{D}_2^*(\Omega)$ y $j_\Sigma \in \hat{D}_2^*(\Omega)$, donde $\hat{D}_2^*(\Omega)$ es el espacio algebraico dual de $\hat{D}_2(\Omega)$, mediante $g_\partial \equiv \mathcal{B}(u_\partial, \bullet)$ y $j_\Sigma \equiv \mathcal{J}(u_\Sigma, \bullet)$, que de manera equivalente se pueden expresar como:

$$g_\partial(w) \equiv \mathcal{B}(u_\partial, w); \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \tag{2.14}$$

y

$$j_\Sigma(w) \equiv \mathcal{J}(u_\Sigma, w); \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \tag{2.15}$$

Nótese que tanto g_∂ como j_Σ heredan el carácter puntual de \mathcal{B} y \mathcal{J} respectivamente.

Al introducir en la Ec. (2.9) las descomposiciones de $\mathcal{R}_\partial(u, w)$ y $\mathcal{R}_\Sigma(u, w)$ dadas en (2.12) y (2.13) respectivamente, resulta entonces la siguiente fórmula de Green-Herrera [37],

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^E \int_{\Omega_i} w \mathcal{L} u dx - \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}(u, w) dx - \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u, w) dx = \\ & = \sum_{i=1}^E \int_{\Omega_i} u \mathcal{L}^* w dx - \int_{\partial\Omega} \mathcal{C}^*(u, w) dx - \int_{\Sigma} \mathcal{K}^*(u, w) dx \end{aligned} \tag{2.16}$$

Si a continuación introducimos la siguiente notación:

$$\langle Pu, w \rangle = \sum_{i=1}^E \int_{\Omega_i} w \mathcal{L} u dx, \tag{2.17}$$

$$\langle Q^* u, w \rangle = \sum_{i=1}^k \int_{\Omega_i} u \mathcal{L}^* w dx, \quad (2.18)$$

$$\langle Bu, w \rangle = \int_{\Omega} \mathcal{B}(u, w) dx, \quad (2.19)$$

$$\langle C^* u, w \rangle = \int_{\Omega} \mathcal{C}^*(u, w) dx, \quad (2.20)$$

$$\langle Ju, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{J}(u, w) dx, \quad (2.21)$$

$$\langle K^* u, w \rangle = \int_{\Sigma} \mathcal{K}^*(u, w) dx, \quad (2.22)$$

Según las definiciones (2.17), (2.18), (2.19), (2.20), (2.21) y (2.22), P, B, J, Q^*, C^* y K^* son funcionales bilineales reales definidos en $\hat{D}_1(\Omega) \times \hat{D}_2(\Omega)$ y entonces se puede escribir la Ec. (2.16) como:

$$\langle (P - B - J)u, w \rangle = \langle (Q^* - C^* - K^*)u, w \rangle \quad (2.23)$$

que se satisface $\forall u \in \hat{D}_1(\Omega)$ y $\forall w \in \hat{D}_2(\Omega)$.

De manera más compacta se puede escribir como

$$P - B - J \equiv Q^* - C^* - K^* \quad (2.24)$$

Esta expresión representa la fórmula Green-Herrera para operadores en campos discontinuos.

Los funcionales bilineales P, B, J, Q^*, C^* y K^* también pueden ser vistos como operadores funcionales lineales definidos en $\hat{D}_1(\Omega)$ y que toman valores en $\hat{D}_2^*(\Omega)$. De manera que, por ejemplo $P: \hat{D}_1(\Omega) \rightarrow \hat{D}_2^*(\Omega)$, donde $Pu \in \hat{D}_2^*(\Omega)$ es un funcional lineal definido en $\hat{D}_1(\Omega)$. De manera similar las transpuestas de estos funcionales bilineales P^*, B^*, J^*, Q, C y K los cuales son operadores funcionales lineales definidos en $\hat{D}_2(\Omega)$ y que toman valores en $\hat{D}_1^*(\Omega)$.

2.3 Formulaciones Variacionales de los Problemas de Contorno con Saltos Prescritos

En este punto ya contamos con los elementos y la notación correspondientes para definir el *Problema de Contorno con Saltos Prescritos* (PCSP) que será estudiado en lo sucesivo.

Definición 2.1: El *Problema de Contorno con Saltos Prescritos* consiste en buscar una función $u \in \hat{D}_1(\Omega)$, tal que satisfaga:

1) El operador

$$\mathcal{L}u = \mathcal{L}u_\Omega \equiv f_\Omega; \quad \text{en } \Omega \tag{2.25}$$

2) Condiciones de Contorno

$$\mathcal{B}(u, \bullet) = \mathcal{B}(u_\partial, \bullet) \equiv g_\partial; \quad \text{en } \partial\Omega \tag{2.26}$$

3) Saltos Prescritos

$$\mathcal{J}(u, \bullet) = \mathcal{J}(u_\Sigma, \bullet) \equiv j_\Sigma; \quad \text{en } \Sigma \tag{2.27}$$

Aquí, u_Ω , u_∂ y u_Σ son funciones dadas de $\hat{D}_1(\Omega)$, que definen los datos del problema. Además se usa la convención de que la ecuación (2.25) significa que se satisface solamente en los puntos interiores de cada una de las subregiones Ω_i ($i = 1, \dots, E$).

Si definimos los siguientes funcionales f , g y j que pertenecen a $\hat{D}_2^*(\Omega)$ como:

$$\langle f, w \rangle \equiv \langle Pu_\Omega, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \tag{2.28}$$

$$\langle g, w \rangle \equiv \langle Bu_g, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \quad (2.29)$$

$$\langle j, w \rangle \equiv \langle Ju_j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \quad (2.30)$$

Entonces una formulación débil del *Problema de Contorno con Saltos Prescritos* se puede escribir como:

$$Pu = f; \quad Bu = g; \quad Ju = j; \quad (2.31)$$

Definición 2.2: Llamaremos solución del *Problema de Contorno con Saltos Prescritos*, Ecs. (2.25), (2.26) y (2.27), a una función $u \in \hat{D}_1(\Omega)$, tal que satisfaga las Ecs. (2.31).

Se supondrá en lo sucesivo que existe al menos una solución del *Problema de Contorno con Saltos Prescritos*; además, que las Ecs. (2.31) son equivalentes a la siguiente ecuación simple:

$$(P - B - J)u = f - g - j; \quad (2.32)$$

Una condición suficiente para que (2.32) sea equivalente a (2.31) es que B y J sean operadores de frontera para $P: \hat{D}_1(\Omega) \rightarrow \hat{D}_2^*(\Omega)$.

Si escribimos la ecuación (2.32) de manera más explícita resulta:

$$\langle (P - B - J)u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \quad (2.33)$$

la cual representa la formulación variacional del *Problema de Contorno con Saltos Prescritos* y nos referiremos a ella como la *ecuación variacional en términos de los datos del problema*.

Haciendo uso de la fórmula Green-Herrera, Ec. (2.23), se obtiene la siguiente *formulación variacional equivalente en términos de la información complementaria*:

$$\langle (Q-C-K)*u, w \rangle = \langle f-g-j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \quad (2.34)$$

Cuando se aplica el método de los residuos pesados, la solución aproximada $\tilde{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ satisface

$$\langle (Q-C-K)*\tilde{u}, w^\alpha \rangle = \langle f-g-j, w^\alpha \rangle; \quad \alpha = 1, \dots, E \quad (2.35)$$

donde $\{w^1, \dots, w^E\} \subset \hat{D}_2(\Omega)$ es un sistema de funciones de peso.

Como la solución exacta satisface (2.34) entonces se cumple que

$$\langle (Q-C-K)*(u-\tilde{u}), w^\alpha \rangle = 0; \quad \alpha = 1, \dots, E \quad (2.36)$$

Este resultado puede ser usado para analizar la información acerca de la solución exacta que está contenida en la solución aproximada. En los métodos del adjunto localizado (LAM) [43-46] estas observaciones se usan para seleccionar funciones de prueba más convenientes.

2.4 El Método de Trefftz y su Formulación Variacional

Trefftz propuso en 1926 [95] un método para resolver problemas de contorno en ecuaciones diferenciales parciales como contrapartida al método de Ritz. El método originalmente consistía en buscar la solución aproximada como una combinación lineal de funciones que satisficieran *a priori* la ecuación diferencial y *a posteriori* se trataban de satisfacer las condiciones de frontera, usando para esto un enfoque variacional que minimiza el error en el sentido de la integral de Dirichlet o de energía.

El método de Trefftz ha sido desarrollado y generalizado por varios autores en los últimos años [66-80,97,98]. En particular, Jirousek [66,67] expandió su rango de aplicabilidad al introducir particiones de la región de interés y usar familias de soluciones analíticas en cada una de las subregiones. La solución global entonces se construye usando, como ladrillos, las soluciones definidas en las diferentes subregiones y se unen usando un criterio apropiado.

Otro enfoque fue propuesto y desarrollado por Herrera [36,52-55,58,59], en el cual las soluciones locales de la ecuación diferencial adjunta son usadas para obtener información acerca de la solución buscada. En particular se puede obtener información suficiente en las fronteras interiores que permiten definir problemas bien planteados en cada una de las subregiones. De esta manera es posible reconstruir la solución en toda la región resolviendo exclusivamente problemas locales.

Como se usa en la actualidad, el término de “Método de Trefftz” no tiene una definición clara, a pesar de su amplio reconocimiento y aplicación, por lo que en aras de ser precisos se propone la siguiente definición.

Definición 2.3: Sea $\Pi = \{ \Omega_1, \dots, \Omega_E \}$ una partición y para cada $i = 1, \dots, E$, sea \mathcal{H}_i definida por la condición $u_H^i \in \mathcal{H}_i$, si y sólo si $u_H^i \in \hat{D}_1(\Omega_i)$, $\mathcal{L}u_\Omega^i = f_\Omega$ y $\mathcal{L}u_H^i = 0$ en Ω_i . Además, sea $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_E$, entonces el problema que consiste en hallar $u_H^i \in \mathcal{H}_i$, $i = 1, \dots, E$, tal que

$$u = \sum_{i=1}^E u_\Omega^i + \sum_{i=1}^E u_H^i = u_\Omega + u_H; \tag{2.37}$$

sea la solución del Problema de Contorno con Saltos Prescritos, al cuál nos referiremos como “Problema de Trefftz”.

Obsérvese que la ‘solución del problema de Trefftz’, $u_H \equiv \sum_{i=1}^E u_H^i$, es necesariamente única, debido a que $u_H = u - u_\Omega$ y estamos considerando que la solución $u \in \hat{D}_1(\Omega)$ existe y es única, mientras que $u_\Omega \in \hat{D}_1(\Omega)$ es dato. Sin embargo, se debe hacer notar que la definición de $u_H \in \mathcal{H}$, cambiará si la función u_Ω , usada para especificar el término derecho de la ecuación diferencial, es modificada.

En la actualidad existen principalmente dos enfoques para la construcción de la solución del problema de Trefftz: el *directo* conocido como método de *Trefftz-Jirousek* [66-80] y el *indirecto* conocido también como método de *Trefftz-Herrera* [36,52-55,58,59]. En el

enfoque *directo* la solución general u_H del problema de Trefftz se busca usando las soluciones locales; éstas se ensamblan de tal manera que se satisfagan las condiciones de contorno en $\partial\Omega$ y las de continuidad a través de Σ , ya sean en un sentido puntual o en el de los residuos pesados. Mientras que en el enfoque de *Trefftz-Herrera*, se usan funciones de peso especiales que permiten obtener información suficiente en las fronteras interiores Σ , así como definir problemas locales bien planteados en cada una de las subregiones $\Omega_i (i = 1, \dots, E)$. Esta condición asegura que la solución global pueda ser reconstruida localmente a partir de la información disponible.

Existe otra clasificación, hecha desde otro punto de vista, de los métodos de Trefftz en dependencia de que las subregiones se intercepten o no y que genera dos grandes grupos: los métodos con subregiones *ajenas* y con subregiones *yuxtapuestas*; la cuál es comúnmente usada en el estudio de los métodos de descomposición de dominio [65,89].

Debido a que las dos formas de clasificación arriba expuestas son independientes una de la otra, éstas se pueden combinar dando lugar a cuatro tipos de métodos: los directos con subregiones *ajenas*, directos con subregiones *yuxtapuestas*, indirectos con subregiones *ajenas* e indirectos con subregiones *yuxtapuestas*.

Para las aplicaciones numéricas es relevante observar que el número de grados de libertad es mínimo cuando la información que es superflua se elimina, es decir, cuando sólo nos quedamos con la información que resulta esencial para definir problemas locales bien planteados. Generalmente esto es posible desarrollando métodos con subregiones *yuxtapuestas*.

Una formulación variacional básica del método directo de Trefftz se puede derivar a partir de la Ec. (2.33), de la siguiente manera:

Una función $u_H \in N_p$, donde $N_p = \{v \in \hat{D}_1(\Omega) : \mathcal{L}v = 0, \text{ en } \Omega\}$, es solución del problema de Trefftz sí y sólo sí

$$-\langle (B+J)\hat{u}_H, w \rangle = \langle (B+J)u_\Omega, w \rangle - \langle g+j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{D}_2(\Omega) \quad (2.38)$$

donde \hat{u}_H se usa para designar a cualquier función que pertenece a $\mathcal{N} \equiv N_p \subset \hat{D}_1(\Omega)$.

Obsérvese que la condición $\forall w \in \hat{D}_2(\Omega)$ puede ser relajada. En efecto, generalmente resulta suficiente requerir que la Ec. (2.38) se satisfaga para $\forall w \in N_Q \subset \hat{D}_2(\Omega)$, donde $N_Q = \{w \in \hat{D}_2(\Omega) : \mathcal{L}^* w = 0, \text{ en } \Omega\}$.

En el caso simétrico $\hat{D}_1(\Omega) = \hat{D}_2(\Omega) \equiv \hat{D}(\Omega)$ y entonces se puede definir el siguiente funcional:

$$Y(\hat{u}_H) \equiv -\frac{1}{2} \langle (B+J)\hat{u}_H, \hat{u}_H \rangle + \langle g+j - (B+J)u_\Omega, \hat{u}_H \rangle; \quad (2.39)$$

donde \hat{u}_H es cualquier función que pertenezca a $N_p \equiv N_Q \subset \hat{D}(\Omega)$. Entonces, $\hat{u}_H \equiv \sum_{i=1}^E \hat{u}'_H$ es solución del problema de Trefftz, si y sólo si, $Y'(\hat{u}_H) = 0$. Cuando el funcional bilineal $(B+J)$ es positivo definido en $N_p \equiv N_Q \subset \hat{D}(\Omega)$, el funcional $Y(\hat{u}_H)$ produce un principio de máximo. Nótese que es una condición suficiente para que $-(B+J)$ sea positivo definido en $N_p \equiv N_Q \subset \hat{D}(\Omega)$, el que $P-B-J$ sea positivo definido en $\hat{D}(\Omega)$. Además, cuando $N \subset N_p \equiv N_Q \subset \hat{D}(\Omega)$, es un subespacio en el cual $-(B+J)$ es positivo definido y $u_H \in N$, entonces $Y(\hat{u}_H)$ alcanza el máximo en $\hat{u}_H \in N$, si y sólo si, $\hat{u}_H = u_H$.

3 Métodos Indirectos de Trefftz-Herrera

3.1 Formulación Trefftz-Herrera de la Descomposición de Dominio

Si observamos la Ec.(2.33) del capítulo anterior, vemos que la información complementaria acerca de la solución $u \in \hat{D}_1(\Omega)$ en el interior de las subregiones $\Omega_i (i=1, \dots, E)$ está dada por el término Q^*u ; en la frontera exterior $\partial\Omega$ está dada por el término C^*u y en las fronteras interiores Σ está dada por el término K^*u . El primer paso para derivar un procedimiento de Trefftz-Herrera consiste en manipular la formulación variacional en términos de la información complementaria Ec.(2.33), de tal manera que quede concentrada en términos de la información buscada exclusivamente en $\Sigma \cup \partial\Omega$. Algunos autores como Jirousek [79] se refieren a $\Sigma \cup \partial\Omega$ como “frontera generalizada”. Para esto se requiere eliminar el término Q^*u en la ecuación lo cual se puede lograr tomando funciones de peso especiales, tales que satisfagan que $Qw = 0$. Por lo que resulta que:

$$-\langle (C + K)^*u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in N_Q \subset \hat{D}_2(\Omega) \quad (3.1)$$

Generalmente uno está interesado sólo en parte de la información contenida en $(C + K)^*u$, de manera que resulta útil introducir la siguiente descomposición del funcional bilineal $C + K$ y escribirla de la siguiente forma:

$$C + K \equiv S + R; \quad (3.2)$$

donde S se toma de manera tal que S^*u sea precisamente “la información buscada”.

Definición 3.1: Dadas S y R que satisfacen la Ec.(3.2), sea $\tilde{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ tal que existe una solución $u \in \hat{D}_1(\Omega)$ del PCSP con la propiedad de que $S^*\tilde{u}$ sea la información buscada; i.e.,

$$S^*\tilde{u} = S^*u; \quad (3.3)$$

Entonces decimos que $\tilde{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ contiene la “información buscada”.

En lo sucesivo usaremos a \tilde{u} para designar a las funciones que contienen la información buscada.

Sean $N_Q \subset \hat{D}_2(\Omega)$ y $N_R \subset \hat{D}_2(\Omega)$ los subespacios que son los nulos de Q y R respectivamente. Para poder formular una condición necesaria y suficiente de una función $\hat{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ que contenga la información buscada, es necesario definir el concepto de completéz de manera similar a como fue introducido por Herrera en 1980 [31], el cuál resulta muy útil para el estudio de familias de funciones completas [3].

Definición 3.2: Un subconjunto de funciones de peso $\mathcal{E} \subset N_Q \cap N_R$, se dice que es *TH-completo* para S^* , cuando para cualquier $\hat{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$, tenemos que:

$$\langle S^* \hat{u}, w \rangle = 0, \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad \Rightarrow S^* \hat{u} = 0; \quad (3.4)$$

Es evidente que una condición necesaria y suficiente de la existencia de sistemas TH-completos es que $N_Q \cap N_R$ sea por sí mismo un sistema TH-completo .

Teorema 3.1: Sea $\mathcal{E} \subset N_Q \cap N_R$ un sistema de funciones de peso TH-completo para S^* y supongamos que exista una solución $u \in \hat{D}_1(\Omega)$ del PCSP. Entonces, una condición necesaria y suficiente para que $\hat{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ contenga la información buscada es que

$$-\langle S^* \hat{u}, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (3.5)$$

Demostración: Que sea una condición necesaria se deriva directamente usando las Ecs.(3.1) y (3.2). Mientras que para probar que sea una condición suficiente, se debe observar que para la solución $u \in \hat{D}_1(\Omega)$ del PCSP, cuya existencia se supone, se cumple que

$$-\langle S^* u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (3.6)$$

Por lo tanto, si $\hat{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ satisface a la Ec.(3.5), entonces la combinación de las Ecs. (3.6) y (3.5) implican que:

$$\langle S^* \hat{u}, w \rangle = \langle S^* u, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (3.7)$$

Debido a que $\mathcal{E} \subset N_Q \cap N_R$ es TH-completo, se cumple que

$$\langle S^*(\hat{u}-u), w \rangle = 0; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad \Rightarrow \quad S^*(\hat{u}-u) = 0 \quad (3.8)$$

Y finalmente que

$$S^* \hat{u} = S^* u \quad (3.9)$$

lo cual significa, por la Definición 3.1, que $\hat{u} \in \hat{D}_1(\Omega)$ contiene la información buscada.

En las implementaciones numéricas el Teorema 3.1 produce el sistema básico de ecuaciones cuya solución es buscada.

Para obtener una formulación que resulte adecuada para problemas tanto espaciales así como dependientes del tiempo es necesario, además, introducir las descomposiciones de los funcionales bilineales C y K . Éstas se pueden escribir respectivamente como:

$$C \equiv C^s + C^c; \quad (3.10)$$

y

$$K \equiv K^s + K^c; \quad (3.11)$$

donde el superíndice "s" indica el miembro que contiene la información *buscada* y el superíndice "c" el miembro que contiene la información *conocida* o que es dato del problema.

En problemas dependientes del tiempo, el dominio Ω es una región espacio-temporal y tanto el estado inicial como el final del sistema que se está modelando mediante la ecuación diferencial parcial se consideran como partes de la frontera externa, $\partial\Omega$. Por lo que una elección apropiada de C^s permite manejar esta situación. Mientras que por otro lado en aplicaciones que no dependen del tiempo, como es el caso de los problemas elípticos, con frecuencia resulta conveniente definir a $S \equiv K^s$ y $R \equiv C + K^c$. En este caso es eliminada la información en la frontera exterior y, por lo tanto, la información buscada $S^* u \equiv K^s * u$ contiene información exclusivamente en la frontera interior. La elección de $K^c * u \equiv 0$ nos conduce a métodos indirectos con dominios ajenos, mientras que si lo tomamos $K^c * u \neq 0$, entonces corresponde a métodos indirectos con dominios yuxtapuestos.

Corolario 3.1: Cuando se conoce una solución particular del problema, $u_p \in \hat{D}_1(\Omega)$, tal que

$$Pu_p = f; \quad (3.12)$$

y

$$Bu_p = g; \quad (3.13)$$

entonces la Ec.(3.5) se puede reemplazar por:

$$- \langle K^S * \hat{u}, w \rangle = - \langle K^S * u_p, w \rangle + \langle J(u_p - u_\Sigma), w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (3.14)$$

Demostración: Se tiene que:

$$\langle (P - B - J)u_p, w \rangle = \langle (Q - C - K^S) * u_p, w \rangle; \quad (3.15)$$

debido a la fórmula de Green-Herrera de la Ec.(2.15), y por lo tanto

$$\langle f - g - j, w \rangle = - \langle K^S * u_p, w \rangle + \langle J(u_p - u_\Sigma), w \rangle; \quad (3.16)$$

ya que $\langle j, w \rangle = \langle Ju_\Sigma, w \rangle$. Cuando la Ec.(3.16) se sustituye en la Ec.(3.5), con $S * u \equiv K^S * u$, entonces se obtiene la Ec.(3.14).

En aplicaciones este resultado puede ser usado para reemplazar una expresión que involucra integrales definidas en el interior de las subregiones $\Omega_i (i = 1, \dots, E)$, por otra que involucra integrales definidas sólo en las frontera interna Σ . Generalmente, cuando no se conoce desde el comienzo, la construcción de u_p requiere de la solución de problemas de contorno locales en cada una de las subregiones $\Omega_i (i = 1, \dots, E)$.

Sería deseable que $K^S * u_p = 0$ ya que de este modo el término $- \langle K^S * u, w \rangle$, que aparece en el lado derecho de la Ec.(3.14), sería eliminado. Sin embargo, la condición $K^S * u_p = 0$, es con frecuencia incompatible con la condición Ec.(3.13), ya que la intersección de Σ y $\partial\Omega$, generalmente es no vacía. No obstante, cuando $g = 0$, existe un buen número de aplicaciones para las que estas condiciones son compatibles. En tales casos el siguiente resultado es útil.

Corolario 3.2: Bajo las hipótesis del Teorema 3.1 supongamos que existe una solución particular $u_p \in \hat{D}_1(\Omega)$, la cual cumple que

$$K^S * u_p = 0; \quad (3.17)$$

en adición a las Ecs.(3.12) y (3.13). Entonces la Ec.(3.14) se puede sustituir por:

$$- \langle K^S * \hat{u}, w \rangle = \langle J(u_p - u_\Sigma), w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (3.18)$$

Demostración: Sólo se necesita sustituir en la Ec.(3.14) la condición (3.17) para obtener la Ec.(3.18).

Observación: Aunque, como ya ha sido mencionado, existen muchas aplicaciones donde el Corolario 3.2 no puede ser aplicado, sin embargo para muchas de éstas es posible construir una $u_p \in \hat{D}_1(\Omega)$ tal que satisfaga las Ecs.(3.12), (3.13) y al mismo tiempo $\mathcal{K}^S * (u_p, *) = 0$, en todas partes de Σ , excepto en alguna vecindad de $\partial\Omega$. Entonces, el término $-\langle K^S * u_p, w \rangle$ que involucra la integral sobre la intersección de Σ con la vecindad de $\partial\Omega$ es fácil de calcular y hace la aplicación de la Ec.(3.14), casi tan simple como en la Ec.(3.18).

Teorema 3.2: Supongamos que $\hat{D}_1(\Omega) = \hat{D}_2(\Omega) \equiv \hat{D}(\Omega)$, $P = Q$, $B = C$ y $J = K$. Entonces:

- i) K^S es simétrico en $N_Q \cap N_C \cap N_{K^c} \equiv N_P \cap N_B \cap N_{K^c}$;
- ii) Si K^S es positivo definido en $N_Q \cap N_C \cap N_{K^c} \equiv N_P \cap N_B \cap N_{K^c}$ y dado cualquier $v \in N_B \equiv N_C$, existe un $v_H \in N_Q \cap N_C \cap N_{K^c}$ tal que

$$K^S v_H = K^S v; \quad (3.19)$$

entonces el funcional

$$Z(\hat{v}, \hat{v}) \equiv - \langle K^S \hat{v}, \hat{v}_H \rangle - 2 \langle J(u_p - u_\Sigma), \hat{v}_H \rangle; \quad (3.20)$$

alcanza el mínimo en $\hat{u} \in N_B$, si y sólo si \hat{u} es una solución en la frontera interior Σ .

Demostración: La condición i) puede ser obtenida si se observa que

$$\begin{aligned} \langle K^S u, w \rangle &= \langle Ku, w \rangle = \langle Ju, w \rangle = - \langle (P - B - J)u, w \rangle = \\ &= - \langle (Q - C - K)w, u \rangle = \langle K^S w, u \rangle; \end{aligned} \quad (3.21)$$

La proposición ii) resulta de manera directa si se usa la siguiente identidad:

$$Z(\hat{v}, \hat{v}) \equiv - \langle K^S(\hat{v}_H - u + u_p), \hat{v}_H - u + u_p \rangle + \langle K^S(u - u_p), u - u_p \rangle; \quad (3.22)$$

Observación: Cuando el operador K^{S*} es simétrico en $N \equiv N_Q \cap N_R$ el principio variacional de las Ecs. (3.5) y (3.14) puede ser derivado de los potenciales

$$Z(\hat{u}) \equiv - \frac{1}{2} \langle K^S \hat{u}, \hat{u} \rangle - \langle f - g - j, \hat{u}_H \rangle; \quad (3.23)$$

y

$$\tilde{Z}(\hat{u}) \equiv - \frac{1}{2} \langle K^S \hat{u}, \hat{u} \rangle + \langle K^{S*} u_p, w \rangle - \langle J(u_p - u_c), w \rangle; \quad (3.24)$$

respectivamente.

Cuando éste es positivo definido en $N \equiv N_Q \cap N_R$, entonces además, se cumple el principio de mínimo.

3.2 - Sistemas de Funciones TH-Completos

La aplicación de los métodos de Trefftz requieren disponer de sistemas de funciones los cuales sean completos para el espacio $\mathcal{W} \equiv \mathcal{W}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{W}_E$. Un criterio de completéz el cuál ha permitido la aplicación del enfoque teórico de funciones como un medio efectivo para la solución de problemas de contorno [3] es debido a Herrera [31,34]. Una extensión de este concepto está dada en la sección anterior 3.1, donde nos referimos a completéz TH (Trefftz-Herrera), la cual también se conoce como C-completéz o T-completéz. En esta

sección discutiremos brevemente acerca de los métodos que existen para desarrollar tales sistemas de funciones.

Los métodos disponibles para construir sistemas de funciones completos los podemos agrupar en dos categorías: los métodos analíticos y los métodos numéricos.

El enfoque clásico está basado en métodos analíticos y un resumen de su desarrollo puede ser hallado en el libro de Begehr y Gilbert [3]. El método teórico de funciones fue iniciado por Bergman [5] y Vekua [96], y luego desarrollado por Colton [25], Gilbert [28] y otros. Otra manera de construir sistemas de funciones completos consiste en usar las soluciones fundamentales y métodos espectrales, entre otros (ver [3]).

Sin embargo, el procedimiento más general para construir sistemas de funciones TH-completos es mediante el uso de métodos numéricos. Cualquier método numérico para la solución de problemas de contorno en ecuaciones diferenciales parciales puede ser aplicado, pero por su sencillez y eficiencia consideramos que el método de *colocación* [87] es uno de los más apropiados para la construcción de familias de soluciones las cuales generan espacios adecuados de condiciones de frontera.

Debido precisamente a lo atractivo que resultan desde el punto de vista numérico, los métodos de colocación se usarán en esta tesis para la aproximación numérica de sistemas de funciones TH-completos. De hecho el uso de colocación constituye parte esencial de la misma, puesto que bajo la perspectiva más general de la metodología de Trefftz-Herrera se pueden desarrollar diferentes métodos de colocación que resultan novedosos. En particular el método indirecto de colocación Trefftz-Herrera que será desarrollado en los siguientes capítulos exhibe propiedades de eficiencia comparativamente superiores a las del método convencional de colocación.

Se debe observar que los sistemas TH-completos en general, con excepción del caso unidimensional, están constituidos por un número infinito de funciones, por lo que para fines prácticos se construyen sistema de funciones hasta un cierto grado de aproximación;

es decir, se trunca el sistema de manera que resulte un número finito, lo cual introduce un error que hay que tomar en cuenta a la hora de evaluar el error global del método. Este es el modo tradicional de proceder en los métodos de elementos finitos donde las funciones base y de peso se construyen para polinomios hasta un cierto grado.

3.3 Rango de Aplicaciones

La metodología presentada en las secciones 3.1 y 3.2 posee una gran generalidad, ya que es aplicable a cualquier ecuación o sistema de ecuaciones diferenciales parciales lineales, independientemente de su tipo, donde incluso los coeficientes de los operadores pueden ser discontinuos a lo largo de las fronteras interiores Σ .

A continuación presentaremos cuatro ejemplos que sirven para ilustrar el amplio rango de aplicabilidad de la teoría.

3.3.1 Operadores Elípticos de Segundo Orden

Las fórmulas que se presentan son válidas cuando los coeficientes de los operadores son discontinuos en las fronteras interiores Σ .

- a) $\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu$, y $\mathcal{L}^* w \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla w) - \underline{b} \cdot \nabla w + cw$.
- b) $D_1(\Omega) \equiv D_2(\Omega) \equiv D(\Omega) \equiv \mathbf{H}^2(\Omega)$;
- c) $\hat{D}_1 \equiv \hat{D}_2 \equiv \hat{D} \equiv \mathbf{H}^2(\Omega_1) \oplus \mathbf{H}^2(\Omega_2) \oplus \dots \oplus \mathbf{H}^2(\Omega_E)$;
- d) $\mathcal{D}(u, w) \equiv \underline{a} \cdot (u \nabla w - w \nabla u) + \underline{b}uw$
- e) $\mathcal{B}(u, w) \equiv u(\underline{a}_n \cdot \nabla w + b_n w)$ y $\mathcal{C}(u, w) \equiv w \underline{a}_n \cdot \nabla u$,
donde $\underline{a}_n = \underline{a} \cdot \underline{n}$ y $b_n = \underline{b} \cdot \underline{n}$.
- f) $\mathcal{J}(u, w) \equiv \dot{w}[\underline{a}_n \cdot \nabla u] - [u](\overline{\underline{a}_n \cdot \nabla w + b_n w})$, y $\mathcal{K}(w, u) \equiv \dot{u}[\underline{a}_n \cdot \nabla w + b_n w] - [w](\overline{\underline{a}_n \cdot \nabla u})$,
- g) Datos en las frontera exterior: $u = u_0$
- h) Datos en las fronteras interiores: $[u_\Sigma]$ y $[\underline{a}_n \cdot \nabla u_\Sigma]$
- i) Información buscada en la frontera exterior: $\underline{a}_n \cdot \nabla u$,
- j) Información buscada en las fronteras interiores: \dot{u} y $(\overline{\underline{a}_n \cdot \nabla u})$,

3.3.2 Ecuación Biarmónica

- a) $\mathcal{L}u \equiv \Delta^2 u$ y $\mathcal{L}^* w \equiv \Delta^2 w$
- b) $D_1(\Omega) \equiv D_2(\Omega) \equiv D(\Omega) \equiv \mathbf{H}^4(\Omega)$;
- c) $\hat{D}_1 \equiv \hat{D}_2 \equiv \hat{D} \equiv \mathbf{H}^4(\Omega_1) \oplus \mathbf{H}^4(\Omega_2) \oplus \dots \oplus \mathbf{H}^4(\Omega_E)$;
- d) $\mathcal{D}(u, w) \equiv w \nabla \Delta u - u \nabla \Delta w + \Delta w \nabla u - \Delta u \nabla w$;
- e) $\mathcal{E}(u, w) \equiv \Delta w \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial \Delta w}{\partial n}$;
- f) $\mathcal{E}(w, u) \equiv \Delta u \frac{\partial w}{\partial n} - w \frac{\partial \Delta u}{\partial n}$;
- g) $\mathcal{J}(u, w) \equiv [u] \frac{\partial \Delta w}{\partial n} - w \left[\frac{\partial \Delta u}{\partial n} \right] + [\Delta u] \frac{\partial w}{\partial n} - \Delta w \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right]$;
- h) $\mathcal{K}(w, u) \equiv [w] \frac{\partial \Delta u}{\partial n} - u \left[\frac{\partial \Delta w}{\partial n} \right] + [\Delta w] \frac{\partial u}{\partial n} - \Delta u \left[\frac{\partial w}{\partial n} \right]$;
- i) Datos en las frontera exterior: u_b y $\partial u_b / \partial n$
- j) Datos en las fronteras interiores: $[u_{\Sigma}]$, $[\partial u_{\Sigma} / \partial n]$, $[\Delta u_{\Sigma}]$ y $[\partial \Delta u_{\Sigma} / \partial n]$
- k) Información buscada en la frontera exterior: Δu y $\partial \Delta u / \partial n$
- l) Información buscada en las fronteras interiores: \dot{u} , $\frac{\partial \dot{u}}{\partial n}$, $\dot{\Delta u}$ y $\frac{\partial \dot{\Delta u}}{\partial n}$

3.3.3 Problemas de Stokes

El sistema de ecuaciones que consideraremos es:

$$-\Delta \underline{u} + \nabla p = 0; \quad \nabla \cdot \underline{u} = 0$$

- a) Sean $D_1(\Omega) \equiv D_2(\Omega) \equiv D(\Omega) \equiv \mathbf{H}^2(\Omega) \oplus \mathbf{H}^1(\Omega)$ y se adoptará la notación

$$\tilde{\underline{u}} \equiv (\underline{u}, p) \text{ donde } \underline{u} \in D(\Omega).$$

- b) Se define el operador diferencial vectorial $\underline{\mathcal{L}}$ mediante $\underline{\mathcal{L}} \cdot \underline{u} \equiv (-\Delta \underline{u} + \nabla p, -\nabla \cdot \underline{u})$
- c) Entonces, como $\underline{\mathcal{L}}$ es autoadjunto, y escribiendo $\underline{w} \equiv (\underline{w}, q)$, se tiene que $\underline{w} \cdot \underline{\mathcal{L}} \cdot \underline{u} - \underline{u} \cdot \underline{\mathcal{L}} \cdot \underline{w} \equiv \nabla \cdot (\underline{u} \cdot \nabla \underline{w} - \underline{w} \cdot \nabla \underline{u} + p \underline{w} - q \underline{u})$
- d) $\mathcal{D}(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{u} \cdot (\nabla \underline{w} - q \underline{I}) - \underline{w} \cdot (\nabla \underline{u} - p \underline{I})$
- e) $\mathcal{B}(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{u} \cdot \left(\frac{\partial \underline{w}}{\partial n} - q \underline{n} \right)$
- f) $\mathcal{C}(\underline{w}, \underline{u}) \equiv \underline{w} \cdot \left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial n} - p \underline{n} \right)$
- g) $\mathcal{J}(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{w} \cdot \left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial n} - p \underline{n} \right] - [\underline{u}] \cdot \overline{\left[\frac{\partial \underline{w}}{\partial n} - q \underline{n} \right]}$
- h) $\mathcal{K}(\underline{w}, \underline{u}) \equiv \underline{u} \cdot \left[\frac{\partial \underline{w}}{\partial n} - q \underline{n} \right] - [\underline{w}] \cdot \overline{\left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial n} - p \underline{n} \right)}$
- i) Datos en las frontera exterior: \underline{u}_δ
- j) Datos en las fronteras interiores: $[\underline{u}_\tau]$ y $\left[\frac{\partial \underline{u}_\tau}{\partial n} - p \underline{n} \right]$
- k) Información buscada en la frontera exterior: $\frac{\partial \underline{u}}{\partial n} - p \underline{n}$
- l) Información buscada en las fronteras interiores: \underline{u} y $\overline{\left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial n} - p \underline{n} \right]}$

3.3.4 Ecuaciones de Elasticidad

Sean $D_1(\Omega) \equiv D_2(\Omega) \equiv D(\Omega) \equiv \mathbf{H}^2(\Omega) \oplus \mathbf{H}^2(\Omega) \oplus \mathbf{H}^2(\Omega)$ y definamos:

$$\underline{u} \equiv (u_1, u_2, u_3) \in D(\Omega); \quad \sigma_y(\underline{u}) \equiv C_{ijkl} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}$$

donde, como es usual, se supone que el tensor de elasticidad posee las siguientes simetrías:

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk}.$$

- a) Se define el operador diferencial vectorial $\underline{\mathcal{L}}$ por $\underline{\mathcal{L}} \cdot \underline{u} \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{u})$, cuyo adjunto es $\underline{\mathcal{L}}^* \cdot \underline{w} \equiv -\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{w})$
- b) $\mathcal{D}(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{u} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{w}) - \underline{w} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{u})$
- c) $\mathcal{B}(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{u} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{w}) \cdot \underline{n}$
- d) $\mathcal{C}(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{w} \cdot \underline{\underline{\sigma}}(\underline{u}) \cdot \underline{n}$
- e) $\beta(\underline{u}, \underline{w}) \equiv \underline{w} \cdot [\underline{\underline{\sigma}}(\underline{u})] \cdot \underline{n} - [\underline{u}] \cdot \overline{\underline{\underline{\sigma}}(\underline{w})} \cdot \underline{n}$
- f) $\kappa(\underline{w}, \underline{u}) \equiv \underline{u} \cdot [\underline{\underline{\sigma}}(\underline{w})] \cdot \underline{n} - [\underline{w}] \cdot \overline{\underline{\underline{\sigma}}(\underline{u})} \cdot \underline{n}$
- g) Datos en las frontera exterior: \underline{u}_d
- h) Datos en las fronteras interiores: $[\underline{u}_\tau]$ y $[\underline{\underline{\sigma}}(\underline{u}_\tau)] \cdot \underline{n}$
- i) Información buscada en la frontera exterior: $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{u}) \cdot \underline{n}$
- j) Información buscada en las fronteras interiores: \underline{u} y $\overline{\underline{\underline{\sigma}}(\underline{u})} \cdot \underline{n}$

4 Métodos de Colocación

4.1 Clasificación

Como ya se mencionó en el capítulo anterior, el método de colocación es ampliamente conocido por ser un procedimiento altamente eficiente y preciso para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales (ver referencias sobre métodos de colocación, Pág.122). Una característica que lo distingue es que su formulación es muy simple. Comúnmente el método de colocación es usado con splines. Sin embargo, se obtiene un punto de vista más general cuando se formula en espacios de funciones completamente discontinuas; es decir, se consideran espacios donde las funciones y sus derivadas pueden tener discontinuidades de salto. Este enfoque ha sido propuesto por Herrera [37-40], abriendo una nueva línea de investigación [46]. Desde esta perspectiva más general, la formulación habitual del método de colocación usando splines se puede interpretar como un caso particular.

La gran generalidad que nos ofrece este marco permite clasificar los métodos de colocación en dos grandes grupos: en *directos* e *indirectos*. Los métodos directos son aquellos en los cuales la colocación es usada para construir la solución directamente, mientras que los métodos indirectos son aquellos en los cuales se aplica la colocación para construir funciones de peso especializadas. En particular, el método convencional de colocación es un método directo, mientras que el de colocación *Trefftz-Herrera* es un ejemplo de método indirecto. Otra manera de clasificar los métodos de colocación depende de cómo se realice la partición del dominio en subregiones o elementos. Cuando las subregiones no se interceptan, se dice que la partición es de subregiones ajenas, mientras que cuando la intersección es no nula se dice que ésta es de subregiones yuxtapuestas.

4.2 Breve Reseña Histórica

Aparentemente, el concepto de colocación se debe a Slater [93]. Lanczos en 1938 [81] fue el primero que introdujo la idea de usar raíces de polinomios como puntos de colocación. En 1972 Russel y Shampine [91] proponen definir “a pedazos” la solución aproximada. Son

deBoor y Swartz en 1973 [26] quienes prueban que el uso de las raíces de los polinomios de Legendre como puntos de colocación conjugados con el uso de polinomios definidos a pedazos conducen a minimizar el error de la aproximación en el caso de una dimensión.

Carey y Finlayson en 1975 [9] realizan la colocación en elementos finitos usando splines e introducen el concepto de colocación ortogonal. Mas tarde, Prenter y Russel en 1976 [87] extienden el resultado anterior al caso de dos dimensiones. A partir de entonces se han desarrollado una gran variedad de estos métodos que en general difieren en la estrategia de usar polinomios de diferentes grados y seleccionar diferentes puntos de colocación. Una breve descripción histórica más detallada del método hasta 1983 se encuentra en la Tesis de Celia [14] y más actualizada en la Tesis de Brill [8]. Una revisión de los métodos de colocación se puede ver en Bialecki et al. [7].

En lo sucesivo nombraremos como colocación *convencional* al método de colocación más ampliamente usado, también conocido como colocación de Hermite o colocación ortogonal.

4.3 Problema Modelo: Ecuación Elíptica General de Segundo Orden

A continuación definiremos el *problema de contorno con saltos prescritos* para la ecuación elíptica general de segundo orden, el cuál nos servirá de *modelo* para poder ilustrar los métodos de colocación convencional y de Trefftz-Herrera.

Dada la ecuación diferencial

$$\mathcal{L}u = f_{\Omega}; \text{ en } \Omega \tag{4.1}$$

donde $\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu$, es el operador elíptico general de segundo orden y \underline{a} , \underline{b} y c son una matriz, un vector y un escalar de coeficientes respectivamente, que en general son funciones definidas en Ω , con condiciones de frontera de tipo Dirichlet

$$u = u_{\partial}; \text{ en } \partial\Omega \tag{4.2}$$

y saltos prescritos

$$[u] = [u_{\Sigma}] = j_{\Sigma}^0; \text{ y } [\underline{a} \cdot \nabla u] \cdot \underline{n} = [\underline{a} \cdot \nabla u_{\Sigma}] \cdot \underline{n} = j_{\Sigma}^1; \text{ en } \Sigma, \tag{4.3}$$

Hallar la solución u en Ω tal que satisfaga (4.1), (4.2) y (4.3). Se supone que la solución existe y es única.

4.4 Método Convencional de Colocación

Para propósitos de comparación a continuación haremos una breve descripción del método de colocación convencional aplicado al problema de contorno para la ecuación elíptica general de segundo orden, el cuál representa un caso particular del problema modelo, arriba introducido, Ecs (4.1) y (4.2), cuando no hay saltos prescritos por lo que $j_x^0 \equiv 0$ y $j_x^1 \equiv 0$, es decir la solución y sus derivadas son continuas.

Dada una partición del dominio Ω en elementos, que para ser concretos consideraremos hipercubos en n dimensiones. Entonces podemos representar la solución aproximada en un elemento como:

$$\begin{aligned} \hat{u}(x_1, x_2, \dots, x_n) = & \\ = \sum_{i_1=1}^2 \sum_{i_2=1}^2 \dots \sum_{i_n=1}^2 & \left\{ \sum_{p_1=0}^1 \sum_{p_2=0}^1 \dots \sum_{p_n=0}^1 \frac{\partial^{(p_1+p_2+\dots+p_n)} \hat{u}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)}{\partial x_1^{p_1} \partial x_2^{p_2} \dots \partial x_n^{p_n}} H_{i_1}^{p_1}(x_1) H_{i_2}^{p_2}(x_2) \dots H_{i_n}^{p_n}(x_n) \right\} \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde $H_k^{p_k}(x_k)$; $p_k = 0, 1$; $k = 1, \dots, n$, son los polinomios cúbicos de Hermite en una dimensión, que se pueden definir como:

$$H_i^0(x) = \begin{cases} 1 - \frac{(x_i - x)^2 \left(3 - 2 \frac{(x_i - x)}{h_x} \right)}{h_x^2}; & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ 1 - \frac{(x - x_i)^2 \left(3 - 2 \frac{(x - x_i)}{h_x} \right)}{h_x^2}; & x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (4.5)$$

$$H_i^1(x) = \begin{cases} -(x_i - x) \left(1 - \frac{(x_i - x) \left(2 - \frac{(x_i - x)}{h_x} \right)}{h_x} \right); & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (x - x_i) \left(1 - \frac{(x - x_i) \left(2 - \frac{(x - x_i)}{h_x} \right)}{h_x} \right); & x_i \leq x \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (4.6)$$

Como se observa a continuación, a través del producto tensorial podemos obtener los polinomios cúbicos de Hermite en n dimensiones:

$$H_{h_1 h_2 \dots h_n}^{p_1 p_2 \dots p_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = H_{h_1}^{p_1}(x_1) H_{h_2}^{p_2}(x_2) \dots H_{h_n}^{p_n}(x_n) \quad (4.7)$$

y entonces la Ec.(4.4) se puede reescribir como:

$$\hat{u}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i_1=1}^2 \sum_{i_2=1}^2 \dots \sum_{i_n=1}^2 \left\{ \sum_{p_1=0}^1 \sum_{p_2=0}^1 \dots \sum_{p_n=0}^1 \frac{\partial^{(p_1+p_2+\dots+p_n)} \hat{u}(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)}{\partial x_1^{p_1} \partial x_2^{p_2} \dots \partial x_n^{p_n}} H_{h_1 h_2 \dots h_n}^{p_1 p_2 \dots p_n}(x_1, x_2, \dots, x_n) \right\} \quad (4.8)$$

Esencialmente el método de colocación consiste en satisfacer de manera exacta la ecuación diferencial en ciertos puntos los cuales se conocen como *puntos de colocación*.

Esto se puede escribir de manera formal como:

$$[\mathcal{L}u - f_\Omega]_{(x_1^j, x_2^j, \dots, x_n^j)} = 0; \quad j = 1, \dots, N \quad (4.9)$$

donde $(x_1^j, x_2^j, \dots, x_n^j)$ - son los puntos de colocación.

Por consiguiente, la solución aproximada \hat{u} por elemento usando polinomios cúbicos de Hermite debe satisfacer el siguiente sistema de ecuaciones:

$$[\mathcal{L}\hat{u} - f_\Omega]_{(x_1^{e_n}, x_2^{e_n}, \dots, x_n^{e_n})} = 0; \quad e = 1, \dots, E; \quad j_1, j_2, \dots, j_n = 1, 2; \quad (4.10)$$

donde $e = 1, \dots, E$, es el número correspondiente al elemento y $(x_1^{e_n}, x_2^{e_n}, \dots, x_n^{e_n})$ -son las coordenadas de los puntos de colocación mapeados en cada elemento.

Los puntos de colocación más usuales son los que corresponden a la cuadratura Gaussiana. Estos puntos son los ceros de los polinomios de Legendre. Cuando se escogen los puntos Gaussianos como puntos de colocación, se dice que el método es de *colocación ortogonal* y ha sido probado [87] que en ese caso el error es mínimo.

Luego de sustituir en el sistema de ecuaciones (4.10) la expresión de la solución aproximada \hat{u} y evaluar en los puntos de colocación, resulta el sistema de ecuaciones del método de colocación convencional.

Aún restaría eliminar del sistema de ecuaciones resultante los valores de los nodos correspondientes a las condiciones de frontera del problema para que el sistema sea determinado.

Hasta aquí hemos ofrecido los detalles generales que caracterizan al procedimiento de colocación convencional en n dimensiones. Para un mejor análisis resulta conveniente hacer los desarrollos para problemas concretos.

Debido a que el caso en una dimensión ha sido ampliamente discutido en muchos artículos y en particular en [55] donde se da un bosquejo general del mismo, pasaremos a continuación, sin mas preámbulo, a discutir con cierto detalle el caso de dos dimensiones.

4.5 Colocación Convencional en 2-D

Dada una partición del dominio $\Omega = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ en $E_x \times E_y$ elementos, como se muestra en la Fig. 4.1.

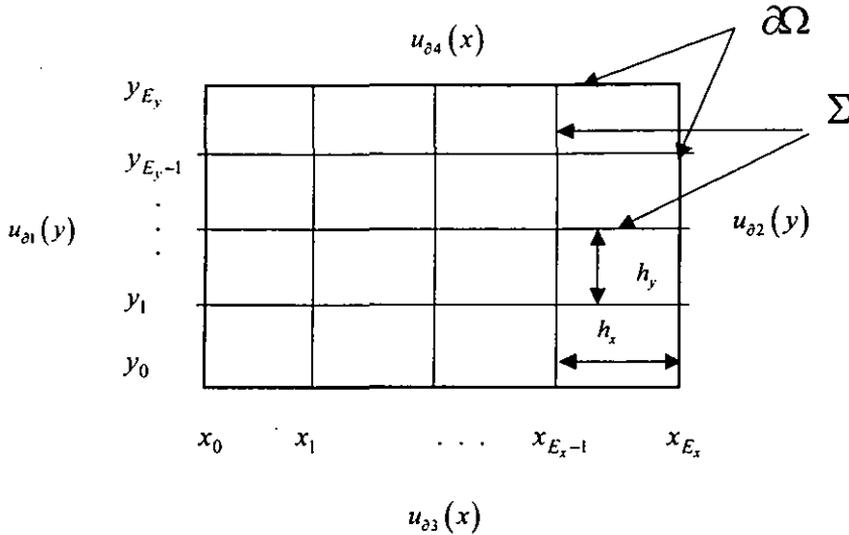


Fig. 4.1: Partición del dominio $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ dividido en $E_x \times E_y$ elementos rectangulares, donde $h_x = x_i - x_{i-1}$; $i = 1, \dots, E_x$ y $h_y = y_j - y_{j-1}$; $j = 1, \dots, E_y$.

Entonces la solución aproximada en un elemento $[x_{i-1}, x_i] \times [y_{j-1}, y_j]$ se expresa como:

$$\hat{u}(x, y) = \sum_{\alpha=i-1}^i \sum_{\beta=j-1}^j \left\{ \hat{u}_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}^{00}(x, y) + \frac{\partial \hat{u}_{\alpha\beta}}{\partial x} H_{\alpha\beta}^{10}(x, y) + \frac{\partial \hat{u}_{\alpha\beta}}{\partial y} H_{\alpha\beta}^{01}(x, y) + \frac{\partial^2 \hat{u}_{\alpha\beta}}{\partial x \partial y} H_{\alpha\beta}^{11}(x, y) \right\} \quad (4.11)$$

donde $H_{\alpha\beta}^{00}, H_{\alpha\beta}^{10}, H_{\alpha\beta}^{01}$ y $H_{\alpha\beta}^{11}$, son los polinomios cúbicos de Hermite en dos dimensiones, que se pueden observar en las figuras 4.2, 4.3, 4.4 y 4.5, graficados en el cuadrado unitario $[0, 1] \times [0, 1]$ con respecto al nodo $(0, 0)$.

De la expresión anterior, para la solución aproximada $\hat{u}(x, y)$, podemos ver que con cada nodo (x_α, y_β) tenemos asociadas cuatro incógnitas $\hat{u}_{\alpha\beta}, \frac{\partial \hat{u}_{\alpha\beta}}{\partial x}, \frac{\partial \hat{u}_{\alpha\beta}}{\partial y}$ y $\frac{\partial^2 \hat{u}_{\alpha\beta}}{\partial x \partial y}$.

Consecuentemente, la solución aproximada \hat{u} usando polinomios cúbicos de Hermite debe satisfacer el siguiente sistema de ecuaciones:

$$[\mathcal{L}\hat{u} - f_\Omega]_{(x_k^e, y_k^e)} \stackrel{!}{=} 0; \quad e = 1, \dots, E_x \times E_y; \quad k = 1, \dots, 4; \quad (4.12)$$

donde $e = 1, \dots, E_x \times E_y$ es el número correspondiente al elemento y (x_k^e, y_k^e) son las coordenadas de los cuatro puntos de colocación gaussianos $(-\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}) \times (-\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3})$ mapeados en cada elemento $[x_{i-1}, x_i] \times [y_{j-1}, y_j]$; $i = 1, \dots, E_x$, $j = 1, \dots, E_y$.

Como existen cuatro grados de libertad por nodo, entonces el número de incógnitas es de $4(E_x + 1)(E_y + 1)$. Para condiciones de frontera de tipo Dirichlet, tenemos $4(E_x + E_y + 1)$ valores conocidos en los nodos de frontera. Se puede observar que se conocen en las fronteras derecha e izquierda u y $\partial u / \partial y$, la derivada se obtiene por diferenciación, y de manera similar se conocen u y $\partial u / \partial x$ en las fronteras de abajo y arriba. Resumiendo, se conocen tres valores en cada nodo esquina y dos valores en el resto de los nodos de frontera, para un total de $4(E_x + E_y + 1)$ valores conocidos. Al sustituir las condiciones de frontera resulta un sistema con una matriz $4E_x E_y \times 4E_x E_y$ y su estructura es diagonal en bloques de 4×4 como se observa en la Fig. 4.6.

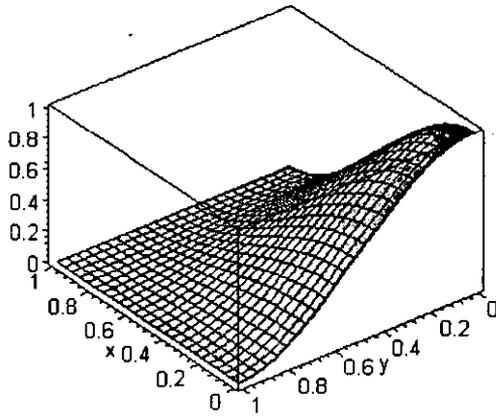


Fig. 4.2: Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{00}(x, y) = H_0^0(x)H_0^0(y)$

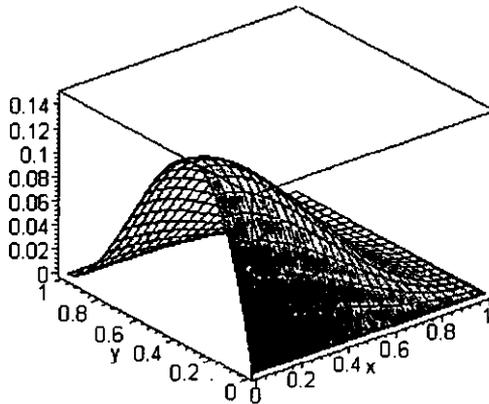


Fig. 4.3: Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{01}(x, y) = H_0^0(x)H_0^1(y)$

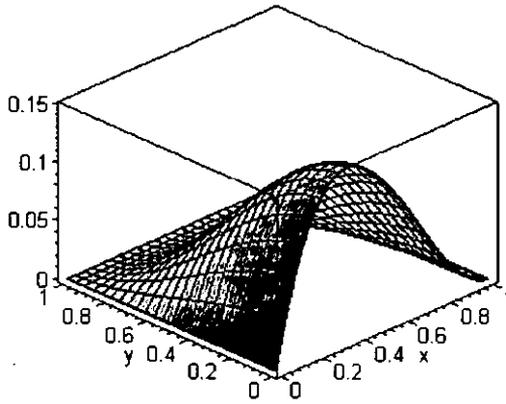


Fig. 4.4: Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{10}(x, y) = H_0^1(x)H_0^0(y)$

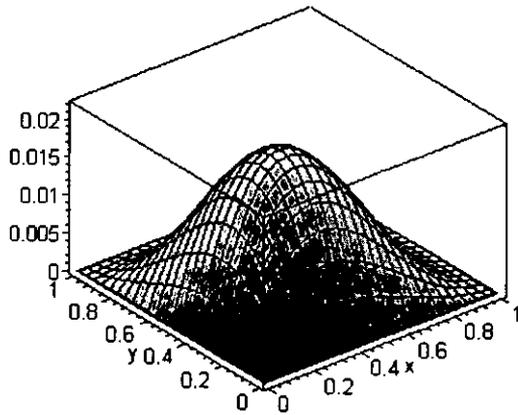


Fig. 4.5: Polinomio cúbico de Hermite $H_{00}^{11}(x, y) = H_0^1(x)H_0^1(y)$

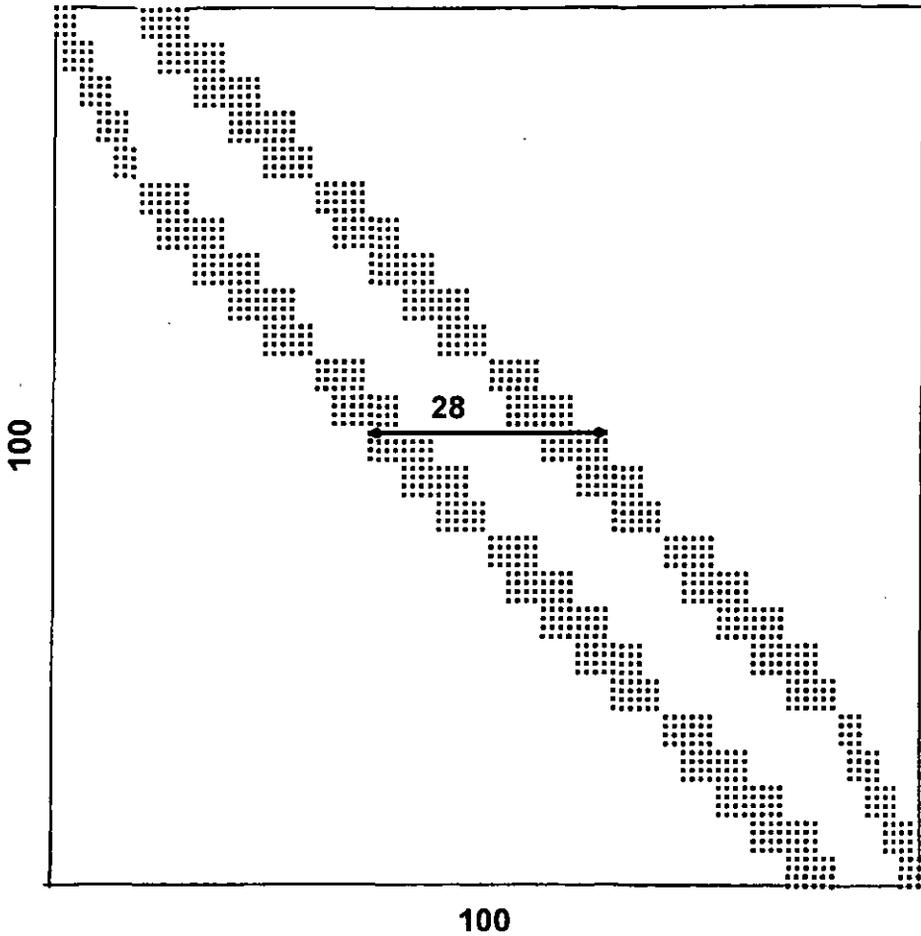


Fig. 4.6: Estructura de la matriz del método de Colocación Convencional en dos dimensiones usando funciones de peso cúbicas para una partición de 5x5 elementos. El ancho de banda es 28.

4.6 Características Numéricas de Colocación Convencional

Las propiedades numéricas del método de colocación convencional han sido bastante estudiadas y como mencionamos en la parte introductoria de este capítulo, existen referencias donde se trata este asunto de manera extensa, por lo que aquí nos limitaremos a señalar algunas que consideramos las más importantes a nuestro efecto.

El método convencional de colocación desde nuestro punto de vista es un método directo de colocación, puesto que construye la solución directamente, es decir la solución aproximada debe satisfacer la ecuación diferencial en los puntos de colocación. Esto se logra usando funciones bases que satisfagan *a priori* condiciones de continuidad para la función u y sus derivadas $(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y})$, es decir, que pertenecen a $C^1(\Omega)$ (espacio de funciones definidas en Ω con primera derivada continua). Por lo regular se usan los polinomios de Hermite de orden impar, a partir de los de orden tres que son los más usados. Y como puntos de colocación se emplean los ceros de los polinomios de Legendre que minimizan el error de la aproximación. A esta combinación también se le conoce como colocación ortogonal.

Los grados de libertad son potencias de dos (2^n) en dependencia de la dimensión n del problema. Para el caso en dos dimensiones tenemos cuatro incógnitas asociadas a cada nodo de la partición. La estructura de las matrices se muestra en la Fig. 4.6 usando polinomios cúbicos y la numeración natural de los nodos. Las matrices nunca son simétricas aunque el operador diferencial lo sea. Esto hace que se prefiera el uso de métodos directos como de eliminación gaussiana Gauss-Jordan para particiones con pocos elementos, y métodos como el de residuos generalizados (GEMRES) cuando el número de elementos es considerable. Usando el esquema de numeración Rojo-Negro se puede obtener una estructura de la matriz casi-simétrica [7,8].

Cuando se usan los polinomios cúbicos de Hermite el método produce un orden de error de $O(h^4)$.

Tabla 4.1: Resumen de las características numéricas del método convencional de colocación.

No.	Característica Numérica	Método de Colocación Convencional
1	Estrategia	Las condiciones de continuidad (salto) se satisfacen primero (por construcción) y luego la ecuación diferencial en los puntos de colocación.
2	Tipo de método de Colocación	Directo: la colocación se usa para construir de manera directa la solución aproximada.
3	Funciones bases	Pertencen a $C^1(\Omega)$.
4	Funciones de peso	No tiene
5	Polinomio de interpolación	Se usan polinomios de grado G impar ≥ 3
6	Puntos de colocación	Gaussianos: ceros del polinomio de Legendre
7	Número de puntos de colocación por elemento	NP^n para n dimensiones, donde $NP = G - 1$.
8	Partición del dominio	Yuxtapuesta
9	Grados de libertad (incógnitas) asociados con cada nodo	En 1-D son dos grados de libertad. En 2-D son cuatro grados de libertad. En general son 2^n , para n dimensiones.
10	Tamaño de las matrices	En 1-D es de $2NE \times 2NE$, en 2-D es de $4NE \times 4NE$. En general $2^n NE \times 2^n NE$, para n dimensiones, donde $NE = E_x \cdot E_y$ es el número total de elementos.
11	Tipo de Matrices	Aunque el operador sea positivo definido y simétrico siempre resultan matrices no simétricas
12	Ancho de Banda de la Matriz	$4(E_x + 2)$, usando una numeración natural de los nodos por x .
13	Métodos de Inversión de la Matriz	Factorización LU, Eliminación Gauss-Jordan, Residuos Generalizados GEMRES
14	Error Estimado $\ u - \hat{u}\ _\infty$	$O(h^{2G-2})$, donde G - grado del polinomio de interpolación.

5 Método de Colocación Trefftz-Herrera

5.1 Procedimiento Trefftz-Herrera

En la sección 2.4.1 se ofreció un resumen de los resultados necesarios para aplicar la formulación variacional del método de Trefftz-Herrera a la ecuación elíptica general de segundo orden. A continuación realizaremos su obtención de manera sistemática para el problema de contorno con saltos prescritos Ecs.(4.1), (4.2) y (4.3) introducido en la sección 4.2.

Para la derivación de un procedimiento Trefftz-Herrera partiremos de la Ec. (2.34) que es su formulación variacional en términos de la información buscada

$$\langle (Q - C - K) u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \hat{H}^2(\Omega) \quad (5.1)$$

donde $\hat{H}^2(\Omega) \equiv H^2(\Omega_1) \oplus H^2(\Omega_2) \oplus \dots \oplus H^2(\Omega_n)$

En este caso conocemos que el adjunto formal del operador elíptico \mathcal{L} dado en (4.1) es

$$\mathcal{L}^* w \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla w) - \underline{b} \cdot \nabla w + cw \quad (5.2)$$

Entonces la función bilineal vectorial $\mathcal{D}(u, w)$ se expresa como:

$$\mathcal{D}(u, w) = \underline{a} \cdot (u \nabla w - w \nabla u) + \underline{b} u w; \quad (5.3)$$

Lo cual resulta fácil de comprobar si verificamos que se cumple:

$$\begin{aligned} w \mathcal{L} u - u \mathcal{L}^* w &= \\ &= w \{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b} u) + cu \} - u \{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla w) - \underline{b} \cdot \nabla w + cw \} \\ &= -w \nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + w \nabla \cdot (\underline{b} u) + cw u + u \nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla w) + u \underline{b} \cdot \nabla w - cu w \\ &= -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot w \nabla u) - \underline{a} \cdot \nabla u \cdot \nabla w + \nabla \cdot (\underline{a} \cdot u \nabla w) + \underline{a} \cdot \nabla u \cdot \nabla w + \nabla \cdot (\underline{b} u w) \\ &= \nabla \cdot \{ \underline{a} \cdot (u \nabla w - w \nabla u) + \underline{b} u w \} \\ &= \nabla \cdot \{ \mathcal{D}(u, w) \} \end{aligned} \quad (5.4)$$

Una manera sistemática de obtener tanto el adjunto formal \mathcal{L}^* como la función bilineal vectorial $\mathcal{D}(u, w)$ se expone en [6].

Entonces podemos definir $\mathcal{B}(u, w)$ y $\mathcal{C}^*(u, w)$, cuando las condiciones de frontera son del tipo Dirichlet Ec.(4.2), se obtiene:

$$\mathcal{B}(u, w) = (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w) u_\partial; \quad (5.5)$$

$$\mathcal{C}^*(u, w) = w(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u_\partial); \quad (5.6)$$

donde $\mathcal{B}(u, w)$ involucra los valores prescritos de frontera, que en este caso son de tipo Dirichlet u_∂ y $\mathcal{C}^*(u, w)$ los valores no prescritos o complementarios de frontera que son de tipo Neumann $\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u_\partial$.

Y correspondientemente, para las condiciones de salto prescritas en las Ecs. (4.3) obtenemos aplicando el resultado de la Ec.(2.11) que :

$$\mathcal{J}(u, w) = -\mathcal{D}([u], \dot{w}) \cdot \underline{n} = -[u] \overline{(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w)} + \dot{w} [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u]; \quad (5.7)$$

$$\mathcal{K}^*(u, w) = \mathcal{D}(\dot{u}, [w]) \cdot \underline{n} = \dot{u} [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w] - [w] \overline{(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u)}; \quad (5.8)$$

donde $b_n = \underline{b} \cdot \underline{n}$; $[u] = u_+ - u_-$ y $\dot{u} = (u_+ + u_-)/2$;

Una forma conveniente de descomponer $\mathcal{J}(u, w)$ es agrupando los términos que involucran al salto de la función en $\mathcal{J}^0(u, w)$ y los correspondientes al salto del flujo en $\mathcal{J}^1(u, w)$ de la siguiente manera:

$$\mathcal{J}(u, w) = \mathcal{J}^0(u, w) + \mathcal{J}^1(u, w); \quad (5.9)$$

donde $\mathcal{J}^0(u, w) = -[u] \overline{(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w)}$ y $\mathcal{J}^1(u, w) = \dot{w} [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u]$ (5.10)

Y análogamente a $\mathcal{K}^*(u, w)$ la podemos descomponer en:

$$\mathcal{Z}^*(u, w) = \mathcal{Z}^0*(u, w) + \mathcal{Z}^1*(u, w); \tag{5.11}$$

$$\mathcal{Z}^0*(u, w) = \dot{u} \left[\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w \right] \quad \text{y} \quad \mathcal{Z}^1*(u, w) = -[w] \overline{(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u)} \tag{5.12}$$

donde $\mathcal{Z}^0*(u, w)$ involucra el promedio de la solución \dot{u} y $\mathcal{Z}^1*(u, w)$ el promedio del flujo $\overline{\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u}$ respectivamente.

Observación 5.1: En el capítulo 3 se dieron los fundamentos teóricos de los procedimientos Trefftz-Herrera que nos permiten manejar de manera sistemática y con flexibilidad la información del problema de contorno con saltos prescritos. En particular se anticiparon algunas variantes de cómo proceder en el caso de un problema elíptico donde la información buscada se puede concentrar en las fronteras interiores Σ si se eligen funciones de peso apropiadas que suministren información exclusivamente en Σ de manera que $S \equiv K^S$ es la información buscada y $R \equiv C + K^C$ es la información restante que debemos eliminar. Es muy importante destacar que en dependencia de la forma en que se elija la descomposición $K \equiv K^S + K^C$ se dará lugar a diferentes procedimientos de Trefftz-Herrera, lo cual es uno de los aspectos más valiosos de este enfoque y abre un mundo de posibilidades a la hora de desarrollar tanto un procedimiento numérico de discretización como de descomposición de dominio.

A continuación veremos en términos generales dos ejemplos de procedimientos de Trefftz-Herrera partiendo de la descomposición de K .

Procedimiento TH-1: Si

$$K^{S*} \equiv K^* \quad \text{y} \quad K^{C*} \equiv 0; \tag{5.13}$$

entonces resulta un procedimiento con subdominios ajenos:

$$- \langle K^* u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \tag{5.14}$$

donde $\mathcal{E} \subset N_Q \cap N_C$ y

$$N_Q = \{w \in \hat{H}^2(\Omega) : \mathcal{L}^* w = 0, \text{ en } \Omega\}; \quad (5.15)$$

$$N_C = \{w \in \hat{H}^2(\Omega) : w = 0, \text{ en } \partial\Omega\}; \quad (5.16)$$

Procedimiento TH-2: Si

$$K^{S*} \equiv K^{0*} \quad \text{y} \quad K^{C*} \equiv K^{1*}; \quad (5.17)$$

entonces resulta un procedimiento con subdominios yuxtapuestos:

$$-\langle K^{0*} u, w \rangle = \langle f - g - j, w \rangle; \quad \forall w \in \mathcal{E} \quad (5.18)$$

donde $\mathcal{E} \subset N_Q \cap N_C \cap N_{K^i}$, N_Q y N_C están definidos como en TH-1 y

$$N_{K^i} = \{w \in \hat{H}^2(\Omega) : [w] = 0, \text{ en } \Sigma\}; \quad (5.19)$$

Una simple inspección de los procedimientos arriba enunciados nos permite ver que en el primero TH-1 se obtendrá información que involucra tanto al promedio de la solución \hat{u} como al de su derivada en las fronteras interiores Σ , mientras que en el segundo TH-2 se obtiene información exclusivamente sobre \hat{u} en Σ . Esto nos lleva a dos conclusiones:

- i. que el segundo procedimiento resulta computacionalmente más eficiente puesto que involucra menos información y por consiguiente las matrices del sistema son más pequeñas.
- ii. que en el primero obtenemos información redundante ya que resulta suficiente con obtener el promedio de \hat{u} en Σ , para obtener problemas bien planteados en cada una de las subregiones de la partición $\Omega, i=1, \dots, E$. Nótese que si conocemos el

promedio de \dot{u} y el salto $[u]$, entonces podemos conocer los valores de la solución a cada lado de Σ , es decir

$$u_+ = \dot{u} + \frac{1}{2}[u] \quad \text{y} \quad u_- = \dot{u} - \frac{1}{2}[u]; \quad (5.20)$$

Por las ventajas que ofrece, en lo sucesivo nos concentraremos en el desarrollo del segundo procedimiento TH-2, al cual llamaremos simplemente TH.

Retomando la Ec. (5.18) y definiendo los funcionales f , g y j que de acuerdo al problema toman la forma siguiente:

$$\langle f, w \rangle = \int_{\Omega} w f_{\Omega} d\mathbf{x}; \quad (5.21)$$

$$\langle g, w \rangle = \int_{\partial\Omega} u_{\partial} (\underline{a} \cdot \nabla w + \underline{b}w) \cdot \underline{n} d\mathbf{x}; \quad (5.22)$$

$$\langle j, w \rangle = - \int_{\Sigma} [u_{\Sigma}] \overline{(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w)} d\mathbf{x} + \int_{\Sigma} \dot{w} [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u_{\Sigma}] d\mathbf{x}; \quad (5.23)$$

Entonces, sustituyendo f , g , j y la expresión de $\langle K^0 * u, w \rangle$ en la Ec. (5.18) obtenemos:

$$\begin{aligned} - \int_{\Sigma} \dot{u} [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w] d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} w f_{\Omega} d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} u_{\partial} (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w) d\mathbf{x} + \\ &+ \int_{\Sigma} [u_{\Sigma}] \overline{(\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w)} d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} \dot{w} [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla u_{\Sigma}] d\mathbf{x}; \quad \forall w \in \mathcal{E} \end{aligned} \quad (5.24)$$

En particular, cuando los coeficientes son funciones continuas, el operador $\mathcal{K}^0 * (u, w)$ dado en la Ec.(5.12) toma la forma

$$\mathcal{K}^0 * (u, w) = \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot [\nabla w] \dot{u}; \quad (5.25)$$

ya que $[w] = 0$, es decir es continua en Σ por pertenecer a $N_{\mathcal{L}^1}$, mientras que el operador de frontera $\mathcal{B}(u, w)$ se transforma en

$$\mathcal{B}(u, w) = (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w) u_{\partial}; \quad (5.26)$$

ya que w se anula en la frontera exterior $\partial\Omega$ por pertenecer a $N_{\mathcal{L}^1}$.

Sustituyendo las Ecs (5.25) y (5.26) en la Ec. (5.24) resulta:

$$\begin{aligned}
 - \int_{\underline{x}} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot [\nabla w] \underline{u} d\underline{x} &= \int_{\Omega} w f_{\Omega} d\underline{x} - \int_{\partial\Omega} u_{\alpha} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w d\underline{x} + \\
 + \int_{\Sigma} \int_{\Sigma}^0 (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w + b_n w) d\underline{x} - \int_{\Sigma} w j_{\Sigma}^i d\underline{x}; & \quad \forall w \in \mathcal{E}
 \end{aligned}
 \tag{5.27}$$

que es la expresión particular del procedimiento TH cuando los coeficientes son continuos.

Hasta aquí hemos ofrecido los detalles generales que caracterizan al procedimiento de colocación Trefftz-Herrera en n dimensiones. Aún nos restaría por desarrollar la construcción de sistemas de funciones de peso que fueran TH-completos en el sentido expuesto en el capítulo 3 para el problema de contorno con saltos prescritos Ecs.(4.1), (4.2) y (4.3), para lo cual, en la presente tesis, se usaran polinomios hasta cierto grado G y mostraremos su implementación para el caso lineal y cúbico. Como hicimos con colocación convencional nos concentraremos en la discusión del problema en dos dimensiones.

5.2 – Estrategia para la Construcción de un Sistema de Funciones de Peso TH-Completo usando Polinomios.

Consideraremos la misma partición rectangular del dominio dada en la Fig. 4.1 del capítulo anterior y analizaremos el caso con subregiones yuxtapuestas. Para esto asociaremos tomaremos una subregión Ω_j formada por cuatro elementos Ω_j^{λ} , $\lambda = I, II, III$ y IV , de la descomposición de dominio asociados con su nodo central (x_j, y_j) como se muestra en la Fig.5.1a. La frontera de la subregión Ω_j es $\partial\Omega_j$, mientras que la parte de la frontera interior Σ que une a los cuatro elementos de Ω_j la designaremos por Σ_j (Fig. 5.1a) y está constituida por cuatro segmentos numerados en forma de cruz.

Entonces, en cada subregión Ω_j se construye un sistema de funciones que sean continuas Ec.(5.19), se anulen en $\partial\Omega$ Ec.(5.16) y satisfagan la ecuación adjunta homogénea $\mathcal{L}^* w = 0$, Ec.(5.15). De esta manera, usando la numeración arriba introducida en Σ_j , se pueden construir cinco grupos de funciones de peso asociadas con cada nodo (x_j, y_j) .

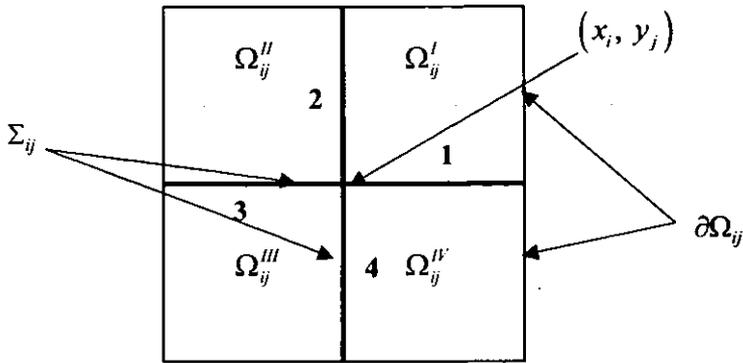


Fig. 5.1a: Subregión Ω_{ij} asociada con el nodo (x_i, y_j) .

Estas se caracterizan (Fig. 5.1b) por: $w^0(x, y) = 1$ y su soporte es la subregión Ω_{ij} completa; $w^1(x, y)$ se anula idénticamente en $\Omega_{ij}^{II} \cup \Omega_{ij}^{III}$ y su soporte es $\Omega_{ij}^I \cup \Omega_{ij}^{IV}$; $w^2(x, y)$ se anula idénticamente en $\Omega_{ij}^{III} \cup \Omega_{ij}^{IV}$ y su soporte es $\Omega_{ij}^I \cup \Omega_{ij}^{II}$; $w^3(x, y)$ se anula idénticamente en $\Omega_{ij}^I \cup \Omega_{ij}^{IV}$ y su soporte es $\Omega_{ij}^{II} \cup \Omega_{ij}^{III}$; $w^4(x, y)$ se anula idénticamente en $\Omega_{ij}^I \cup \Omega_{ij}^{II}$ y su soporte es $\Omega_{ij}^{III} \cup \Omega_{ij}^{IV}$.

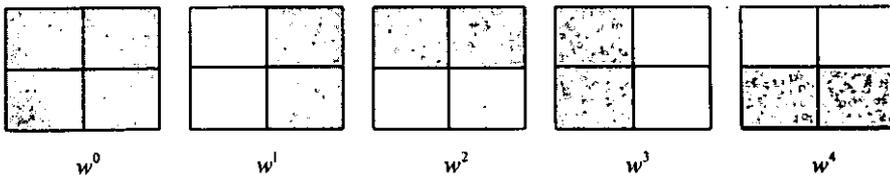


Fig. 5.1b: Soportes de las funciones de peso (sombreados).

Grupo 0.- Este grupo está formado por una sola función la cual es lineal en cada una de las cuatro fronteras interiores de la Fig. 5.1b, y toma el valor $w^0(x_i, y_j) = 1$, en el nodo (x_i, y_j) .

Grupo 1.- La restricción al intervalo "1", de la Fig. 5.1b, es, cuanto más, un polinomio de grado "G", el cual se anula en los extremos del intervalo "1".

Grupo 2.- La restricción al intervalo "2", de la Fig. 5.1b, es, cuanto más, un polinomio de grado "G", el cual se anula en los extremos del intervalo "2".

Grupo 3.- La restricción al intervalo "3", de la Fig. 5.1b, es, cuanto más, un polinomio de grado "G", el cual se anula en los extremos del intervalo "3".

Grupo 4.- La restricción al intervalo "4", de la Fig. 5.1b, es, cuanto más, un polinomio de grado "G", el cual se anula en los extremos del intervalo "4".

Se debe destacar que la construcción de las funciones de peso hecha de la manera expuesta no conduce directamente a un sistema de funciones linealmente independiente. Esto se debe al hecho de que cada par de nodos vecinos comparten un mismo intervalo debido a que nuestra partición del dominio es yuxtapuesta. Por ejemplo el intervalo es considerado "1" por el nodo de la izquierda, mientras que es "3" según el nodo de la derecha y por lo tanto las funciones asociadas con estos intervalos se cuentan doble.

5.3 Construcción de las Funciones de Peso usando Colocación

5.3.1 Funciones de Peso Lineales

Para el caso de funciones de peso lineales en Σ tenemos una sola función de peso definida en la subregión Ω_y , asociada a cada nodo interior (x_i, y_j) , para $i = 1, \dots, E_x - 1$, $j = 1, \dots, E_y - 1$, cuya expresión es:

$$w_{ij}^{0\lambda}(x, y) = B_{ij}^{0\lambda}(x, y) + \sum_{\alpha=1}^4 C_{ij}^{\lambda\alpha} N_{ij}^{\lambda\alpha}(x, y); (x, y) \in \Omega_{ij}^{\lambda}; \lambda = I, \dots, IV. \quad (5.28)$$

donde las funciones $B_{ij}^{\alpha\lambda}(x, y)$ son polinomios lineales en las fronteras internas Σ_{ij} , que se destaca con líneas gruesas en la Fig. 5.1a, mientras que las funciones $N_y^{\lambda\alpha}(x, y)$; $\alpha = 1, \dots, 4$, se anulan en todo $\Sigma_{ij} \cup \partial\Omega_{ij}$.

La construcción de las funciones de peso se realiza de manera independiente en cada uno de los cuatro elementos rectangulares (o cuadrantes) asociados a cada nodo interior (x_i, y_j) , los cuales constituyen su soporte. Su definición por cuadrantes o elementos es como sigue:

Para $\lambda=1$ (primer cuadrante): $(x, y) \in [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$

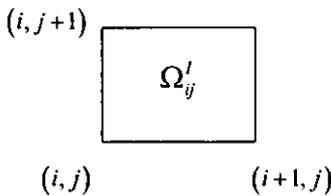


Fig. 5.2a: Soporte del primer cuadrante Ω_{ij}^I de la función de peso lineal $w_{ij}^0(x, y)$.

$$B_{ij}^{0I}(x, y) = \left(1 - \frac{x-x_i}{h_x}\right) \left(1 - \frac{y-y_j}{h_y}\right); \tag{5.29}$$

$$\begin{aligned} N_y^{I1}(x, y) &= H_i^1(x)H_j^1(y); N_y^{I2}(x, y) = H_{i+1}^1(x)H_j^1(y); \\ N_y^{I3}(x, y) &= H_i^1(x)H_{j+1}^1(y); N_y^{I4}(x, y) = H_{i+1}^1(x)H_{j+1}^1(y); \end{aligned} \tag{5.30}$$

Para $\lambda=II$ (segundo cuadrante): $(x, y) \in [x_{i-1}, x_i] \times [y_j, y_{j+1}]$

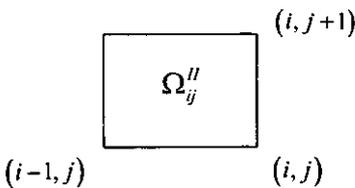


Fig. 5.2b: Soporte del segundo cuadrante Ω_{ij}^{II} de la función de peso lineal $w_{ij}^0(x, y)$.

$$B_y^{0II}(x, y) = \left(1 - \frac{x_i - x}{h_x}\right) \left(1 - \frac{y - y_j}{h_y}\right); \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} N_y^{III1}(x, y) &= H_{i-1}^1(x)H_j^1(y); N_y^{III2}(x, y) = H_i^1(x)H_j^1(y); \\ N_y^{III3}(x, y) &= H_{i-1}^1(x)H_{j+1}^1(y); N_y^{III4}(x, y) = H_i^1(x)H_{j+1}^1(y); \end{aligned} \quad (5.32)$$

Para $\lambda=III$ (tercer cuadrante): $(x, y) \in [x_{i-1}, x_i] \times [y_{j-1}, y_j]$

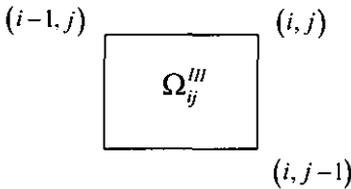


Fig. 5.2c: Soporte del tercer cuadrante Ω_{ij}^{III} de la función de peso lineal $w_y^0(x, y)$.

$$B_y^{0III}(x, y) = \left(1 - \frac{x_i - x}{h_x}\right) \left(1 - \frac{y_j - y}{h_y}\right); \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} N_y^{III1}(x, y) &= H_{i-1}^1(x)H_{j-1}^1(y); N_y^{III2}(x, y) = H_i^1(x)H_{j-1}^1(y); \\ N_y^{III3}(x, y) &= H_{i-1}^1(x)H_j^1(y); N_y^{III4}(x, y) = H_i^1(x)H_j^1(y); \end{aligned} \quad (5.34)$$

Para $\lambda=IV$ (cuarto cuadrante): $(x, y) \in [x_i, x_{i+1}] \times [y_{j-1}, y_j]$

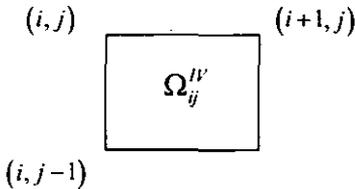


Fig. 5.2d: Soporte del cuarto cuadrante Ω_{ij}^{IV} de la función de peso lineal $w_y^0(x, y)$.

$$B_y^{0IV}(x, y) = \left(1 - \frac{x - x_i}{h_x}\right) \left(1 - \frac{y_j - y}{h_y}\right); \quad (5.35)$$

$$\begin{aligned}
 N_{ij}^{H^1}(x, y) &= H_i^1(x)H_{j-1}^1(y); N_{ij}^{H^2}(x, y) = H_{i+1}^1(x)H_{j-1}^1(y); \\
 N_{ij}^{H^3}(x, y) &= H_i^1(x)H_j^1(y); N_{ij}^{H^4}(x, y) = H_{i+1}^1(x)H_j^1(y);
 \end{aligned}
 \tag{5.36}$$

donde $H_i^1(x)$ y $H_j^1(y)$ -son los polinomios cúbicos de Hermite ya definidos en el capítulo anterior, en colocación convencional.

Observación 5.2: En el caso de funciones de peso lineales tenemos tantas funciones como nodos interiores, ya que hay una función $w_{ij}^0(x, y)$ asociada a cada nodo interior (x_i, y_j) , para $i = 1, \dots, E_x - 1$, $j = 1, \dots, E_y - 1$.

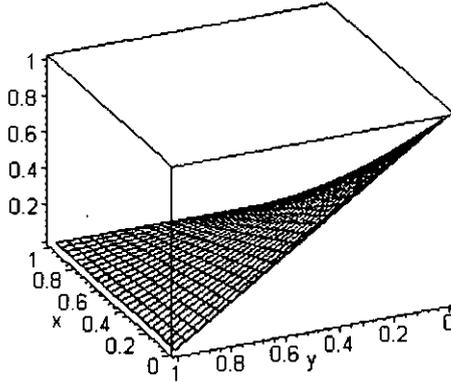


Fig. 5.3: Gráfico de la función bilineal $B_{00}^{01}(x, y)$

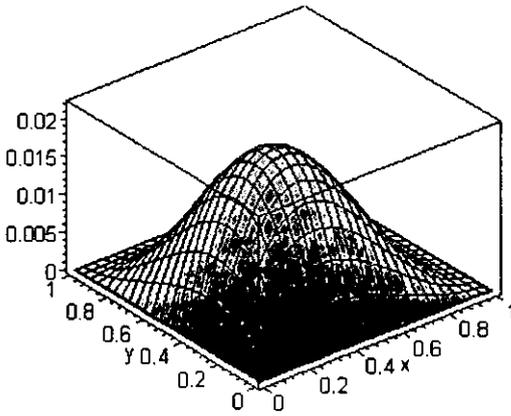


Fig. 5.4: Gráfico de la función $N_{00}^{11}(x, y) = H_0^1(x)H_0^1(y)$

Una manera de construir las funciones de peso es aplicando el método de colocación. En este caso la colocación se aplica para satisfacer la condición (5.15), es decir las funciones de peso deben ser soluciones del operador adjunto homogéneo. Entonces resulta el sistema de colocación:

$$\mathcal{L} w_y^{0\lambda}(x^p, y^p) = 0; \quad p = 1, \dots, 4 \tag{5.37}$$

Sustituyendo la expresión de las funciones de peso $w_y^{0\lambda}$ Ec.(5.28) en la Ec. (5.37) y evaluando en los puntos de colocación se obtiene:

$$\sum_{\alpha=1}^4 C_y^{\lambda\alpha} \mathcal{L} N_y^{\lambda\alpha}(x^p, y^p) = \mathcal{L} B_y^{0\lambda}(x^p, y^p); \quad p = 1, \dots, 4. \tag{5.38}$$

donde $C_y^{\lambda\alpha}$; $\alpha = 1, \dots, 4$ son los coeficientes de las funciones de peso $w_y^{0\lambda}$.

El sistema de ecuaciones que resulta es de dimensión 4×4 y se resuelve para cada nodo interior $i = 1, \dots, E_x - 1$; $j = 1, \dots, E_y - 1$ y para cada cuadrante $\lambda = I, \dots, IV$. De esta manera se obtienen los coeficientes $C_y^{\lambda\alpha}$; $\alpha = 1, \dots, 4$ correspondientes a las funciones de peso $w_y^{0\lambda}$.

5.3.2 Funciones de Peso Cúbicas

Considerando las mismas condiciones que para el caso lineal, cuando las funciones son cúbicas en Σ , tenemos tres funciones de peso $w_y^{\mu}(x, y)$; $\mu = 0, 1$ y 2 , asociadas con cada nodo interior (x, y) en la subregión Ω_y . Las funciones $B_y^{\mu\lambda}(x, y)$ satisfacen condiciones cúbicas de frontera en Σ_y que se destacan con líneas gruesas en las figuras 5.5, 5.6 y 5.7, mientras que las funciones $N_y^{\lambda\alpha}(x, y)$ son las mismas del caso lineal y se anulan en todo $\Sigma_y \cup \partial\Omega_y$.

Función $w_y^0(x, y)$:

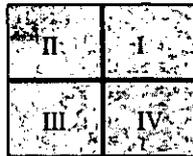


Fig. 5.5: Soporte de la función de peso cúbica $w_y^0(x, y)$.

$$w_y^{0\lambda}(x, y) = B_y^{0\lambda}(x, y) + \sum_{\alpha=1}^4 C_y^{\lambda\alpha} N_y^{\lambda\alpha}(x, y); \quad (x, y) \in \Omega_y^\lambda; \quad \lambda = I, \dots, IV. \quad (5.39)$$

donde
$$B_y^{0\lambda}(x, y) = H_i^0(x) H_j^0(y); \quad \lambda = I, \dots, IV \quad (5.40)$$

ver Fig. 5.8 y las funciones $N_y^{\lambda\alpha}(x, y); \alpha = 1, \dots, 4, \lambda = I, II, III, IV$ se definen como en el caso lineal.

Función $w_y^1(x, y)$:

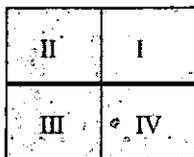


Fig. 5.6: Soporte de la función de peso cúbica $w_y^1(x, y)$.

$$w_y^{1\lambda}(x, y) = B_y^{1\lambda}(x, y) + \sum_{\alpha=1}^4 C_y^{\lambda\alpha} N_y^{\lambda\alpha}(x, y); \quad (x, y) \in \Omega_y^\lambda; \quad \lambda = I, \dots, IV \quad (5.41)$$

donde
$$B_y^{1\lambda}(x, y) = H_i^1(x) H_j^0(y); \quad \lambda = I, \dots, IV \quad (5.42)$$

ver Fig. 5.9 y las funciones $N_y^{\lambda\alpha}(x, y); \alpha = 1, \dots, 4, \lambda = I, II, III, IV$ se definen como en el caso lineal.

Función $w_y^2(x, y)$:

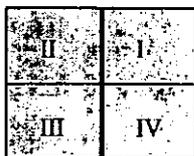


Fig. 5.7: Soporte de la función de peso cúbica $w_y^2(x, y)$.

$$w_y^{2\lambda}(x, y) = B_y^{2\lambda}(x, y) + \sum_{\alpha=1}^4 C_y^{\lambda\alpha} N_y^{\lambda\alpha}(x, y); \quad (x, y) \in \Omega_y^\lambda; \quad \lambda = I, \dots, IV \quad (5.43)$$

donde
$$B_{ij}^{2\lambda}(x, y) = H_i^0(x) H_j^1(y); \quad \lambda = I, \dots, IV \tag{5.44}$$

ver Fig. 5.10 y las funciones $N_j^{\lambda\alpha}(x, y); \alpha = 1, \dots, 4, \lambda = I, II, III, IV$ se definen como en el caso lineal.

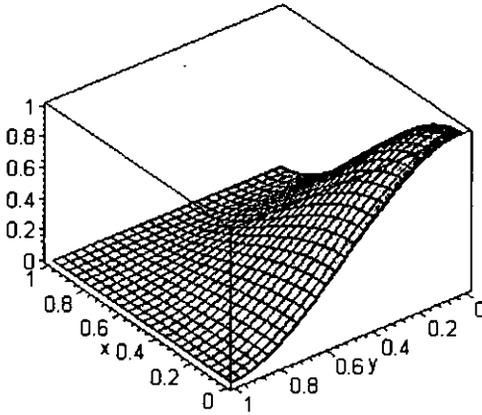


Fig. 5.8: Gráfico de la función bicúbica $B_{00}^0(x, y) = H_0^0(x)H_0^0(y)$

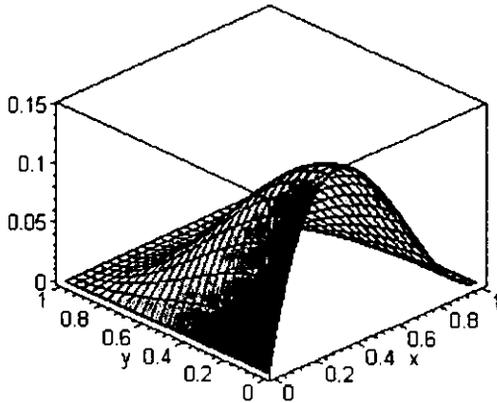


Fig. 5.9: Gráfico de la función bicúbica $B_{00}^1(x, y) = H_0^1(x)H_0^0(y)$

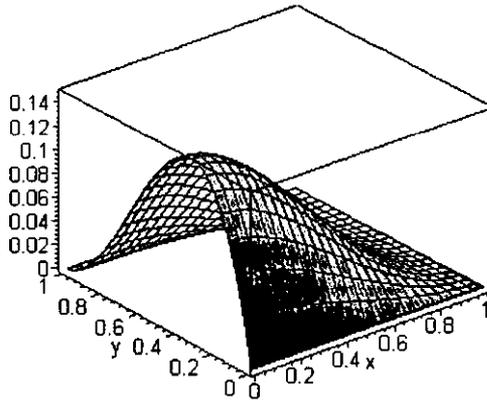


Fig. 5.10: Gráfico de la función bicúbica $B_{00}^{2I}(x, y) = H_0^0(x)H_0^1(y)$

De modo análogo al caso lineal, las funciones de peso cúbicas $w_y^{\mu\lambda}(x, y)$; $\mu=0,1,2$; $\lambda=I, II, III, IV$; se construyen aplicando el método de colocación:

$$\mathcal{L} w_y^{\mu\lambda}(x^p, y^p) = 0; \quad p = 1, \dots, 4 \tag{5.45}$$

Sustituyendo la expresión de las funciones de peso Ecs.(5.39), (5.41) y (5.43) en la Ec.(5.45) y evaluando en los puntos de colocación se obtiene:

$$\sum_{\alpha=1}^4 C_y^{\mu\lambda\alpha} \mathcal{L} N_y^{\lambda\alpha}(x^p, y^p) = \mathcal{L} B_y^{\mu\lambda}(x^p, y^p); \quad p = 1, \dots, 4. \tag{5.46}$$

El sistema de ecuaciones que resulta es de dimensión 4×4 y se resuelve para cada nodo interior $i = 1, \dots, E_x - 1$; $j = 1, \dots, E_y - 1$ y para cada cuadrante $\lambda = I, \dots, IV$. De esta manera se obtienen los coeficientes $C_y^{\mu\lambda\alpha}$; $\mu=1,2$ y 3 , $\alpha=1, \dots, 4$ correspondientes a las funciones de peso $w_y^{\mu\lambda}$.

Observación 5.3: En el caso de funciones de peso cúbicas tenemos tres funciones $w_y^\mu(x, y)$; $\mu = 0, 1$ y 2 , por cada nodo interior (x, y_i) para $i = 1, \dots, E_x - 1$, $j = 1, \dots, E_y - 1$. Además tenemos una función asociada a cada nodo frontera, exceptuando las esquinas, es decir, $w_y^1(x, y)$, $i = 0, E_x$, $j = 1, \dots, E_y - 1$, para los nodos que pertenecen a las fronteras izquierda y derecha, mientras que $w_y^2(x, y)$, $i = 1, \dots, E_x - 1$, $j = 0, E_y$ asociada a los nodos que pertenecen a las fronteras superior e inferior, de manera que todas satisfacen la condición (5.16) de anularse en la frontera.

5.4 Sistema de Ecuaciones del Método de Colocación Trefftz-Herrera

Una vez construidas las funciones de peso, nos restaría expresar de forma apropiada el promedio de la solución aproximada $\hat{u}(x, y)$, de manera que al sustituirla en la formulación variacional nos permitiría obtener el sistema de ecuaciones algebraicas correspondiente. Una manera de hacerlo es como se procede usualmente en elementos finitos, usando una combinación lineal de funciones bases. Para escoger las funciones bases tenemos una amplia libertad de elección puesto que sólo necesitamos que sean funciones definidas en Σ . Una elección lógica, que aplicaremos en nuestra aproximación, es usar como funciones bases a las restricciones de las funciones de peso $w_y^\nu(x, y)$ en Σ , es decir $B_y^\nu(x, y)$. La expresión de $\hat{u}(x, y)$ se completa agregando los términos que satisfagan las condiciones de frontera y de salto prescritas. Entonces, la aproximación de la solución buscada puede escribirse como:

$$\hat{u}(x, y) = \sum_{(k, j) \in \eta} \sum_{\nu=0}^{NF-1} U_{kj}^\nu B_{kj}^\nu(x, y) + \sum_{(r, s) \in \eta_\sigma} u_{\partial r} B_{rs}^0(x, y) + \sum_{(k, j) \in \eta_\Sigma} \frac{\sigma}{2} [u_\Sigma]_{kj} B_{kj}^0(x, y); \quad (5.47)$$

donde η - es el conjunto de los nodos que tienen funciones de peso (base) asociadas, η_∂ - es el conjunto de todos los nodos que están en la frontera externa $\partial\Omega$, exceptuando las esquinas, η_Σ - es el conjunto de todos los nodos interiores que están en la frontera interna Σ asociados al salto prescrito, σ es un signo que toma el valor según sea el lado positivo o negativo de Σ con respecto a la normal \underline{n}_Σ , $u_{\partial r} = u_\partial(x, y_r)$ y NF es el número de

funciones de peso asociadas con cada nodo (para el caso de las funciones de peso lineales $NF=1$, mientras que para las cúbicas $NF=3$).

Al sustituir la expresión (5.47) para la solución aproximada $\hat{u}(x, y)$ y las funciones de peso $w_y^\mu(x, y)$ en (5.24) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$M_{ijkl}^{\mu\nu} U_{kl}^\nu = F_{ij}^\mu; \tag{5.48}$$

donde se aplica la convención para la suma, es decir que los índices repetidos están sumados sobre sus rangos,

$$M_{ijkl}^{\mu\nu} = - \int_{\Sigma} B_{kl}^\nu [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y^\mu] d\underline{x}; \tag{5.49}$$

$$\begin{aligned} F_{ij}^\mu = & \int_{\Omega} w_y^\mu f_{\Omega} d\underline{x} - \int_{\partial\Omega} u_{,r} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y^\mu d\underline{x} + \sum_{(r,s) \in \eta_{\partial\Omega}} u_{\partial r s} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y^\mu] d\underline{x} \\ & + \int_{\Sigma} j_{\Sigma}^0 (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y^\mu + b_n w_y^\mu) d\underline{x} - \int_{\Sigma} w_y^\mu j_{\Sigma}^1 d\underline{x} + \sum_{(k,l) \in \eta_{\Sigma}} \frac{\sigma}{2} [u_{\Sigma}]_{kl} \int_{\Sigma} B_{kl}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y^\mu] d\underline{x}; \end{aligned} \tag{5.50}$$

(k, l) y $(i, j) \in \eta, \mu, \nu = 0, \dots, NF-1$

En general el sistema resultante es de nueve diagonales en bloques de $NF \times NF$. Por lo que en el caso de funciones de peso lineales la matriz del sistema (5.48) es simplemente de nueve diagonales, ver Fig. 5.11, mientras que cuando se usan las cúbicas se obtiene una matriz de nueve diagonales en bloques de 3×3 , Fig. 5.12.

En el Anexo A1 se pueden ver los detalles para el cálculo de los coeficientes de la matriz $M_{ijkl}^{\mu\nu}$ y del término derecho F_{ij}^μ .

Observación 5.4: En el caso de funciones de peso lineales, el primer miembro de la

solución aproximada (5.47) se puede escribir como $\sum_{k=1}^{E_x-1} \sum_{l=1}^{E_y-1} U_{kl}^0 B_{kl}^0(x, y)$, mientras que para

el caso de las cúbicas tenemos que $\sum_{k=1}^{E_x-1} \sum_{l=1}^{E_y-1} \sum_{\nu=0}^2 U_{kl}^\nu B_{kl}^\nu(x, y) + \sum_{l=1}^{E_x-1} \sum_{k=0, E_x} U_{kl}^1 B_{kl}^1(x, y)$

+ $\sum_{k=1}^{E_x-1} \sum_{l=0, E_x} U_{kl}^2 B_{kl}^2(x, y)$, donde U_{kl}^0 es el valor de la solución aproximada en el nodo con índices (k, l) , es decir, $\hat{u}(x_k, y_l) = U_{kl}^0$, de manera análoga $\partial \hat{u} / \partial x(x_k, y_l) = U_{kl}^1$, $\partial \hat{u} / \partial y(x_k, y_l) = U_{kl}^2$ corresponden a los valores aproximados de las derivadas en los nodos.

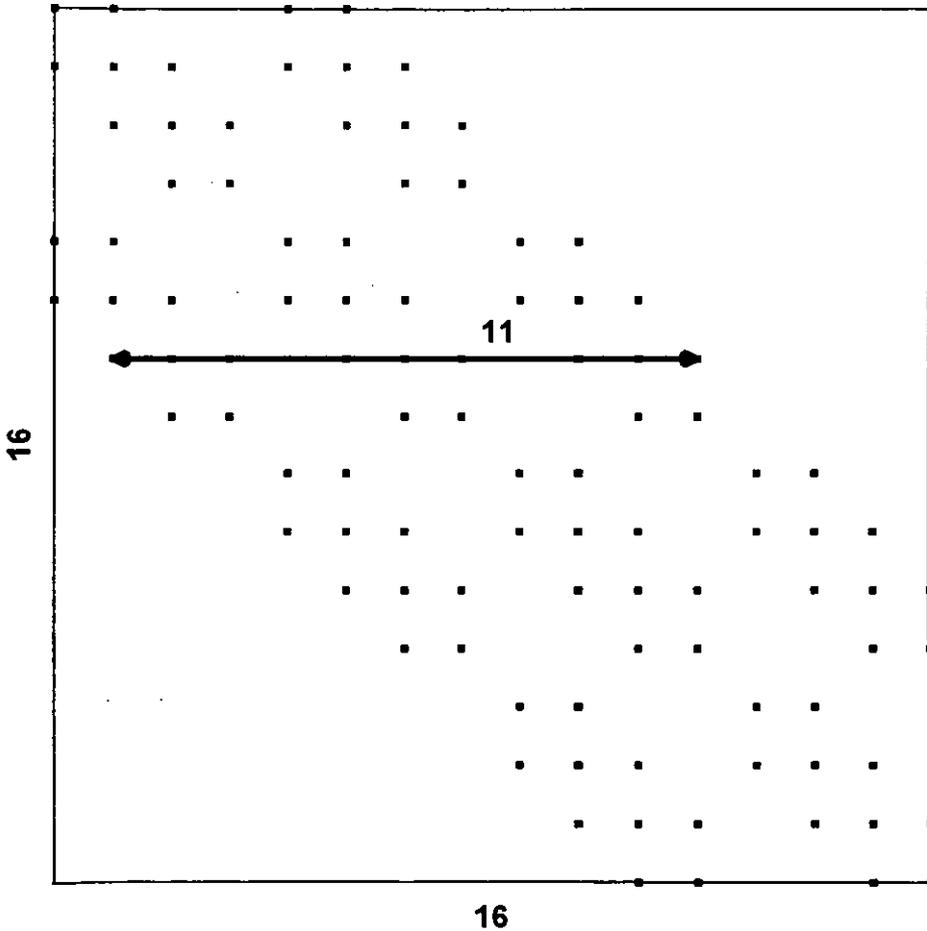


Fig. 5.11: Estructura de la Matriz de Colocación TH usando funciones de peso lineales para una partición de 5x5 elementos. El ancho de banda es 11.

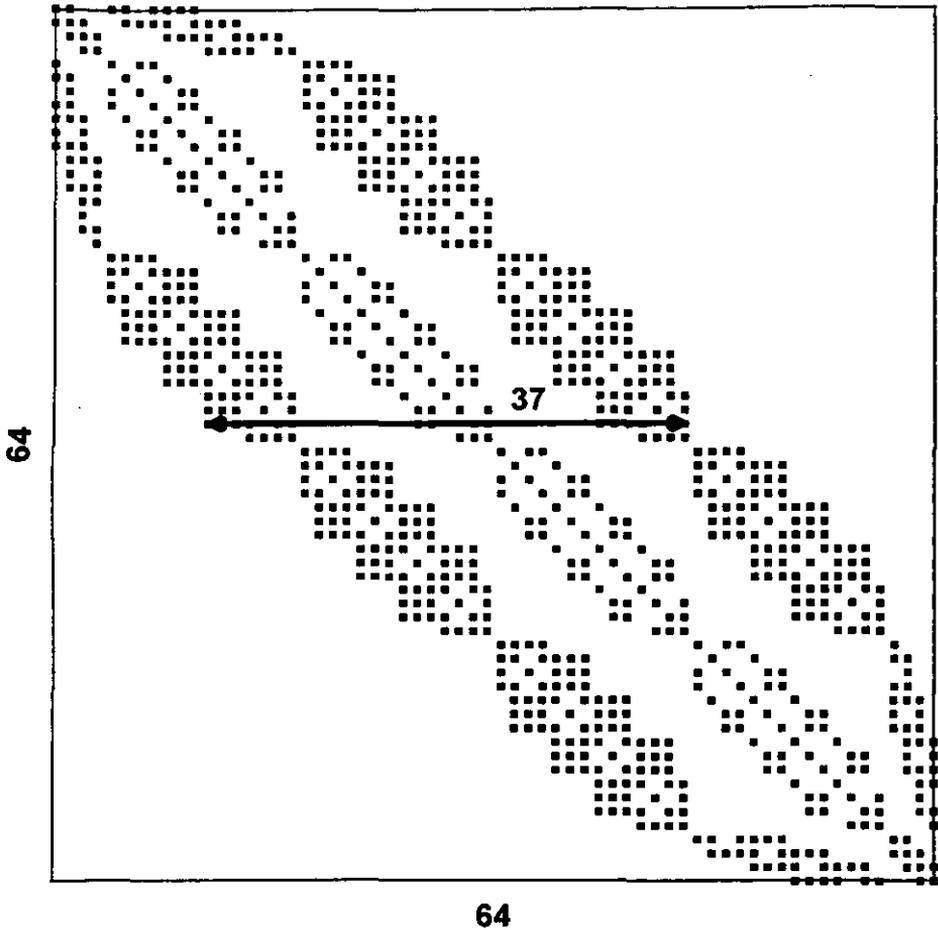


Fig. 5.12: Estructura de la Matriz de Colocación TH usando funciones de peso cúbicas para una partición de 5×5 elementos. El ancho de banda es 37.

5.5 Características Numéricas de Colocación Trefftz-Herrera

Como ya se explicó en detalles en el tercer capítulo, el método de Trefftz-Herrera está basado en la construcción de funciones de peso especializadas que nos permiten manejar convenientemente la información deseada o buscada acerca de la solución de un problema con valores de contorno y saltos prescritos (PCSP).

En este caso, el método de Colocación TH arriba descrito usa el método de colocación para la construcción de estas funciones de peso que deben satisfacer la ecuación adjunta homogénea, concentrando la información buscada en las fronteras internas Σ . Por este motivo se considera que es un método de colocación indirecto.

Resulta interesante observar aquí que debido a las condiciones impuestas a las funciones de peso $w \in \mathcal{E} \subset N_Q \cap N_C \cap N_R \subset \hat{H}^2(\Omega)$ en el procedimiento *TH-2*, Ecs.(5.15), (5.16) y (5.19), éstas pertenecen a un espacio mas reducido $C^0(\Omega)$ (espacio de funciones continuas en Ω), no obstante de que la solución buscada $u \in \hat{H}^2(\Omega)$ por sí misma no pertenezca a $C^0(\Omega)$, cuando existan saltos prescritos $[u_\Sigma] \neq 0$, en Σ . Consecuentemente las funciones bases pertenecen también $C^0(\Omega)$, puesto que fueron tomadas como las restricciones de las funciones de peso en Σ .

Para la construcción de las funciones de peso se usaron polinomios en Σ , que pueden ser de grado arbitrario G (ver Tabla 5.1), mientras que como puntos de colocación se aplicaron los ceros de los polinomios de Legendre como en colocación convencional.

Existe una reducción dramática de los grados de libertad respecto a colocación convencional puesto que usando polinomios lineales en Σ , se pueden obtener algoritmos con una sola incógnita asociada para un problema independientemente de las dimensiones del mismo. Así mismo las matrices resultantes son de menor tamaño y mejor estructuradas.

Estas son nonadiagonales en bloques, ver Figs. 5.11 y 5.12. Mientras que si el operador es simétrico y positivo definido, entonces las matrices también son simétricas y positivo definidas. Esta última propiedad las hace adecuadas para ser invertidas usando el método del gradiente conjugado [63,90] que posee una alta eficiencia computacional. En particular en la implementación se usó una variante del mismo: el Gradiente BiConjugado [88]. Para una partición con relativamente pocos elementos se pudiera usar el método de Factorización LU [88] de manera eficiente.

Para la aproximación de las integrales Ecs. (5.49) y (5.50) se empleó el método de cuadratura gaussiana.

El orden experimental de el error que se obtiene (ver capítulo 7), es de $O(h^4)$ que es igual al de colocación convencional cuando se usan polinomios cúbicos.

Hay que destacar que la complejidad de los algoritmos para los casos con saltos prescritos y/o coeficientes discontinuos es la misma que para los casos sin saltos y con coeficientes continuos. En particular, las matrices son idénticas en ejemplos con y sin saltos prescritos debido al hecho de que los saltos sólo involucran cambios en el término derecho del sistema global, ver Ecs. (5.48)-(5.50).

A continuación en la Tabla 5.1 se ofrece un resumen de las características numéricas más importantes del método de colocación TH.

Tabla 5.1: Resumen de las características numéricas del método de colocación TH.

No.	Característica Numérica	Método de Colocación Trefftz-Herrera
1	Estrategia	Uso de funciones de peso especializadas que concentran la información en Σ .
2	Tipo de método de Colocación	Indirecto: la colocación se usa para construir las funciones de peso
3	Funciones bases	En general pertenecen a $\hat{H}^2(\Omega)$, en particular son $C^0(\Omega)$.
4	Funciones de peso	En general pertenecen a $\hat{H}^2(\Omega)$, en particular son $C^0(\Omega)$.
5	Polinomio de interpolación	Polinomios de grado arbitrario G . En 1-D: $G \geq 2$. En 2-D y n dimensiones: $G \geq 1$.
6	Puntos de colocación	Gaussianos: ceros del polinomio de Legendre
7	Número de puntos de colocación por elemento	$(NP)^n$ para n dimensiones, donde $NP = G - 1$.
8	Partición del dominio	Yuxtapuesta
9	Grados de libertad (incógnitas) asociados con cada nodo	En 1-D es un grado de libertad para polinomios de grado $G \geq 2$ arbitrario. En 2-D es un grado de libertad para polinomios lineales, mientras que para polinomios cúbicos es de 3 grados de libertad. Puede ser de un grado de libertad para n dimensiones.
10	Tamaño de las matrices	Para un grado de libertad son $NDI \times NDI$ para n dimensiones, donde $NDI = (E_x - 1) \cdot (E_y - 1)$ -es el número de nodos interiores. En 2-D, para el caso de polinomios cúbicos, es de $\{3NDI + 2(E_x + E_y - 2)\} \times \{3NDI + 2(E_x + E_y - 2)\}$
11	Tipo de Matrices	En 1-D: Tridiagonal. En 2-D: Nonadiagonal en bloques de $NF \times NF$. Cuando el operador es positivo definido y simétrico resultan matrices simétricas y positivo definidas
12	Ancho de Banda de la Matriz	En 2-D, para polinomios lineales es $2E_x + 1$, mientras que para polinomios cúbicos es $6E_x + 7$, usando una numeración natural de los nodos por x .
13	Métodos de Inversión de la Matriz	En 1-D: algoritmo de Thomas [88]. En 2-D: Factorización LU, Gradiente BiConjugado [88].
14	Error Estimado $\ u - \hat{u}\ _\infty$	En 1-D: $O(h^{2(i-2)})$, con polinomios de grado $G = 2, 3$. En 2-D: $O(h^2)$, con polinomios lineales, $G = 1$ y $O(h^{2(i-2)})$, con polinomios cúbicos, $G = 3$.

6 Aplicación de Colocación Trefftz-Herrera a Problemas de Transporte

6.1 Problema Modelo: Ecuación Parabólica

En la presente sección haremos el desarrollo general del método de colocación Trefftz-Herrera para el problema modelo de la ecuación parabólica de segundo orden, puesto que tanto la ecuación de flujo como la de transporte, también conocida como de advección-difusión, es de este tipo. En el Anexo B se ofrece con suficiente detalle la obtención de los Modelos de Flujo y Transporte en Medios Porosos a partir de la aplicación del enfoque macroscópico para la modelación de sistemas continuos.

La aplicación del método de colocación Trefftz-Herrera se hará siguiendo un enfoque totalmente euleriano, es decir, su obtención se hará a partir de considerar una discretización apropiada de la derivada en el tiempo usando un esquema de tipo theta. Como se menciona en la introducción el Método del Adjunto Localizado (LAM) es en esencia sinónimo del Método de Trefftz-Herrera. Existen ejemplos de enfoques eulerianos-lagrangianos como son los llamados ELLAM. Un resumen de lo que se ha avanzado en estos métodos y su estado actual se puede encontrar en [57]. En este contexto de los métodos LAM podemos decir que el método clasifica como un método de Aproximación Espacial Óptima, término introducido por Celia en [19].

Para el desarrollo de la formulación del método consideraremos el siguiente problema modelo con valores de frontera y condiciones iniciales:

$$\mathcal{L}_{x,t} u = f_{\Omega}; \quad \forall (\underline{x}, t) \in \Omega \quad (6.1)$$

$$u = u_0(\underline{x}, t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega \text{ y } \forall t > t_0 \quad (6.2)$$

$$u = u_0(\underline{x}); \quad \forall \underline{x} \in \Omega \text{ y } t = t_0 \quad (6.3)$$

asociado con el operador diferencial parabólico general definido de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}_{x,t}u \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu; \quad (6.4)$$

donde a_{ij} - es un tensor simétrico, positivo definido, acotado y suave a tramos en Ω ,

Ω - dominio acotado con frontera $\partial\Omega$.

Resulta de utilidad considerar al operador parabólico previamente definido como la suma de dos operadores definidos de la siguiente forma:

$$\mathcal{L}_{x,t}u \equiv \frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{L}_x u; \quad (6.5)$$

donde $\frac{\partial u}{\partial t}$ es un operador diferencial sólo en términos de la derivada del tiempo t ,

mientras que \mathcal{L}_x es un operador diferencial sólo en términos de las derivadas espaciales \underline{x} y está dado por:

$$\mathcal{L}_x u = -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu; \quad (6.6)$$

que es la representación en forma conservativa del operador elíptico general de segundo orden.

6.2 Esquemas Theta (θ) de Discretización en el Tiempo.

Para la solución del problema modelo Ecs. (6.1), (6.2) y (6.3) emplearemos diferentes esquemas en diferencias finitas para la discretización en el tiempo. Estos esquemas se conocen en general como esquemas Theta.

Esquema Theta (θ) general

Si integramos con respecto al tiempo la ecuación (6.1) en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$, expresando el operador parabólico $\mathcal{L}_{x,t}u$ en la forma (6.5), se obtiene que:

$$u^{n+1} - u^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}_x u dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.7)$$

Al desarrollar el término bajo la integral de la Ec. (6.7) como una serie de Taylor respecto a un punto intermedio t^* en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ resulta:

$$\mathcal{L}_x u = (\mathcal{L}_x u)_i + \frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{L}_x u)_i (t - t^*) + O(t - t^*)^2; \quad (6.8)$$

entonces la integral se transforma en:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathcal{L}_x u dt = (\mathcal{L}_x u)_i k + O(k^2); \quad (6.9)$$

donde $k = t_{n+1} - t_n$ es el paso en el tiempo.

Al sustituir (6.9) en (6.7) se obtiene

$$u^{n+1} - u^n + (\mathcal{L}_x u)_i k + O(k^2) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.10)$$

El punto t^* se puede expresar como $t_n + \theta k$, donde $0 \leq \theta \leq 1$, entonces el segundo miembro de (6.10) se puede aproximar mediante una interpolación lineal de la siguiente manera:

$$(\mathcal{L}_x u)_i \cong (1 - \theta)(\mathcal{L}_x u)_{t_n} + \theta(\mathcal{L}_x u)_{t_{n+1}}; \quad (6.11)$$

Finalmente se obtiene la siguiente discretización con respecto al tiempo de la Ec. (6.1), la cual se conoce como esquema Theta:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{k} + (1 - \theta)(\mathcal{L}_x u)^n + \theta(\mathcal{L}_x u)^{n+1} + O(k) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.12)$$

donde los superíndices se refieren a niveles en el tiempo, es decir, $(\mathcal{L}_x u)^n = (\mathcal{L}_x u)_{t_n}$ y $u^n = u(t_n)$.

Consideremos 3 casos para θ :

1.- Para $\theta = 0$, es decir con respecto al punto t_n se obtiene un esquema en diferencias *hacia delante* en el tiempo, también conocido como esquema *completamente explícito*, ya que el paso $n+1$ se obtiene de una expresión algebraica de los términos del paso anterior n .

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{k} + (\mathcal{L}_x u)^n + O(k) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.13)$$

$$u^{n+1} \cong u^n - k (\mathcal{L}_x u)^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.14)$$

Es un esquema muy simple, pero se ha demostrado que es condicionalmente estable cuando:

$$k \leq \frac{1}{2} h^2; \quad (6.15)$$

donde $h = \Delta x$ es el tamaño de la malla en las coordenadas espaciales.

2.- Para $\theta = 1$, es decir con respecto al punto t_{n+1} se obtiene un esquema en diferencias *hacia atrás* en el tiempo, también conocido como esquema *completamente implícito*:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{k} + (\mathcal{L}_x u)^{n+1} + O(k) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.16)$$

$$u^{n+1} + k (\mathcal{L}_x u)^{n+1} \cong u^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.17)$$

Este esquema es incondicionalmente estable.

3.- Para $\theta = \frac{1}{2}$, es decir con respecto al punto $t_{n+\frac{1}{2}}$ se obtiene un esquema en diferencias *centrales* en el tiempo, también conocido como esquema de Crank-Nicolson:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{k} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_x u)^{n+1} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_x u)^n + O(k^2) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.18)$$

$$u^{n+1} + \frac{1}{2} k (\mathcal{L}_x u)^{n+1} \cong u^n - \frac{1}{2} k (\mathcal{L}_x u)^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.19)$$

Es un método incondicionalmente estable y es más preciso que los dos métodos anteriores.

6.3 Semi-discretización en el Tiempo de la Ecuación Parabólica

Si sustituimos el operador espacial del problema modelo Ec. (6.1) en el esquema general theta Ec. (6.12), resulta:

$$\begin{aligned} u^{n+1} + \theta k \left\{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu \right\}^{n+1} &= \\ = u^n + (\theta - 1)k \left\{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu \right\}^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \end{aligned} \quad (6.20)$$

Si sustituimos el valor de θ en el esquema general anterior para los casos $\theta = 1$ y $\theta = \frac{1}{2}$, tenemos:

1. Esquema Completamente Implícito ($\theta = 1$):

$$u^{n+1} + k \left\{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu \right\}^{n+1} = u^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \quad (6.21)$$

Si reescribimos la ecuación (6.21) de manera apropiada agrupando términos obtenemos:

$$-\nabla \cdot (\underline{\alpha}^{n+1} \cdot \nabla u^{n+1}) + \nabla \cdot (\underline{\beta}^{n+1} u^{n+1}) + \gamma^{n+1} u^{n+1} = \phi_{\Omega}^{n+1}; \quad (6.22)$$

donde $u^{n+1} = u(\underline{x}, t_{n+1})$, $\underline{\alpha}^{n+1} = k \underline{a}^{n+1}$, $\underline{\beta}^{n+1} = k \underline{b}^{n+1}$, $\gamma^{n+1} = 1 + kc^{n+1}$ y $\phi_{\Omega}^{n+1} = u^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt$

2. Esquema de Crank-Nicolson ($\theta = \frac{1}{2}$):

$$\begin{aligned} u^{n+1} + \frac{k}{2} \left\{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu \right\}^{n+1} &= \\ = u^n - \frac{k}{2} \left\{ -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu \right\}^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt; \end{aligned} \quad (6.23)$$

Rescribiendo la ecuación (6.23) de manera apropiada y agrupando términos resulta:

$$-\nabla \cdot (\underline{\alpha}^{n+1} \cdot \nabla u^{n+1}) + \nabla \cdot (\underline{\beta}^{n+1} u^{n+1}) + \gamma^{n+1} u^{n+1} = \phi_{\Omega}^{n+1}; \quad (6.24)$$

donde $u^{n+1} = u(\underline{x}, t_{n+1})$, $\underline{\alpha}^{n+1} = \frac{k}{2} \underline{a}^{n+1}$, $\underline{\beta}^{n+1} = \frac{k}{2} \underline{b}^{n+1}$ y $\gamma^{n+1} = 1 + \frac{k}{2} c^{n+1}$

$$\phi_{\Omega}^{n+1} = \nabla \cdot \left(\frac{k}{2} \underline{a}^n \cdot \nabla u^n \right) - \nabla \cdot \left(\frac{k}{2} \underline{b}^n u^n \right) + \left(1 - \frac{k}{2} c^n \right) u^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f_{\Omega} dt;$$

Se puede observar en las Ecs. (6.22) y (6.24) que luego de aplicar el esquema theta tanto para el caso completamente implícito como para Crank-Nicolson, el problema parabólico inicial se transforma en uno elíptico para cada paso del tiempo.

Consecuentemente al problema con valores de frontera resultante de la discretización en el tiempo podríamos aplicarle el método de colocación Trefftz-Herrera desarrollado para ecuaciones elípticas en el capítulo 5.

No obstante, si observamos detenidamente las dos discretizaciones en el tiempo Ecs. (6.22) y (6.24), vemos que cuando se aplica Crank-Nicolson se requiere del conocimiento de la función u y sus derivadas espaciales en t_n , mientras que en el esquema completamente implícito solamente necesitamos conocer el valor de la función en el paso anterior del tiempo.

La observación anterior es válida para el caso cuando los coeficientes de la ecuación parabólica dependen del tiempo. En caso de que éstos sean independientes del tiempo, lo cual es bastante usual, resulta mucho más eficiente invertir el orden del proceso de discretización, es decir, primero hacer la aproximación de la solución en las coordenadas espaciales para un tiempo fijo y luego aplicar un esquema en diferencias en el tiempo. En lo sucesivo consideraremos solamente el caso en que los coeficientes no dependen del tiempo.

6.4 Colocación TH para la Ecuación Parabólica en 2-D.

Como se hizo en los capítulos 4 y 5 sólo desarrollaremos el método de colocación TH para la solución numérica de la ecuación parabólica para el caso en dos dimensiones.

El problema consiste en hallar $u(x,y,t)$ que satisface la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu = f_{\Omega}; \quad \forall (x,y) \in [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}], \quad t > 0 \quad (6.25)$$

donde $\underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11}(x,y) & a_{12}(x,y) \\ a_{21}(x,y) & a_{22}(x,y) \end{pmatrix}$ es un tensor simétrico, positivo definido, acotado y

suave a tramos en todo el dominio $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$, (Fig. 6.3), $\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1(x, y) \\ b_2(x, y) \end{pmatrix}$ y

los coeficientes $a_y(x, y), b_1(x, y), c(x, y)$ - son funciones continuas en todo el dominio y no dependen de t .

Con condiciones iniciales

$$u(x, y, t_0) = u_0(x, y); \quad \forall (x, y) \in [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \quad (6.26)$$

y condiciones de frontera de tipo Dirichlet

$$u(x, y, t) = u_\partial(x, y); \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (6.27)$$

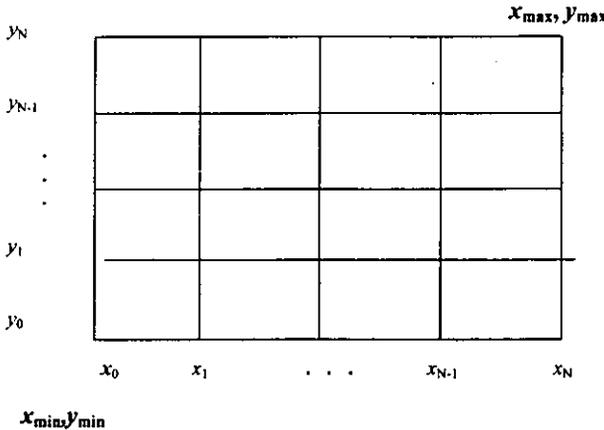


Fig. 6.1: Dominio rectangular $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$.

Como ya se dijo anteriormente, aquí sólo consideraremos el caso cuando los coeficientes de la ecuación no dependen del tiempo. Usando la notación introducida en la Ec.(6.5), podemos reescribir la ecuación (6.25) de la siguiente manera:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \{ \mathcal{L}_x u - f_\Omega \} = 0 \quad (6.28)$$

donde $\mathcal{L}_x u$ es el operador elíptico de segundo orden en dos dimensiones.

Para un tiempo t fijo, el segundo miembro de la ecuación (6.28) se puede aproximar usando el procedimiento de Colocación TH desarrollado en el capítulo 5. Si sustituimos $\mathcal{L}_t u - f_\Omega$, por su correspondiente aproximación espacial, Ec. (5.48), en notación matricial, tenemos que la ecuación (6.28) se transforma en:

$$\frac{d\underline{U}(t)}{dt} + \underline{M}\underline{U}(t) - \underline{F}(t) + e_h(h) = 0 \quad (6.29)$$

donde \underline{M} -es la matriz global del método de colocación TH y no depende de t , $\underline{U}(t)$ - es vector de los valores de la función en los nodos, $\underline{F}(t)$ - es el término derecho y $e_h(h)$ -es el error de la aproximación espacial.

Se puede ver que la ecuación (6.29) es un sistema de ecuaciones ordinarias de primer orden en t . En este caso podemos aplicar el esquema general theta introducido en la sección 6.2, de manera que:

$$\frac{\underline{U}^{n+1} - \underline{U}^n}{k} + \theta \{ \underline{M}\underline{U}^{n+1} - \underline{F}^{n+1} \} + (1-\theta) \{ \underline{M}\underline{U}^n - \underline{F}^n \} + e_h(h) + e_k(k) = 0 \quad (6.30)$$

donde $e_k(k)$ -es el error de la aproximación en el tiempo y depende del tipo de esquema Theta. Omitiendo los términos de error y manipulando la Ec. (6.30), resulta:

$$\underline{U}^{n+1} + \theta k \{ \underline{M}\underline{U}^{n+1} - \underline{F}^{n+1} \} \cong \underline{U}^n + (\theta - 1)k \{ \underline{M}\underline{U}^n - \underline{F}^n \} \quad (6.31)$$

Agrupando términos se obtiene:

$$\{ \underline{I} + \theta k \underline{M} \} \underline{U}^{n+1} - \theta k \underline{F}^{n+1} \cong \{ \underline{I} + (\theta - 1)k \underline{M} \} \underline{U}^n - (\theta - 1)k \underline{F}^n \quad (6.32)$$

Al introducir la siguiente notación para las matrices $\underline{A} = \underline{I} + \theta k \underline{M}$ y $\underline{B} = \underline{I} + (\theta - 1)k \underline{M}$, la Ec. (6.32) se puede reescribir como:

$$\underline{A}\underline{U}^{n+1} \cong \underline{B}\underline{U}^n + k \{ \theta \underline{F}^{n+1} - (\theta - 1)\underline{F}^n \} \quad (6.33)$$

Se debe destacar que el procedimiento general obtenido en la ecuación (6.33), es muy eficiente puesto que el cálculo de las matrices \underline{A} y \underline{B} se realiza una sola vez para una discretización espacial dada, luego se obtiene la inversa de la matriz \underline{A} y ésta se usa sin modificación para cada paso del tiempo.

Si analizamos la Ec.(6.33) para los casos $\theta = 1$ y $\theta = 1/2$, tenemos:

1. Esquema Completamente Implícito ($\theta = 1$):

$$\underline{A}\underline{U}^{n+1} \cong \underline{U}^n + k \underline{F}^{n+1} \quad (6.34)$$

donde $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{I}} + k \underline{\underline{M}}$

2. Esquema de Crank-Nicolson ($\theta = 1/2$):

$$\underline{\underline{A}}U^{n+1} \cong \underline{\underline{B}}U^n + \frac{k}{2} \{ \underline{\underline{F}}^{n+1} + \underline{\underline{F}}^n \} \tag{6.35}$$

donde $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{I}} + \frac{k}{2} \underline{\underline{M}}$ y $\underline{\underline{B}} = \underline{\underline{I}} - \frac{k}{2} \underline{\underline{M}}$.

En los ejemplos numéricos del capítulo 7 emplearemos el esquema *completamente implícito* por su mayor simplicidad.

6.5 Tratamiento del Caso con Advección Dominante

Es bien conocido que la solución numérica de la ecuación de advección-difusión presenta oscilaciones en la vecindad de un frente abrupto cuando el término de advección (o de primer orden) domina sobre el de difusión (o de segundo orden). En estos casos se debe tener especial cuidado en el tratamiento del término advectivo ($\underline{\underline{\beta}} = \underline{\underline{b}}^{n+1}$) ya que podría generar inestabilidad numérica cuando el número de Peclet [85,94] sea mayor que dos. Entonces se dice que la advección es dominante, es decir, domina sobre el término de difusión $\underline{\underline{\alpha}} = \underline{\underline{a}}^{n+1}$, y la ecuación que es parabólica se comportaría como “casi-hiperbólica”.

Estos casos han sido ampliamente analizados en la literatura y se han propuesto una serie de tratamientos para paliar el problema, los cuales se nombran en inglés como “*upstream weighting*”. En particular, para métodos de elementos finitos se propone usar funciones de peso asimétricas, lo cual podría ser una alternativa razonable en este caso. Por analogía con el caso de colocación convencional (ver pág. 321 de [1]) se le puede adicionar a las funciones de peso $w^v(\underline{\underline{x}})$ construidas en las secciones 5.2.1 y 5.2.2 un término asimétrico $\omega^v(\underline{\underline{x}})$ que se controla mediante un parámetro p_v , el cual se toma en dependencia de cuan dominante sea el término advectivo, de la siguiente manera:

$$\tilde{w}^v(\underline{\underline{x}}) = w^v(\underline{\underline{x}}) + p_v \omega^v(\underline{\underline{x}}); \tag{6.36}$$

Una alternativa más simple usada por Allen [2] consiste en evaluar (sólomente) el término advectivo en puntos gaussianos sesgados a la hora de aplicar la colocación. Es decir, si \underline{x}^g son los puntos gaussianos entonces se evalúa el término advectivo (la derivada espacial de primer orden) en los puntos $\tilde{\underline{x}}^k = \underline{x}^k - \xi \underline{h}$, donde $\xi > 0$ y $\underline{h} = \Delta \underline{x}$ es el ancho de la malla en las coordenadas espaciales. Esto produce el efecto de eliminar las oscilaciones pero distorsiona el frente abrupto debido a que se introduce un término difusivo de error.

Para el caso especial con coeficientes constantes mediante una transformación de la variable $u(x, y, t)$ se puede eliminar el término de segundo orden. Esta idea ha sido aplicada anteriormente en [30] y consiste en considerar el operador parabólico general dado en la Ec. (6.4) para el caso isotrópico $\underline{a} = a \underline{I}$, donde a y el resto de los coeficientes son constantes. Entonces, en este caso el operador resultante es

$$\mathcal{L}u \equiv \frac{\partial u}{\partial t} - a\Delta u + \underline{b} \cdot \nabla u + cu; \tag{6.37}$$

y la transformación adecuada sería

$$v(\underline{x}, t) = \frac{u(\underline{x}, t)}{r(\underline{x})} \tag{6.38}$$

donde $r(\underline{x}) = \exp(\frac{1}{2a} \underline{b} \cdot \underline{x})$, que al ser aplicada a la ecuación (6.1) resulta

$$\frac{\partial v}{\partial t} - a\Delta v + \left(c + \frac{|\underline{b}|^2}{4a} \right) v = \frac{f_\Omega}{r}; \tag{6.39}$$

Como se puede observar en la ecuación (6.39), el término de advección o de primer orden ha desaparecido y por consiguiente no habría que preocuparse por los problemas que se generan cuando la advección es dominante.

En lo sucesivo cuando usemos el esquema completamente implícito aplicado a la ecuación modificada Ec. (6.39), diremos que es el *método completamente implícito modificado*.

A continuación enumeraremos los dos criterios más usados y que se han sido establecidos con el fin de controlar los errores numéricos debidos a la discretización de la ecuación de transporte en espacio y tiempo:

1. Criterio de Peclet:

El criterio de Peclet [85], nos sirve para asegurar la estabilidad y minimizar la dispersión numérica. Además, permite controlar el error debido a la discretización espacial en cada dirección x_i . Éste está dado por

$$Pe_i = \frac{b_i \Delta x_i}{a_{ii}} \leq 2 \quad (6.40)$$

donde

Δx_i - es el ancho de la malla en la dirección x_i ,

b_i - es el coeficiente asociado al término advectivo, que representa la velocidad de las partículas en la dirección x_i ,

a_{ii} - es el coeficiente de dispersión en la dirección x_i ,

El criterio de Peclet se puede interpretar como que idealmente el ancho de la malla Δx_i no debe ser mayor a dos veces la dispersividad en la dirección x_i .

Criterio de Courant:

Controla el paso en el tiempo Δt y se expresa como

$$Cr_i = \left| \frac{b_i \Delta t}{\Delta x_i} \right| \leq 1 \quad (6.41)$$

Es decir el número de Courant (Cr) se debe tomar menor o igual a uno para satisfacer la condición de CFL (Courant, Fredrichs, Levy, 1928).

Estos criterios de Peclet y de Courant, Ecs. (6.40) y (6.41) no son generales ya que dependen del método numérico específico que se emplee. Se requiere de una investigación particular que permita establecer las cotas para el nuevo método de colocación propuesto, lo cual no es el objeto de la presente tesis. Por lo que en los experimentos numéricos del capítulo 7 estos criterios sólo servirán de orientación para analizar el comportamiento numérico en ejemplos con diferentes combinaciones de estos números.

7 Simulación Numérica

7.1 Problemas elípticos en una dimensión

Los experimentos numéricos para el caso de una dimensión consistieron en resolver el problema de la ecuación elíptica general de segundo orden Ec. (7.1), con condiciones de frontera de tipo Dirichlet Ec. (7.2) impuestas por la solución analítica y condiciones de salto Ec. (7.3) igual a cero, excepto en el ejemplo E1D-6.

Ecuación diferencial

$$-\frac{d}{dx} \left(a \frac{du}{dx} \right) + \frac{d}{dx} (bu) + cu = f_{\Omega}; \quad \forall x \in [x_{\min}, x_{\max}] \quad (7.1)$$

donde $a(x)$, $b(x)$, $c(x)$ y $f_{\Omega}(x)$ son funciones definidas en $[x_{\min}, x_{\max}]$, pero no necesariamente continuas.

Condiciones de Frontera

$$u(x_{\min}) = u_{\min}; \quad y \quad u(x_{\max}) = u_{\max}; \quad (7.2)$$

Condiciones de Salto

$$[u]_i = j_i^0; \quad y \quad \left[a \frac{du}{dx} \right]_i = j_i^1; \quad \text{en } i = 1, \dots, E-1 \quad (7.3)$$

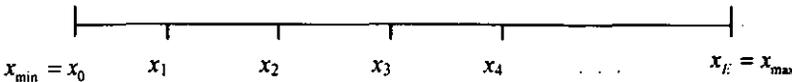


Fig. 7.1: Partición del dominio $[x_{\min}, x_{\max}]$ dividido en E elementos, donde $h = x_i - x_{i-1}$; $i = 1, \dots, E$.

Los coeficientes de la ecuación de cada uno de los ejemplos están dados en la Tabla 7.1 y sus correspondientes soluciones analíticas en la Tabla 7.2. Todos los ejemplos se resolvieron para una partición uniforme del intervalo $[x_{\min}, x_{\max}]$, como se muestra en la Fig. 7.1, usando el método de colocación convencional con polinomios cúbicos de Hermite y el método de colocación TH con polinomios cuadráticos y cúbicos. Donde el número de elementos E se incrementó sucesivamente desde 10 hasta 200, con incremento 10.

En los gráficos de las figuras 7.2 hasta 7.9, se realiza la comparación de la convergencia h de ambos métodos en términos del error medido con la norma $\| \cdot \|_{\infty}$, la cuál se expresa como sigue:

$$\text{ERROR} = \|e\|_{\infty} = \max_{i \in \Omega} |u_i - \tilde{u}_i|; \quad (7.4)$$

El orden r del error con respecto a h , es decir $O(h^r)$ se obtuvo a partir de la estimación de la pendiente de la regresión lineal en la gráfica de $-\log(\text{ERROR})$ contra $-\log h$. En efecto, esto se puede verificar que si se considera al error como una función de h , del tipo $\text{ERROR} = \text{const.}(h^r)$, entonces al aplicar el logaritmo en ambos miembros resulta:

$$-\log(\text{ERROR}) = -\log \text{const.} - r \log h \quad (7.5)$$

donde, se toman los valores de $\log(\text{ERROR})$ y $\log h$ con signo opuesto para que sean cantidades positivas.

El dominio que se tomó en todos los casos fue el intervalo $[0,1]$, menos en el ejemplo E1D-3 que fue $[0.1,0.9]$.

Los métodos de inversión que se usaron en la implementación fueron: el de eliminación Gaussiana [88] en el método de colocación convencional y para la construcción de las funciones de peso del método de colocación TH, mientras que se usó el algoritmo de Thomas [88] (eliminación gaussiana para matrices tridiagonales) para la inversión del sistema global en el método de colocación TH.

La variedad de los ejemplos intenta mostrar la flexibilidad y robustez del método de colocación TH.

Tabla 7.1: Definiciones de los coeficientes de los ejemplos elípticos en 1-D.

Ejemplo	a	b	c	f_{Ω}
E1D-1	1	$2px/q$	$-\left\{ \frac{4p(1+p)}{q^2} + \frac{2p^2}{q} + p^2 \right\}$	0
E1D-2	1	0	$-40\pi^2$	0
E1D-3	$x^2 - 1$	0	$n(n+1)$	0
E1D-4	$4x^2 + 3$	$3x - 1$	$3x(x+1)$	$-(x+1)^2 e^x$
E1D-5	-1	$-\alpha$	0	0
E1D-6	-1	0	-1	0
E1D-7	$-1; 0 \leq x \leq 1$ $-4; 1 < x \leq 2$	0	1	0

Tabla 7.2: Soluciones analíticas de los ejemplos elípticos en 1-D.

Ejemplo	Solución Exacta
E1D-1	$\sin(px) + x \cos(px)$ donde $p = \sqrt{40\pi}$; $q = 1 + p(1 + x^2)$
E1D-2	$\sin(\sqrt{40\pi}x)$
E1D-3	$(63x^5 - 70x^3 + 15x)/8$
E1D-4	e^x
E1D-5	$\frac{e^{\alpha x} - e^{\alpha}}{1 - e^{\alpha}}$; $\alpha = 20, 40, 60, 80, 100$
E1D-6	e^x ; $0 \leq x < 1/2$ $\frac{1}{4} + e^{x/2}$; $x = 1/2$ $\left(1 - \frac{1}{2} \frac{e^{-x/2}}{e-1}\right) e^x + \frac{1}{2} \frac{e^{x/2}}{e-1} e^{-x}$; $1/2 < x \leq 1$ donde las condiciones de salto son: $f^0(0.5) = 0.5$; $f^1(0.5) = 0.5 \left(\frac{1+e}{1-e}\right)$;
E1D-7	$A \sin x$; $0 \leq x \leq 1$ $C \sin \frac{x}{2} + D \cos \frac{x}{2}$; $1 < x \leq 2$ donde A, C y D se definen como: $\begin{bmatrix} \sin(1) & -\sin(\frac{1}{2}) & -\cos(\frac{1}{2}) \\ \cos(1) & -2\cos(\frac{1}{2}) & 2\sin(\frac{1}{2}) \\ 0 & \sin(\frac{1}{2}) & \cos(1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

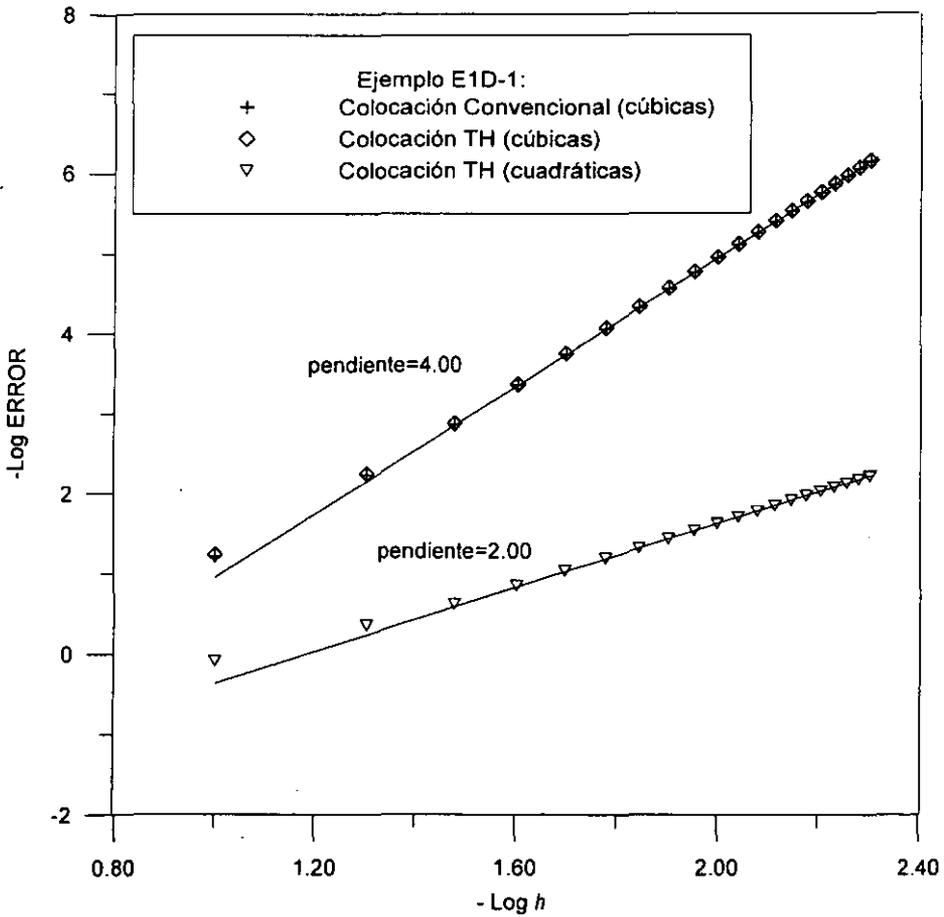


Fig. 7.2: Ejemplo E1D-1. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.

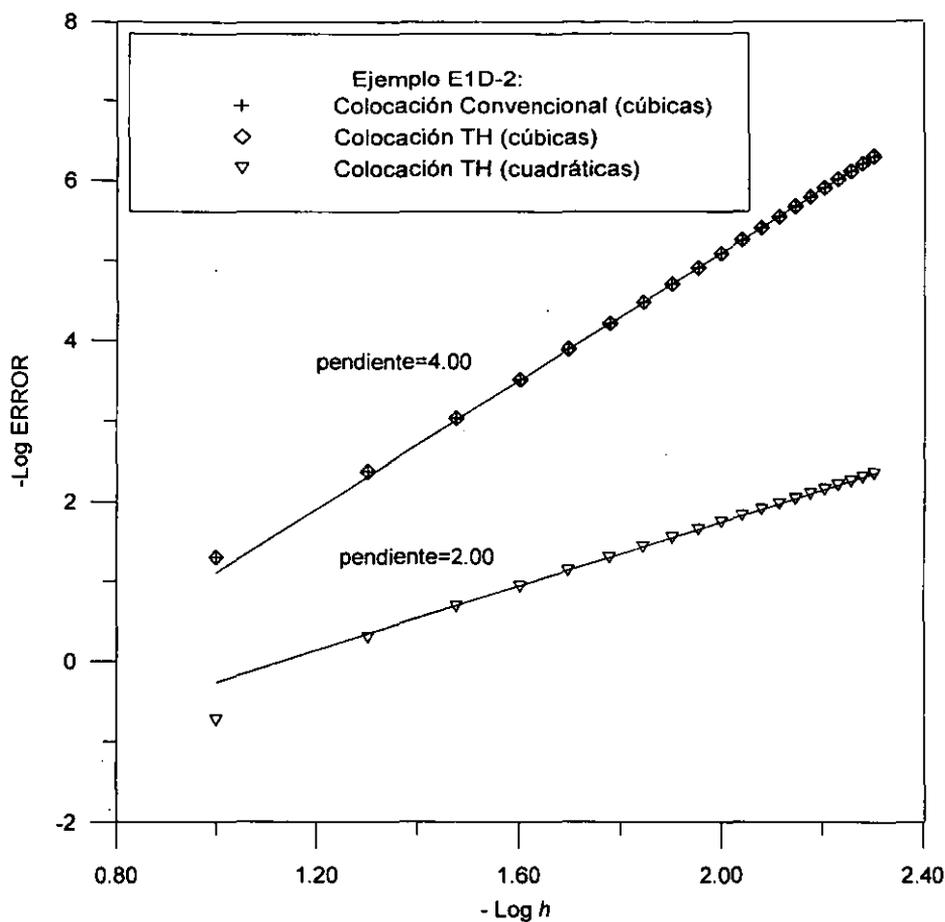


Fig. 7.3: Ejemplo E1D-2. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.

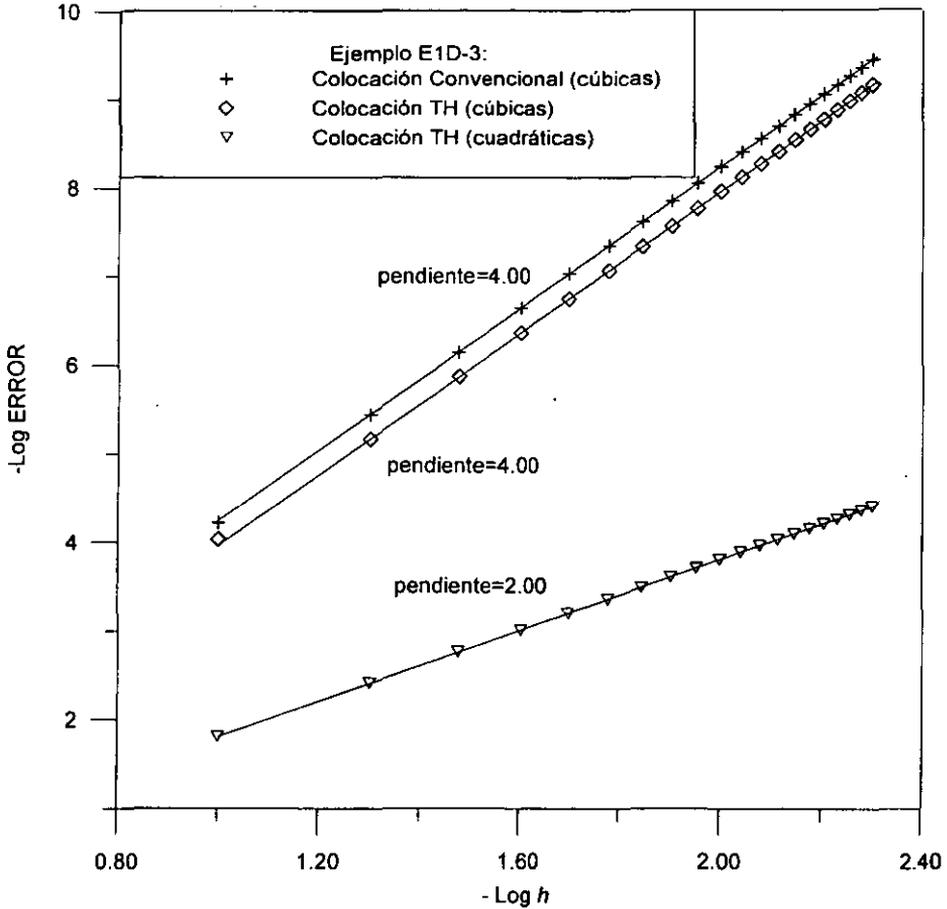


Fig. 7.4: Ejemplo E1D-3. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.

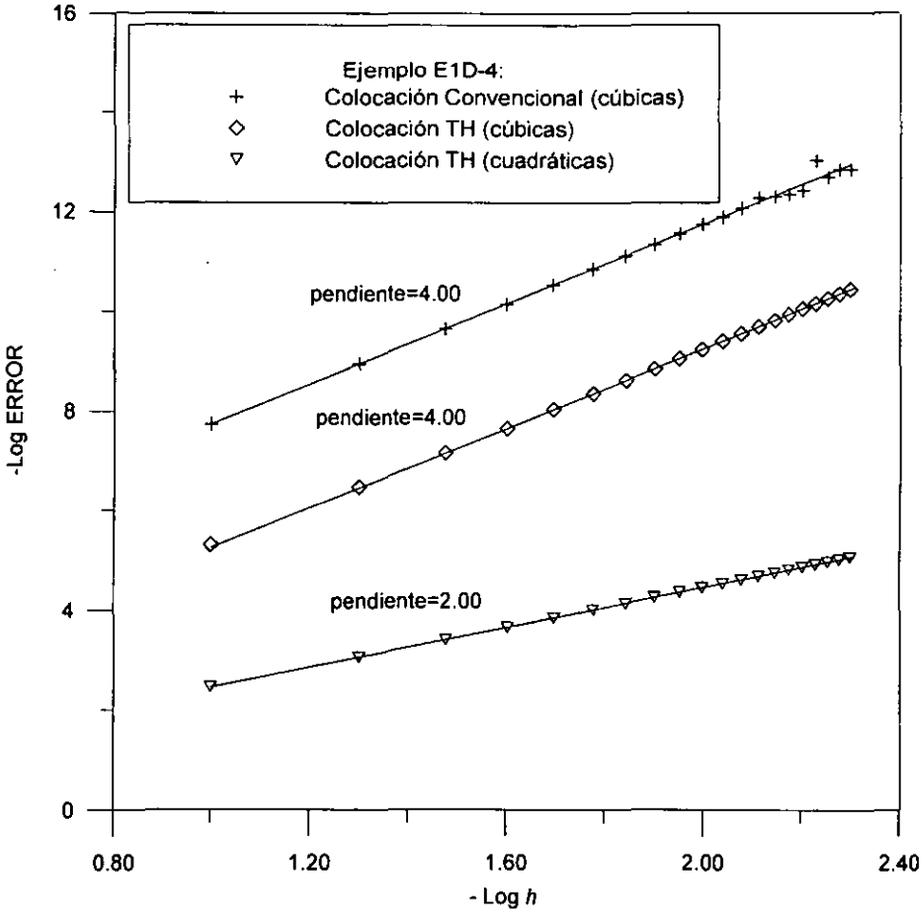


Fig. 7.5: Ejemplo E1D-4. Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.

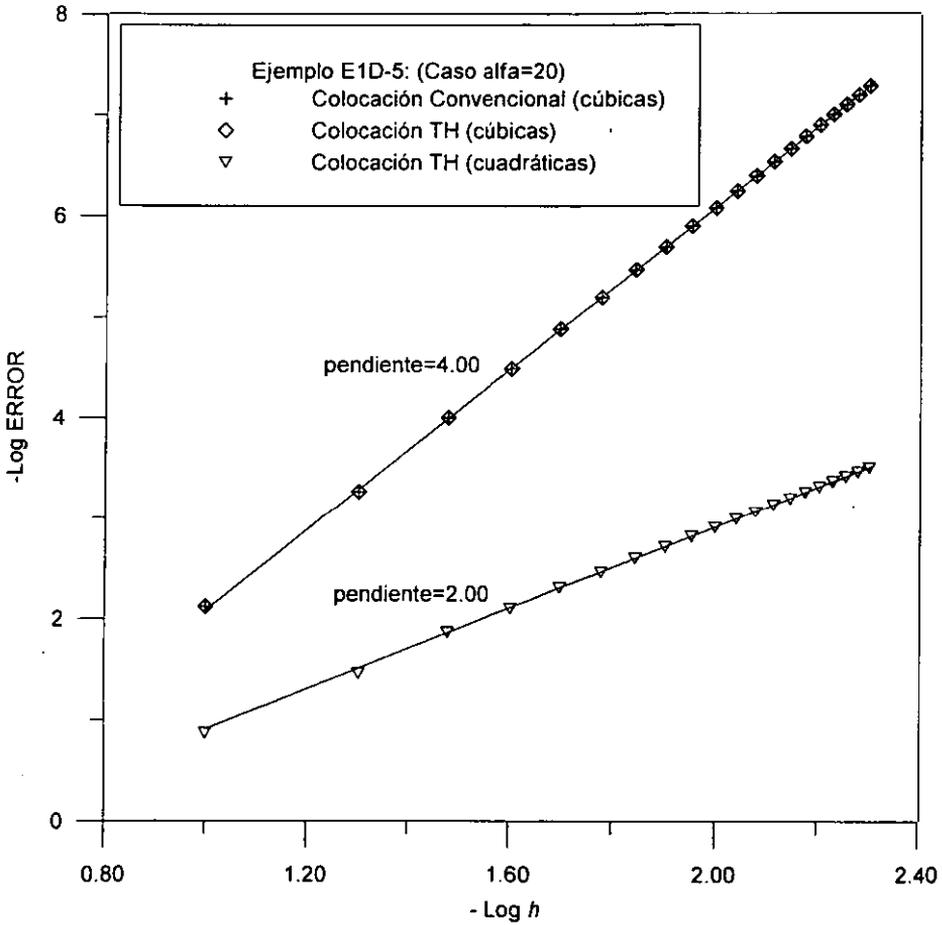


Fig. 7.6: Ejemplo E1D-5 (caso $\alpha=20$). Comparaci n de la convergencia del m todo de colocaci n TH usando funciones de peso cuadr aticas y c ubicas con respecto al m todo convencional de colocaci n con funciones de peso c ubicas.

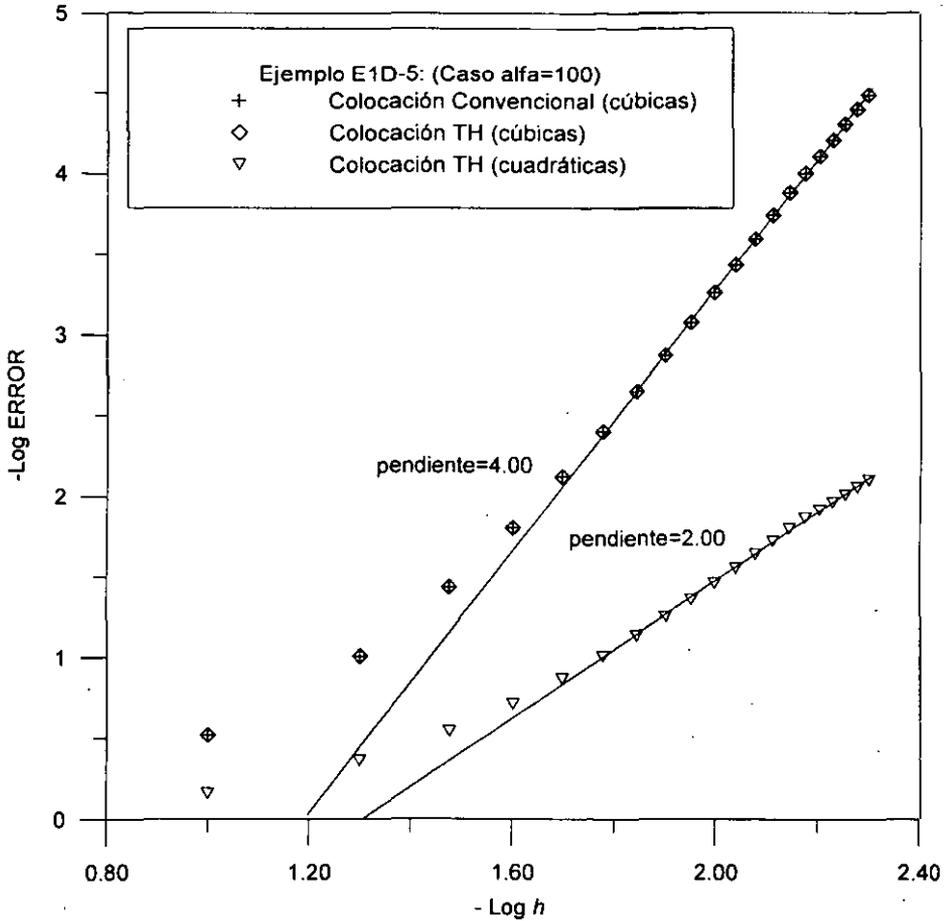


Fig. 7.7: Ejemplo E1D-5 (caso $\alpha=100$). Comparación de la convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas con respecto al método convencional de colocación con funciones de peso cúbicas.

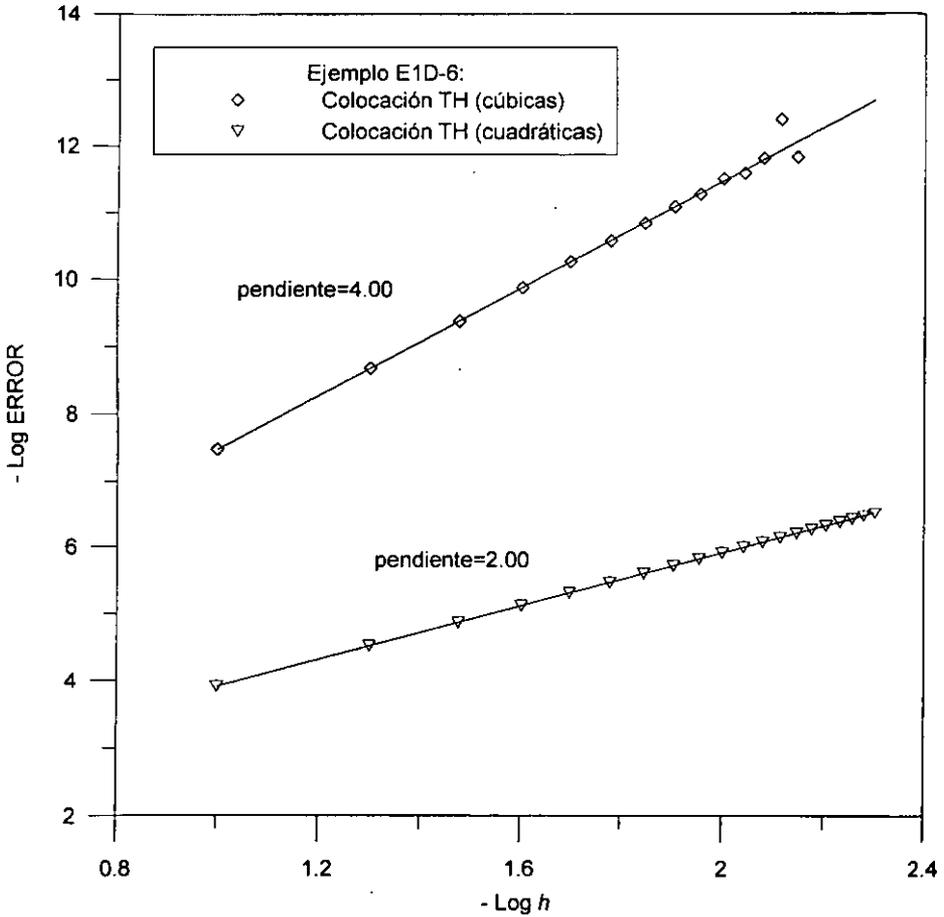


Fig. 7.8: Ejemplo E1D-6. Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas en presencia de saltos prescritos.

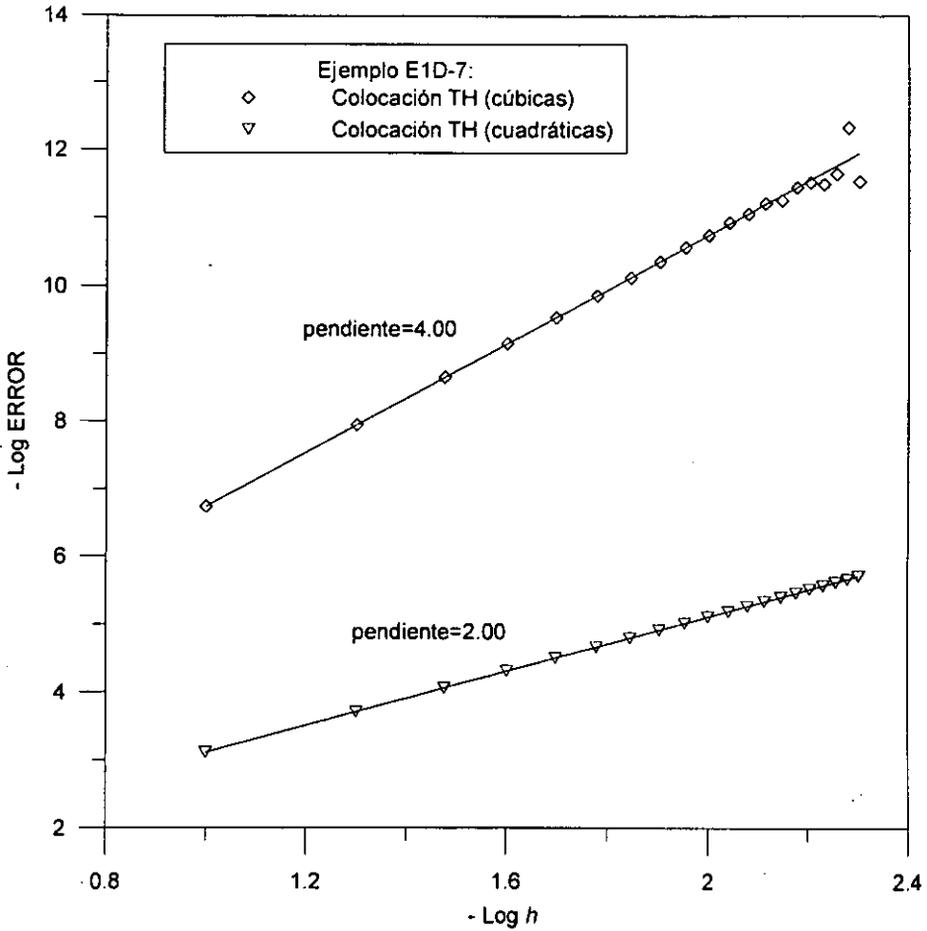


Fig. 7.9: Ejemplo E1D-7. Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso cuadráticas y cúbicas en presencia de coeficientes discontinuos.

7.2 Problemas elípticos en dos dimensiones

Los experimentos numéricos en dos dimensiones consistieron en resolver el problema de la ecuación elíptica general de segundo orden Ec. (7.6), con condiciones de frontera de tipo Dirichlet Ec. (7.7) impuestas por la solución analítica y condiciones de salto Ec.(7.8) igual a cero, excepto en los ejemplos E2D-6 y E2D-7, donde las condiciones de salto están especificadas en la Tabla 7.4.

Ecuación diferencial

$$\mathcal{L}u \equiv -\nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu = f_{\Omega}; \quad \text{en } [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \quad (7.6)$$

donde $\underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$; $\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ y $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}, b_1, b_2, c$ son funciones de (x, y) definidas en $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ pero no necesariamente continuas.

Condiciones de Frontera

$$\begin{aligned} u(x_{\min}, y) &= u_{\partial_1}(y); & u(x_{\max}, y) &= u_{\partial_2}(y); \\ u(x, y_{\min}) &= u_{\partial_3}(x); & u(x, y_{\max}) &= u_{\partial_4}(x); \end{aligned} \quad (7.7)$$

Condiciones de Salto

$$[u] = [u_{\Sigma}] = f_{\Sigma}^0; \quad [\underline{a} \cdot \nabla u] \cdot \underline{n} = [\underline{a} \cdot \nabla u_{\Sigma}] \cdot \underline{n} = f_{\Sigma}^1; \quad \text{en } \Sigma \quad (7.8)$$

Los coeficientes de la ecuación de cada uno de los ejemplos están dados en la Tabla 7.3 y sus correspondientes soluciones analíticas en la Tabla 7.4. Todos los ejemplos se resolvieron para una partición uniforme ($h \equiv h_x = h_y$) del dominio rectangular, como se muestra en la Fig. 7.10, usando el método de colocación TH con polinomios lineales y cúbicos. Donde el número de elementos por se tomó igual en ambas direcciones ($E = E_x = E_y$) y se incrementó sucesivamente desde 10 hasta 200, con incremento 10, para el caso de polinomios lineales, mientras que se tomó de 5 hasta 50, con incremento 5, para el caso con polinomios cúbicos.

En los gráficos de las figuras 7.11 hasta 7.17, se realiza la comparación de la convergencia h del método de colocación TH en términos del error medido con la norma $\| \cdot \|_{\infty}$, el cuál en dos dimensiones se expresa como sigue:

$$\text{ERROR} = \|e\|_{\infty} = \max_{\eta \in \eta} |u_{\eta} - \tilde{u}_{\eta}|; \tag{7.9}$$

De manera análoga al caso unidimensional se obtuvo el orden r del error con respecto a h , es decir $O(h^r)$, a partir de la estimación de la pendiente de la regresión lineal en la gráfica de $-\log(\text{ERROR})$ contra $-\log h$, para diferentes valores sucesivamente menores de h .

El dominio en todos los casos fue el cuadrado unitario $[0, 1] \times [0, 1]$, excepto en el ejemplo E2D-2 que se tomó $[1, 2] \times [1, 2]$.

Los métodos de inversión que se usaron en la implementación del método de colocación TH en dos dimensiones fueron: el de eliminación Gaussiana para las matrices locales (construcción de las funciones de peso) y el de Gradiente Biconjugado [88] para las matrices globales.

La variedad de los ejemplos intenta mostrar la flexibilidad y robustez del método de colocación TH.

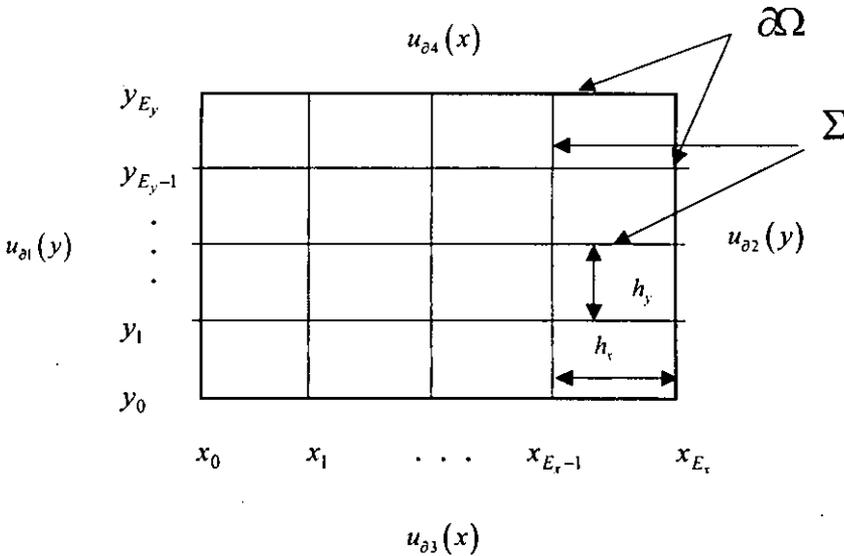


Fig. 7.10: Partición del dominio $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$ dividido en $E_x \times E_y$ elementos, donde $h_x = x_i - x_{i-1}$; $i = 1, \dots, E_x$ y $h_y = y_j - y_{j-1}$; $j = 1, \dots, E_y$.

Tabla 7.3: Definiciones de los coeficientes de los ejemplos elípticos en 2-D.

Ejemplo	\underline{a}	\underline{b}	c	f_{Ω}
E2D-1	$a_{11} = a_{22} = 1$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 0$	1	$(1 - x^2 - y^2)e^{xy}$
E2D-2	$a_{11} = a_{22} = xy$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 0$	0	0
E2D-3	$a_{11} = 1 + x^2$ $a_{22} = 1 + y^2$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 0$	0	$6(y^2 - x^2)$
E2D-4	$a_{11} = 1 + x^2$ $a_{22} = 1 + y^2$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = y - 2,$ $b_2 = x - 2$	$2(x + y)$	$-(x^4 + y^4)e^{xy}$
E2D-5	$a_{11} = a_{22} = D \equiv 1$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = v \equiv 50$	0	$-2(D + v)\exp\{-(x + y)\}$
E2D-6	$a_{11} = a_{22} = 1$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 1$	0	0
E2D-7	$a_{11} = a_{22} =$ $\begin{cases} 1; & 0 \leq y \leq \frac{1}{2} \\ 4; & \frac{1}{2} < y \leq 1 \end{cases}$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 0$	1	$(1 - x^2 - y^2)e^{xy}; \quad 0 \leq y \leq \frac{1}{2}$ $(1 - 4x^2 - 4y^2)e^{xy}; \quad \frac{1}{2} < y \leq 1$

Tabla 7.4: Soluciones analíticas de los ejemplos elípticos en 2-D.

Ejemplo	Solución Exacta
E2D-1	e^{xy}
E2D-2	$x^2 - y^2$
E2D-3	$x^2 - y^2$
E2D-4	e^{xy}
E2D-5	$\exp\{-(x + y)\}$
E2D-6	$e^x + e^y - 2; \quad y < \frac{1}{2}$ $e^x + e^y; \quad y = \frac{1}{2}$ $e^x + e^y + 2; \quad y > \frac{1}{2}$ donde las condiciones de salto son: $j_x^0(x, 0.5) = 4; \quad x \in [0, 1]$
E2D-7	e^{xy} donde las condiciones de salto son: $j_x^1(x, 0.5) = 3xe^{x/2}; \quad x \in [0, 1]$

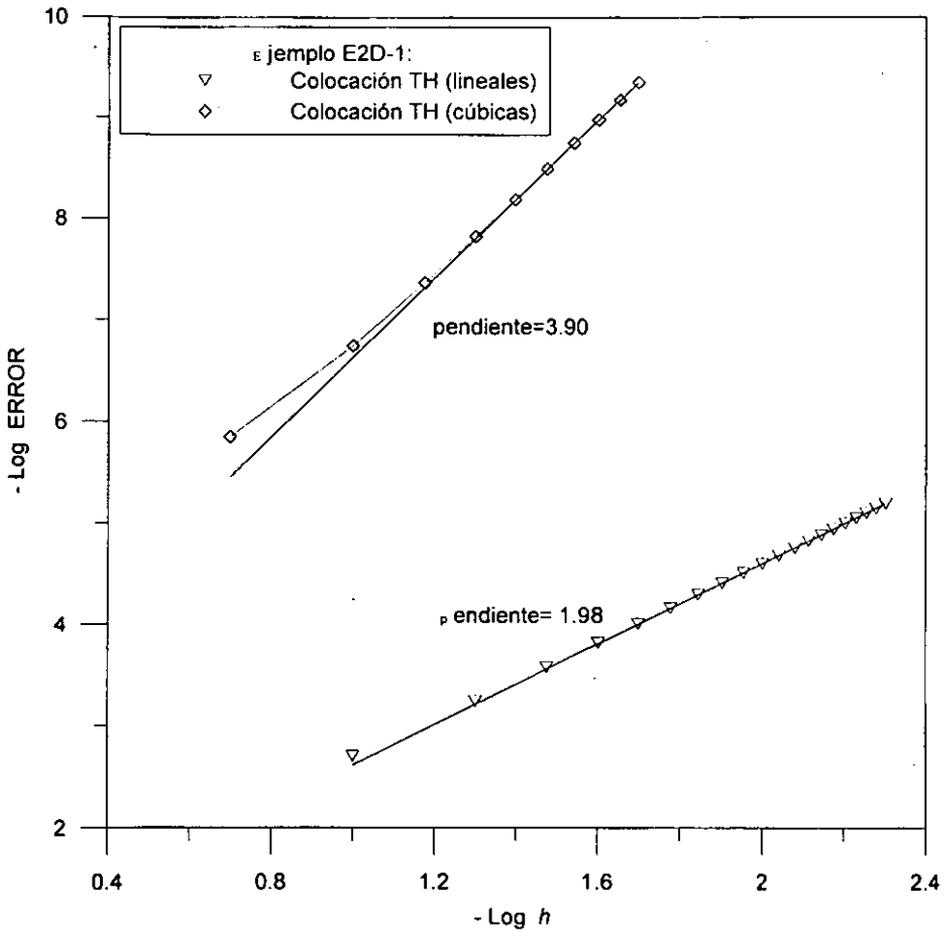


Fig. 7.11: Ejemplo E2D-1: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.

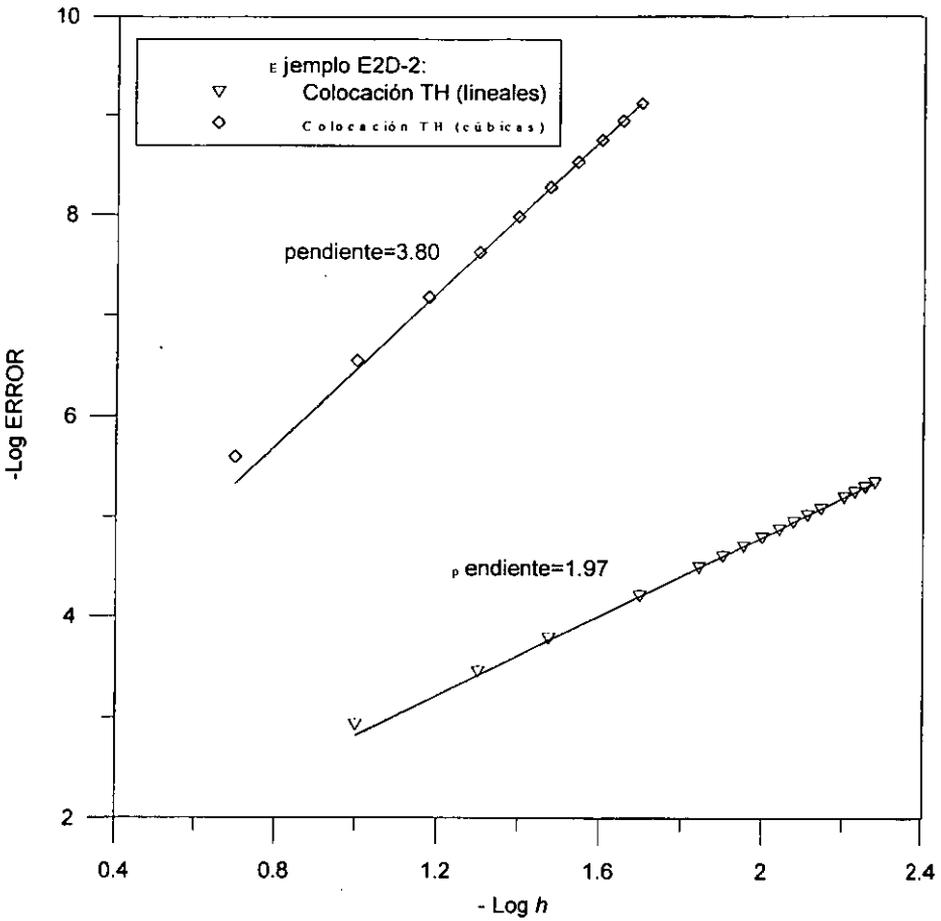


Fig. 7.12: Ejemplo E2D-2: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.

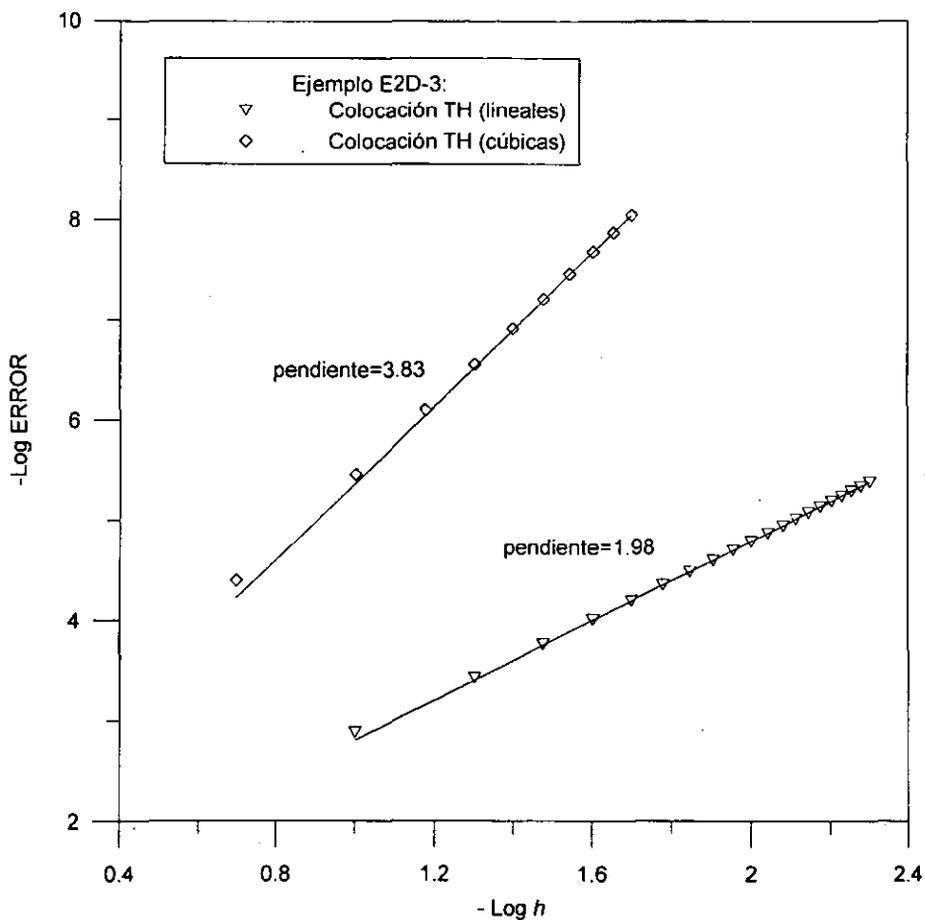


Fig. 7.13: Ejemplo E2D-3: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.

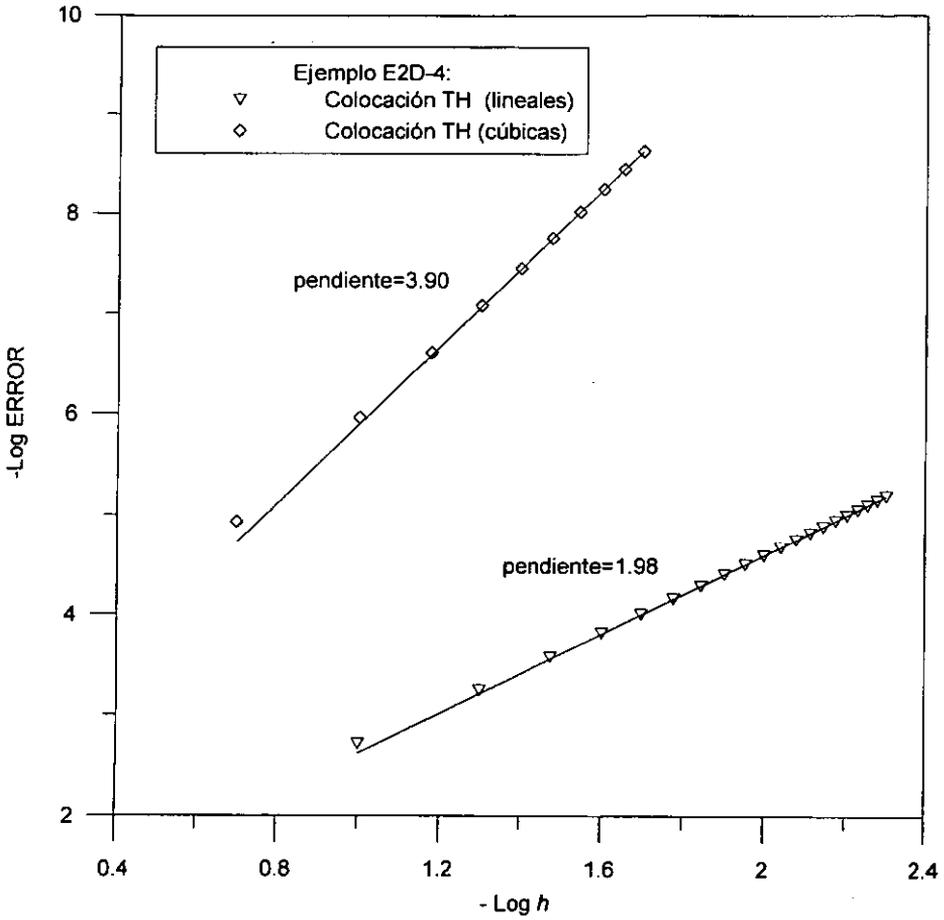


Fig. 7.14: Ejemplo E2D-4: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.

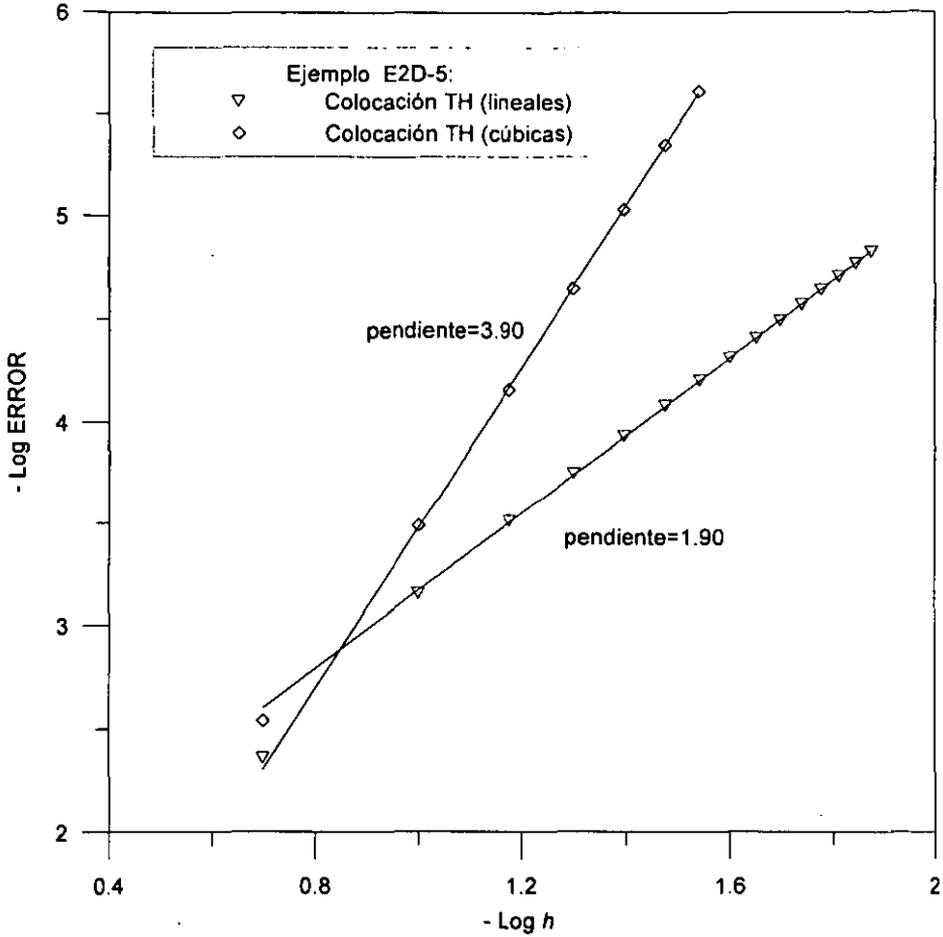


Fig. 7.15: Ejemplo E2D-5: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas.

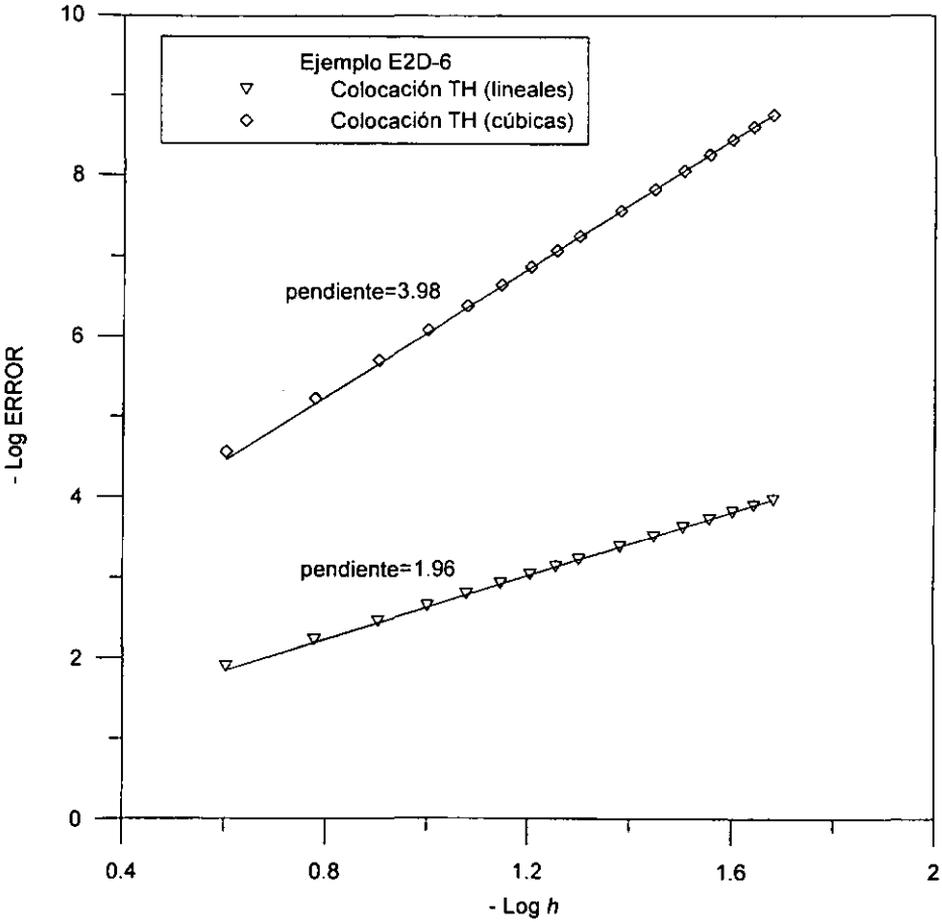


Fig. 7.16: Ejemplo E2D-6: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas en presencia de saltos prescritos.

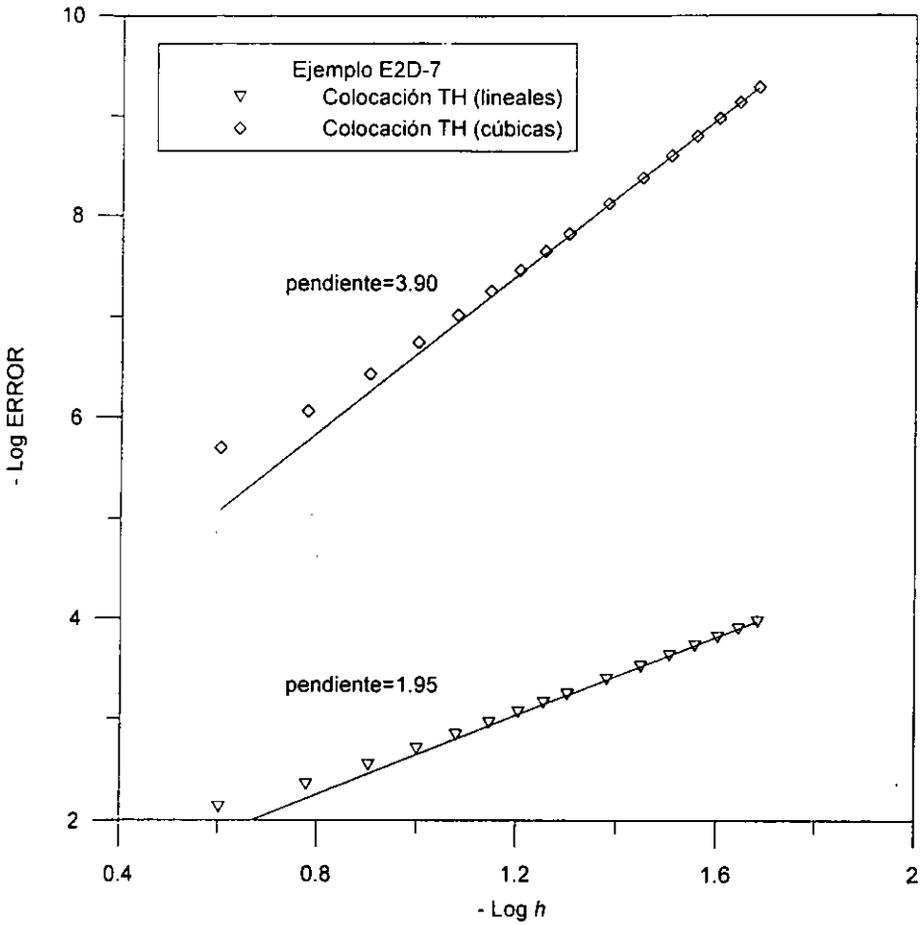


Fig. 7.17: Ejemplo E2D-7: Convergencia del método de colocación TH usando funciones de peso lineales y cúbicas en presencia de coeficientes discontinuos.

7.3 Problemas parabólicos en una dimensión

Los experimentos numéricos para el caso de una dimensión consistieron en resolver el problema de la ecuación parabólica Ec.(7.10) definida en el intervalo $[x_{\min}, x_{\max}]$ usando una partición uniforme, como se muestra en la Fig. 7.1. Las condiciones iniciales están dadas por la Ec.(7.11) y las condiciones de frontera de tipo Dirichlet Ec.(7.12) son impuestas por la soluciones analíticas dadas en la Tabla 7.6. En todos los casos se consideraron coeficientes continuos (ver Tabla 7.5) y condiciones de salto nulas Ec. (7.13).

Ecuación diferencial

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (bu) + cu = f_{\Omega}; \quad x \in [x_{\min}, x_{\max}], t > t_0 \quad (7.10)$$

$a(x,t)$, $b(x,t)$, $c(x,t)$ - coeficientes de la ecuación parabólica

Condiciones Iniciales

$$u(x, t_0) = u_0(x); \quad x \in [x_{\min}, x_{\max}], \quad t = t_0 \quad (7.11)$$

Condiciones de Frontera

$$u(x_{\min}, t) = u_{\min}(t); \quad \text{y} \quad u(x_{\max}, t) = u_{\max}(t); \quad \text{para } t > t_0 \quad (7.12)$$

Condiciones de Salto

$$[u]_i = 0; \quad \text{y} \quad \left[a \frac{du}{dx} \right]_i = 0; \quad \text{en } i = 1, \dots, E-1 \quad (7.13)$$

Tabla 7.5: Definiciones de los coeficientes de los ejemplos parabólicos en 1-D.

Ejemplo	a	b	c	f_{Ω}
P1D-1	1	0	0	$(1 + \pi^2)e^t \sin(\pi x)$
P1D-2	$1 + x^2$	0	$(3x + 1)^2$	$-9e^{3x-t}$
P1D-3	D	v	0	0

Tabla 7.6: Soluciones analíticas de los ejemplos parabólicos en 1-D.

Ejemplo	Solución Exacta
P1D-1	$e^t \sin(\pi x)$
P1D-2	e^{3x-t}
P1D-3	$u(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{x-vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left(\frac{xv}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x+vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\}$

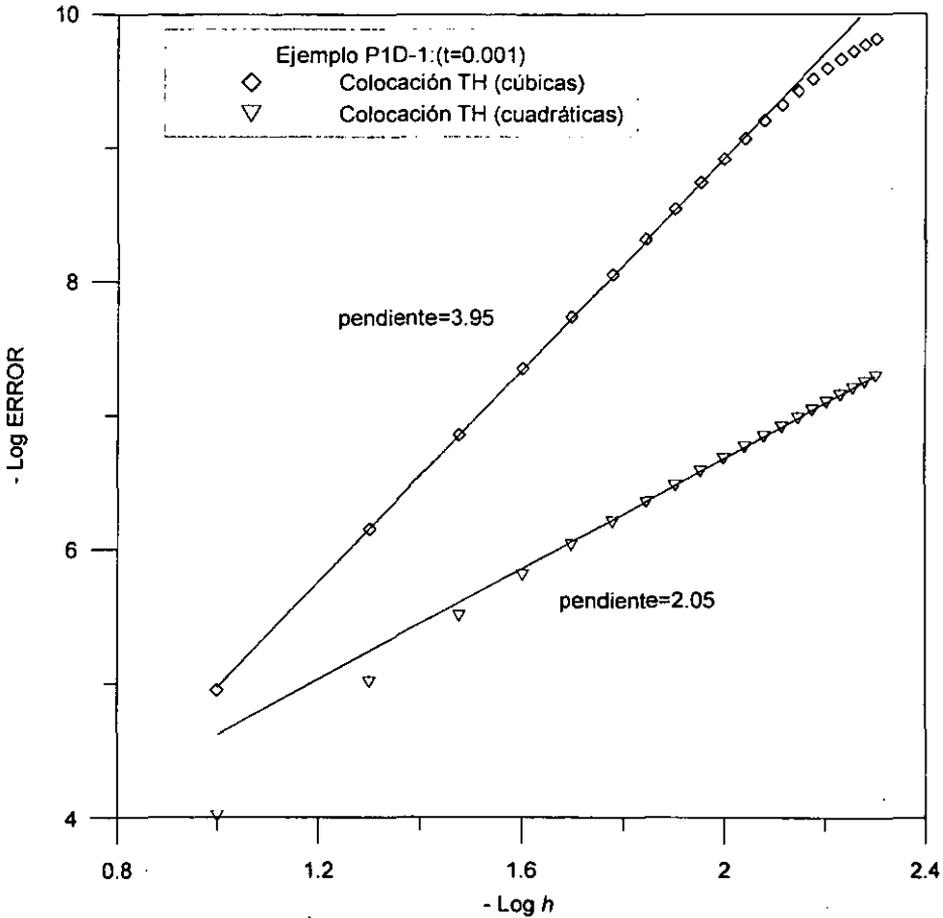


Fig. 7.18: Ejemplo P1D-1: Convergencia del método de colocación TH en $t = 0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.

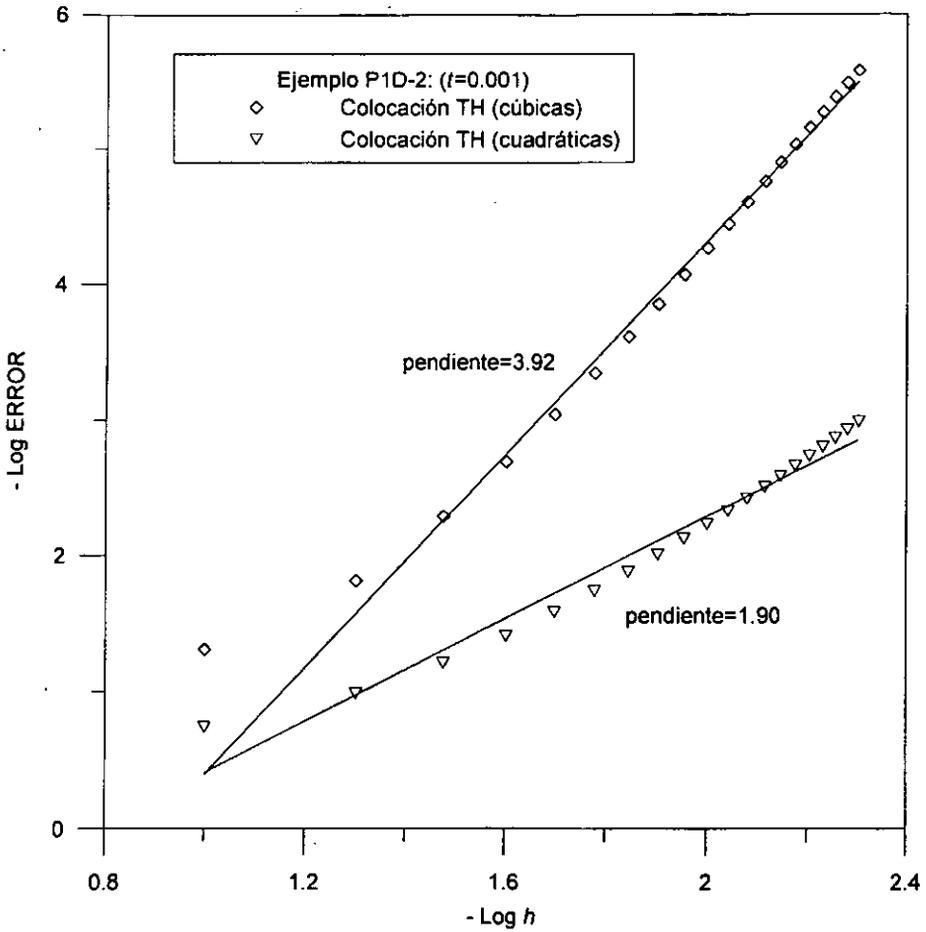


Fig. 7.19: Ejemplo P1D-2: Convergencia del método de colocación TH en $t=0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.

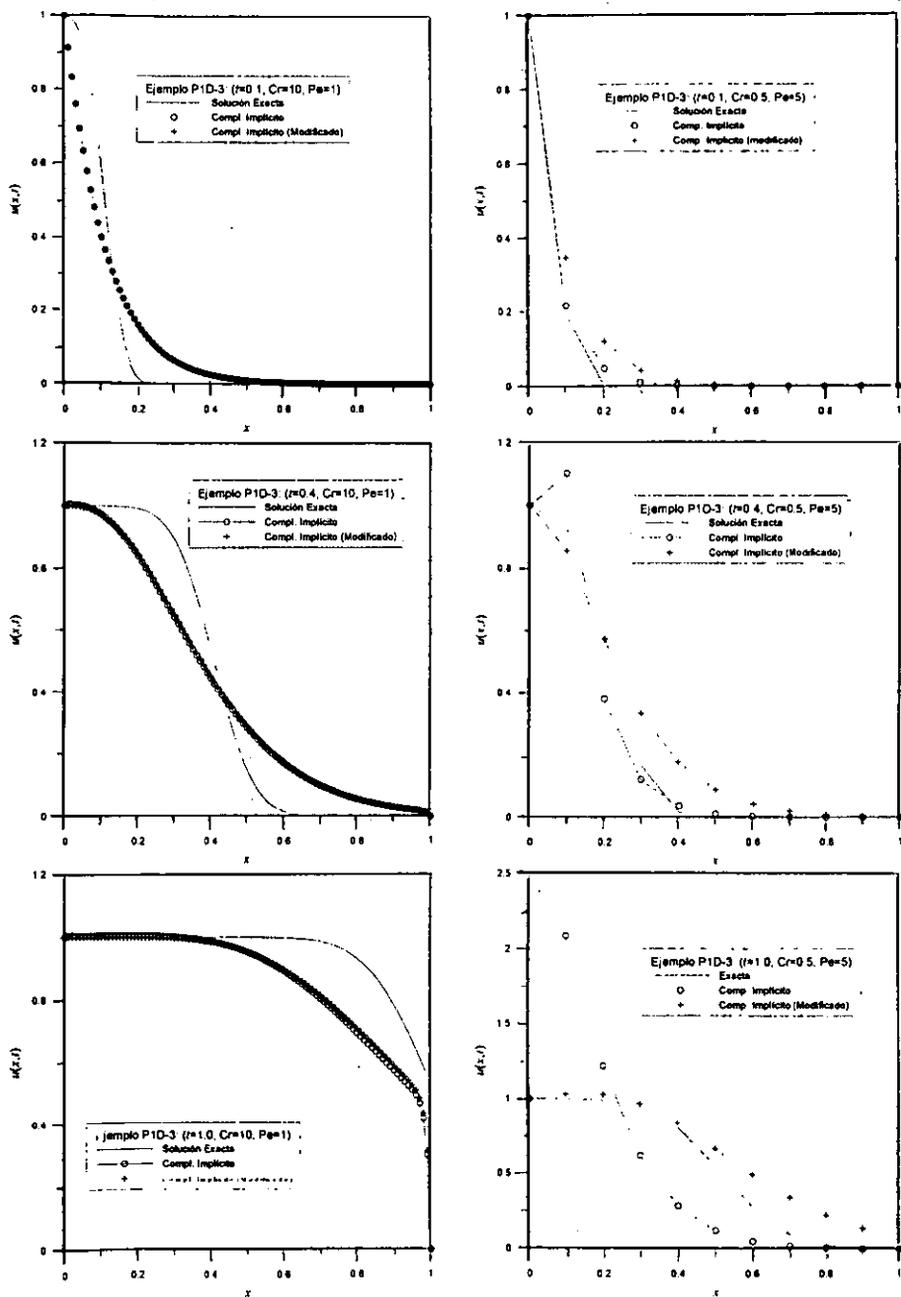


Fig. 7.20: Ejemplo P1D-3: Comparación del método de Colocación TH (cúbicas) usando un esquema completamente implícito en el tiempo para diferentes números de Courant (Cr) y Peclet (Pe).

7.4 Problemas parabólicos en dos dimensiones

Los experimentos numéricos en dos dimensiones consistieron en resolver el problema de la ecuación parabólica Ec.(7.14), con condiciones iniciales Ec.(7.15) y condiciones de frontera de tipo Dirichlet Ec.(7.16) impuestas por la solución analítica. Las condiciones de salto Ec.(7.17) se tomarán igual a cero en todos los casos.

Ecuación diferencial

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{a} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b}u) + cu = f_{\Omega}; \quad \forall (x, y) \in [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}], \quad t > 0 \quad (7.14)$$

donde $\underline{a} = \begin{pmatrix} a_{11}(x, y, t) & a_{12}(x, y, t) \\ a_{21}(x, y, t) & a_{22}(x, y, t) \end{pmatrix}$ es un tensor simétrico, positivo definido, acotado y

suave a tramos en todo el dominio $[x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$, (Fig. 6.3), $\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1(x, y) \\ b_2(x, y) \end{pmatrix}$ y

los coeficientes $a_{ij}(x, y), b_i(x, y), c(x, y)$ - son funciones continuas en todo el dominio.

Condiciones Iniciales

$$u(x, y, t_0) = u_0(x, y); \quad \forall (x, y) \in [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}] \quad (7.15)$$

Condiciones de Frontera

$$\begin{aligned} u(x_{\min}, y, t) &= u_{\partial 1}(y, t); & u(x_{\max}, y, t) &= u_{\partial 2}(y, t); \\ u(x, y_{\min}, t) &= u_{\partial 3}(x, t); & u(x, y_{\max}, t) &= u_{\partial 4}(x, t); \end{aligned} \quad t > 0 \quad (7.16)$$

Condiciones de Salto

$$[u] = [u_{\underline{z}}] = 0; \quad [\underline{a} \cdot \nabla u] \cdot \underline{n} = [\underline{a} \cdot \nabla u_{\underline{z}}] \cdot \underline{n} = 0; \quad \text{en } \Sigma \quad (7.17)$$

Los coeficientes de la ecuación de cada uno de los ejemplos están dados a continuación en la Tabla 7.7 y sus correspondientes soluciones analíticas en la Tabla 7.8.

Tabla 7.7: Definiciones de los coeficientes de los ejemplos parabólicos en 2-D.

Ejemplo	\underline{a}	\underline{b}	c	f_{Ω}
P2D-1	$a_{11} = a_{22} = 1/\pi^2$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 0$	0	0
P2D-2	$a_{11} = 1 + x^2$ $a_{22} = 1 + y^2$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = 0$	$1 - \pi^2(2 + x^2 + y^2)$	$-2\pi e^{-t} \{x \cos(\pi x) \sin(\pi y) + y \sin(\pi x) \cos(\pi y)\}$
P2D-3	$a_{11} = a_{22} = D$ $a_{12} = a_{21} = 0$	$b_1 = b_2 = v$	$-(1 + 2D\pi^2)$	$e^t \pi v \sin\{\pi(x + y)\}$

Tabla 7.8: Soluciones analíticas de los ejemplos parabólicos en 2-D.

Ejemplo	Solución Exacta
P2D-1	$e^{-t} (\sin(\pi x) + \sin(\pi y))$
P2D-2	$e^{-t} \sin(\pi x) \sin(\pi y)$
P2D-3	$e^t \sin(\pi x) \sin(\pi y)$

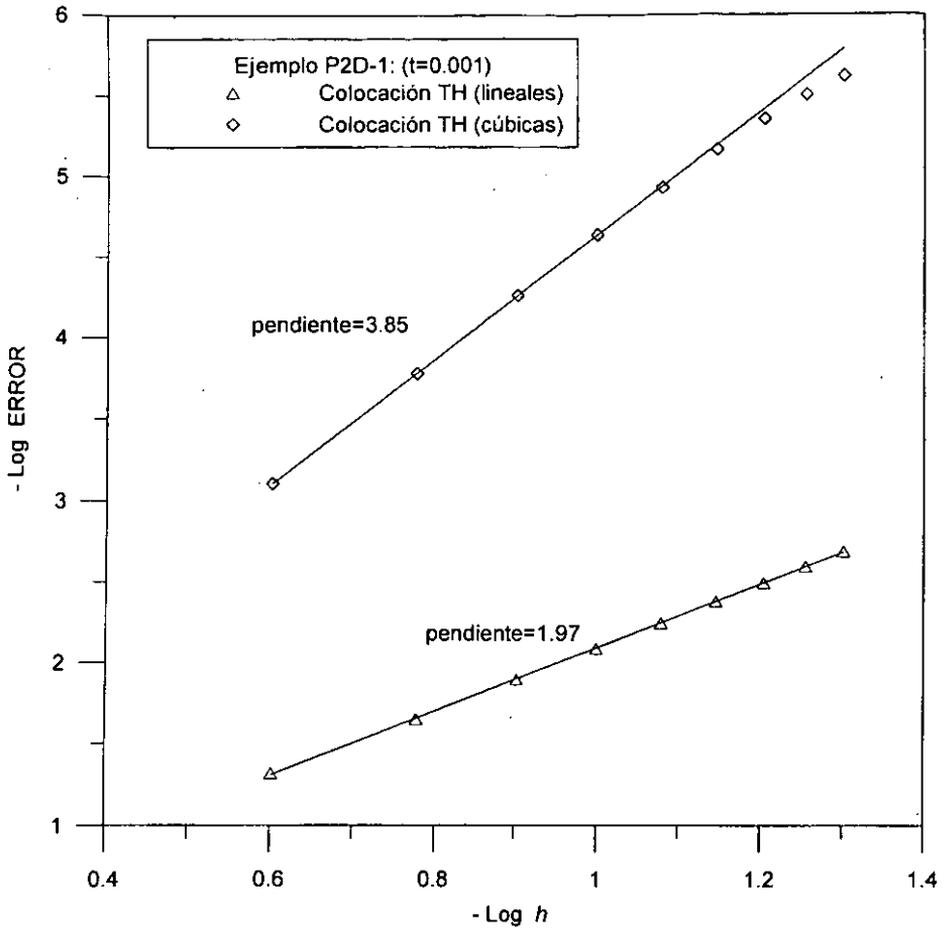


Fig. 7.21: Ejemplo P2D-1: Convergencia del método de colocación TH en $t=0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.

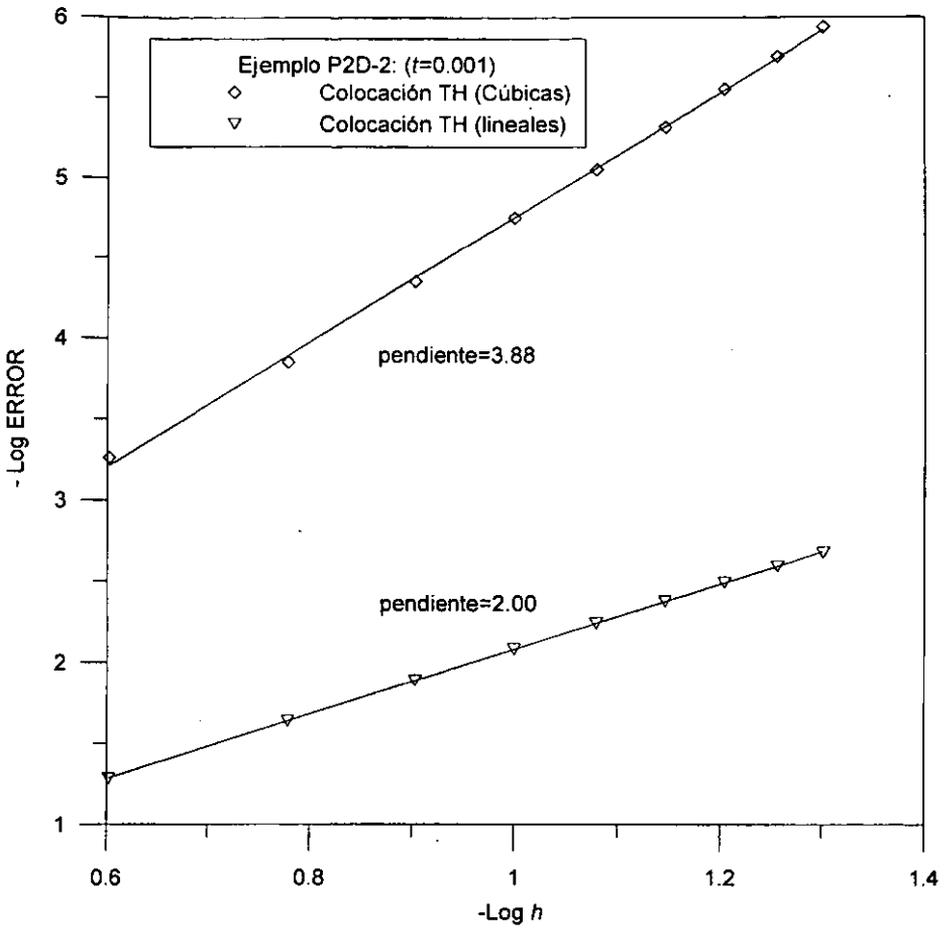


Fig. 7.22: Ejemplo P2D-2: Convergencia del método de colocación TH en $t=0.001$ usando un esquema completamente implícito en el tiempo.

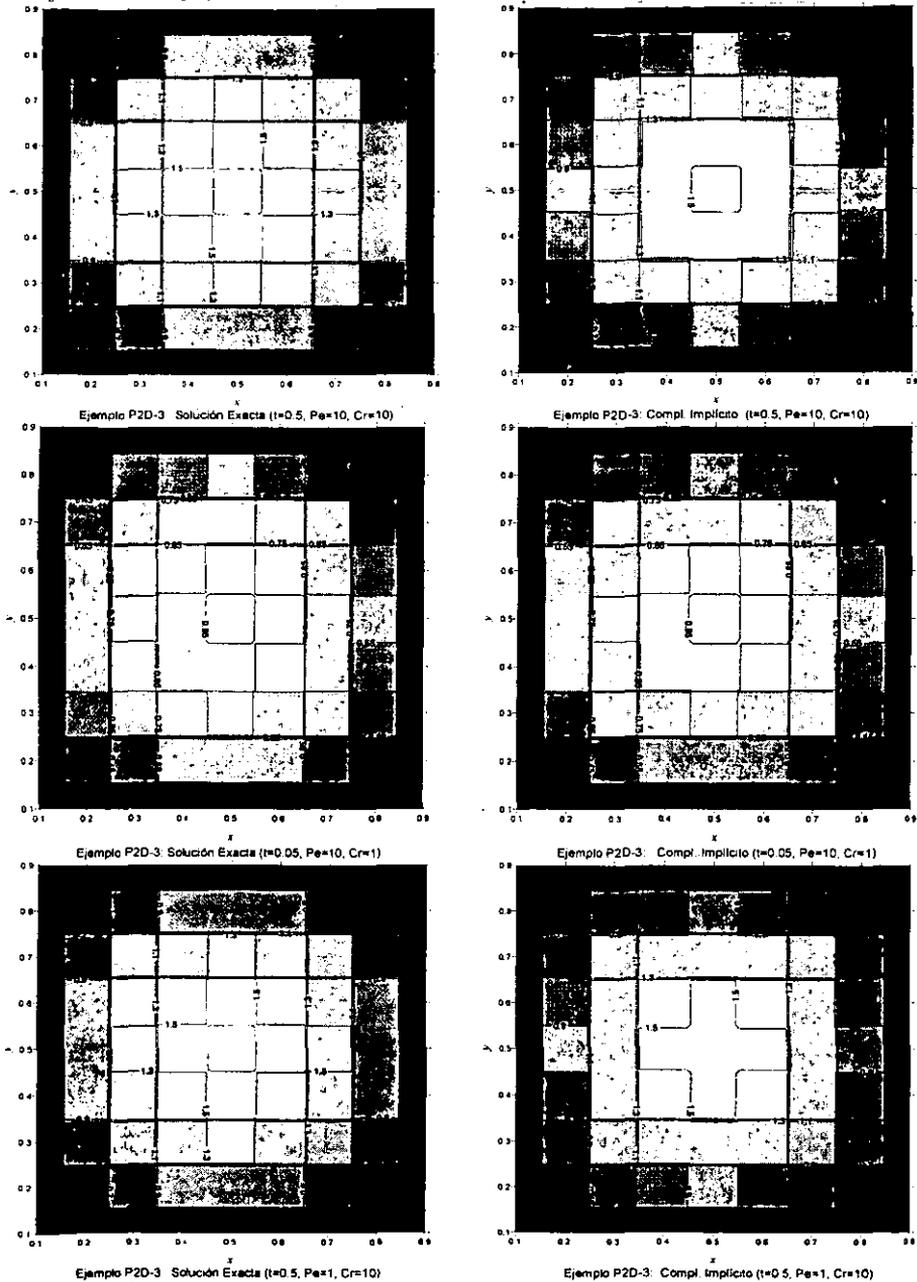


Fig. 7.23: Ejemplo P2D-3: Comparación de Colocación TH (cúbicas) usando un esquema completamente implícito en el tiempo para diferentes números de Courant (Cr) y Peclet (Pe).

8 Discusión y Análisis de Resultados Numéricos

8.1 Problemas Elípticos

En las secciones 7.1 y 7.2 se muestran los resultados numéricos de la aplicación del método de colocación TH a la ecuación elíptica general de segundo orden para una y dos dimensiones respectivamente.

En particular, en una dimensión los gráficos 7.2 hasta 7.9, muestran una comparación del orden de convergencia del error para el método convencional de colocación usando polinomios cúbicos de Hermite como funciones bases y el método de colocación TH usando polinomios cuadráticos y cúbicos como funciones de peso.

Los experimentos numéricos se llevan a cabo para un total de siete ejemplos. Estos incluyen una gran variedad de casos, como son:

- Con coeficientes constantes: Ejemplos E1D-2, E1D-5, E1D-6 y E1D-7.
- Con coeficientes variables: Ejemplos E1D-1, E1D-3 y E1D-4.
- Con operadores simétricos: Ejemplos E1D-2, E1D-3, E1D-6 y E1D-7.
- Con operadores no simétricos: Ejemplos E1D-1, E1D-4 y E1D-5.
- Con advección dominante: Ejemplo E1D-5.
- Con saltos prescritos: Ejemplo E1D-6.
- Con coeficientes discontinuos: Ejemplo E1D-7.

En todos los casos fueron consistentes los ordenes del error que se obtuvieron para colocación TH:

- $O(h^2)$ para el caso de polinomios cuadráticos.
- $O(h^4)$ para el caso de polinomios cúbicos.

Estos resultados están publicados en el artículo [55], donde además se da una estimación teórica del orden del error; ésta que se puede ver en el Anexo C.

Los resultados numéricos de los problemas en dos dimensiones se muestran en los gráficos 7.11 hasta 7.17, donde se observa el orden de convergencia del error para el método de colocación TH usando polinomios lineales y cúbicos como funciones de peso.

Los experimentos numéricos se llevan a cabo también, como en una dimensión, para un total de siete ejemplos. Estos incluyen una gran variedad de casos, como son:

- Con coeficientes constantes: Ejemplos E2D-1, E2D-5, E2D-6 y E2D-7.
- Con coeficientes variables: Ejemplos E2D-2, E2D-3 y E2D-4.
- Con operadores simétricos: Ejemplos E2D-1, E2D-2, E2D-3 y E2D-7.
- Con operadores no simétricos: Ejemplos E2D-4, E2D-5 y E2D-6.
- Con advección dominante: Ejemplo E2D-5.
- Con saltos prescritos: Ejemplo E2D-6.
- Con coeficientes discontinuos: Ejemplo E2D-7.

El análisis teórico del error del método de colocación TH resulta para dos dimensiones mucho más complicado, ya que existen dos factores que introducen error en la solución numérica. Uno, es debido a que en los algoritmos numéricos sólo se pueden usar familias de funciones de peso que sean TH-completas hasta cierto grado de aproximación, puesto que los sistemas TH-completos son infinitos en dos o más dimensiones. El otro, es que la construcción de las propias funciones de peso deben satisfacer la ecuación diferencial adjunta homogénea y para esto se usa un método numérico, en este caso colocación ortogonal, el cual tiene su propio error de aproximación.

No obstante, al realizar una gran cantidad y variedad de experimentos numéricos en todos los casos arrojó consistentemente los siguientes órdenes de error de la aproximación:

- $O(h^2)$ para el caso de polinomios lineales.
- $O(h^4)$ para el caso de polinomios cúbicos.

8.2 Problemas Parabólicos

En las secciones 7.3 y 7.4 se muestran ejemplos de los resultados de la solución numérica de la ecuación parabólica en una y dos dimensiones, usando como discretización en el tiempo un esquema completamente implícito y aplicando en cada paso del mismo el procedimiento de colocación TH anteriormente desarrollado para la ecuación elíptica de segundo orden.

En los gráficos 7.18 y 7.19 se ilustran el orden de error del método de colocación TH aplicado a los ejemplos P1D-1 (ecuación del calor no homogénea con coeficientes constantes) y P1D-2 (con coeficientes variables) en una dimensión. En el gráfico se obtiene, para un tiempo pequeño y fijo ($t = 0.001$), el orden de convergencia del error $O(h^2)$ cuando se usan polinomios cuadráticos como funciones de peso y $O(h^4)$ cuando éstas son polinomios cúbicos. Lo cual es consistente con los órdenes obtenidos para el método de colocación TH aplicado a la ecuación elíptica.

Con el ejemplo P1D-3 se intenta explorar el desempeño del método aplicado a un caso con advección dominante usando las funciones de peso cúbicas. En la figura 7.20 se pueden observar los gráficos de la solución exacta y la aproximada, de la aplicación del método de colocación TH usando el esquema completamente implícito sin modificación y el modificado, como fue descrito en la sección 5 del capítulo 6, para dos combinaciones diferentes de los coeficientes del término de segundo orden (D) y del término de primer orden (v), respectivamente: Los gráficos de la columna izquierda corresponden al primer caso cuando $D=0.01$ y $v=1.0$ para tres instantes de tiempo ($t=0.1, 0.4$ y 1.0).

Tabla 8.1: Características del caso1 del Ejemplo P1D-3
($D=0.01, v=1.0, h=\Delta x=0.01$ y $k=\Delta t=0.1$)

Esquema en Diferencias	Número de Peclet (Pe)	Número de Courant (Cr)	Distorsión del Frente	Oscilación Numérica
Completamente Implícito	1	10	Ligera	No hay
Completamente Implícito Modificado	1	10	Ligera	No hay

En este caso se satisface el criterio de Peclet ($Pe \leq 2$) pero no el de Courant (ver Tabla 8.1) y para las dos variantes del esquema completamente implícito se comporta la solución aproximada de igual manera, mostrando una ligera distorsión del frente.

Mientras que para el segundo caso (ver Tabla 8.2) se satisface el criterio de Courant ($Cr \leq 1$) y no así el de Peclet. El esquema modificado no muestra oscilación numérica, mientras que para el esquema sin modificación las oscilaciones numéricas son notorias.

Tabla 8.2: Características del caso 2 del Ejemplo P1D-3

($D=0.01$, $v=0.5$, $h=\Delta x=0.1$ y $k=\Delta t=0.1$)

Esquema en Diferencias	Número de Peclet (Pe)	Número de Courant (Cr)	Distorsión del Frente	Oscilación Numérica
Completamente Implícito	5	0.5	Ligera	Fuerte
Completamente Implícito Modificado	5	0.5	Ligera	No hay

De manera análoga, en los gráficos 7.21 y 7.22 se ilustra el orden de error del método de colocación TH aplicado a los ejemplos P2D-1 (ecuación del calor no homogénea con coeficientes constantes) y P2D-2 (coeficientes variables) respectivamente. En las figuras se puede ver que para un tiempo pequeño y fijo ($t = 0.001$), el orden de convergencia del error es $O(h^2)$ cuando se usan polinomios lineales como funciones de peso y $O(h^4)$ cuando éstas son polinomios cúbicos. Lo cual es consistente con los órdenes obtenidos para el método de colocación TH aplicado a la ecuación elíptica.

En el tercer ejemplo P2D-3 se explora el desempeño del método aplicado a un caso con advección dominante en dos dimensiones usando las funciones de peso cúbicas. En la figura 7.23 se pueden observar los gráficos de la solución exacta y la aproximada usando el esquema completamente implícito en el tiempo sin modificación para un tiempo fijo dado. Se muestran tres combinaciones diferentes de los coeficientes del término de segundo orden (D), del término de primer orden (v), del tamaño de la malla ($h=\Delta x=\Delta y$) y el paso en el

tiempo ($k=\Delta t$). Las características de cada caso están resumidas en la Tabla 8.3 y los gráficos de cada fila en la figura 7.23 se corresponden con cada uno de ellos.

Tabla 8.3: Características de los casos del Ejemplo P2D-3

Casos	Coefficientes de la ecuación	Número de Peclet (Pe)	Número de Courant (Cr)	Distorsión de la solución	Oscilación Numérica
1	$D=0.1, v=10.0,$ $h=\Delta x=\Delta y=0.1$ y $k=\Delta t=0.1$	10	10	Ligera	No hay
2	$D=0.1, v=10.0,$ $h=\Delta x=\Delta y=0.1$ y $k=\Delta t=0.01$	10	1	No hay	No hay
3	$D=1.0, v=10.0,$ $h=\Delta x=\Delta y=0.1$ y $k=\Delta t=0.1$	1	10	Ligera	No hay

En el primer caso no se satisfacen ni el criterio de Peclet ($Pe > 2$), ni el de Courant ($Cr > 1$) (ver Tabla 8.3) y la solución aproximada se comporta de manera similar que la exacta, aunque sus valores están ligeramente por debajo de ésta.

En el segundo caso se satisface el criterio de Courant ($Cr \leq 1$) pero no el de Peclet ($Pe > 2$) (ver Tabla 8.3) y la solución aproximada se comporta de igual manera que la exacta, sin mostrar ninguna distorsión.

Mientras que en el tercer caso (ver Tabla 8.3) se satisface el criterio de Peclet ($Pe \leq 2$), no así el de Courant ($Cr > 1$). La solución aproximada se comporta de igual manera que la exacta, mostrar una ligera distorsión respecto a la exacta.

En ninguno de los tres casos se observa oscilación numérica.

9 Conclusiones y Perspectivas

9.1 Conclusiones

En la presente tesis se pretendió dar una visión unificada de la teoría de Trefftz-Herrera que en gran medida se encuentra diseminada de una manera muy sistemática en muchos artículos de Herrera et, al.[31-62], su motivación y desarrollo de su formulación basada en funciones de Green en campos discontinuos [37], su relación con respecto a la teoría general de los métodos de Trefftz y su implementación práctica al hacer uso del método de colocación como procedimiento numérico para la construcción de las funciones de peso, de ahí la derivación de un método indirecto de colocación: *Colocación Trefftz-Herrera*, el cual exhibe notorias ventajas sobre los métodos tradicionales de colocación.

Problema de Contorno con Saltos Prescritos

Una de las principales ventajas de la teoría Trefftz-Herrera es que al ser aplicada a un *Problema de Contorno con Saltos Prescritos*, que es una generalización de los problemas habituales de valores de frontera, nos permite introducir de manera natural funciones discontinuas en la aproximación de la solución y tratar de manera sistemática los problemas con coeficientes discontinuos.

Colocación Trefftz-Herrera

Al ser usado el método de colocación para la construcción de las funciones de peso en la formulación Trefftz-Herrera resulta un método indirecto de colocación que exhibe las siguientes ventajas sobre el método convencional:

1. Produce matrices mejor estructuradas, constituidas por diagonales en bloques. Esto permite el uso de procedimientos de inversión más eficientes para la solución del sistema global de ecuaciones resultante.
2. Reduce el número de grados de libertad asociados con cada nodo de la partición, que puede llegar a ser uno para el caso de funciones de peso con polinomios lineales en Σ , lo cual es una reducción dramática con respecto a colocación convencional donde usualmente el mínimo es cuatro. Esto implica que se obtienen matrices globales de mucho menor tamaño.

3. Si el operador es positivo definido y simétrico, la matriz resultante también es positiva definida y simétrica, lo cual no ocurre en colocación convencional. Esto permite la utilización de métodos altamente eficientes como es el del Gradiente Conjugado.
4. Los problemas con saltos y coeficientes discontinuos no implican un esfuerzo computacional extra, son del mismo nivel de complejidad que para los casos sin saltos (solución continua) y coeficientes continuos.
5. Los órdenes experimentales y teóricos (para una dimensión) del error de la aproximación muestran que cuando se usan polinomios cúbicos en Σ , éstos son de $O(h^4)$ que es el mismo orden del error que se obtiene con colocación convencional.

Mientras que cuando se usan polinomios lineales en Σ éste es de $O(h^2)$.

Problemas de Transporte

En los casos estacionarios, es decir, cuando la ecuación de transporte no depende del tiempo, ésta se transforma en una ecuación elíptica y por lo tanto se aplica directamente el método de Colocación TH con las ventajas ya expuestas arriba.

Existen casos no estacionarios, en que las condiciones de frontera sí dependen del tiempo pero la ecuación de transporte es elíptica, por lo que también pueden ser tratada de manera similar al caso estacionario.

Cuando el problema es no estacionario, la alternativa más simple, siguiendo un enfoque euleriano, es aplicar el método de colocación TH a la discretización en el tiempo de la ecuación de transporte usando un esquema theta (θ) en diferencias finitas. En esta tesis se analizaron los casos con $\theta = 1$ y $\theta = \frac{1}{2}$ conocidos como esquemas completamente implícito y de Crank-Nicolson respectivamente. Se implementó y se ofreció algunos resultados numéricos para el esquema completamente implícito.

En los casos sin advección, es decir, cuando el término de primer orden es nulo ($\underline{b} = 0$) se obtuvo órdenes del error de la aproximación en coordenadas espaciales similares a los obtenidos con la ecuación elíptica. Sin embargo para los casos con advección y en particular con advección dominante ocurren distorsiones de los frentes en la solución,

aunque no se aprecian las tradicionales oscilaciones. Sin dudas este es un tema no agotado y que requiere de mayor investigación en el futuro.

9.2 Perspectivas

Bajo la visión general de la formulación variacional de los métodos de Trefftz-Herrera, se abre toda una gama de posibilidades de desarrollo y de interpretación de los métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Como el campo de aplicación y de desarrollo es muy amplio, sólo mencionaremos algunas de las áreas que consideramos se deben investigar en el futuro inmediato.

Métodos Directos

Usando la formulación de Trefftz-Herrera se pudiera hacer una revisión de los aquí llamados métodos directos, de manera que se pudieran formular estrategias de solución más eficientes. En particular algo ya se ha hecho en este sentido usando colocación, ver [60].

Métodos de Descomposición de Dominio y Paralelización

En nuestro trabajo nos limitamos a implementar el método de colocación TH de manera secuencial en una PC. Resulta muy interesante explotar las posibilidades que ofrece el supercómputo y desarrollar un procedimiento de Trefftz-Herrera para descomposición de dominio con una implementación en paralelo. Una vía para hacerlo, podría ser usando el método iterativo del Gradiente Conjugado aplicado a la formulación variacional dada en la Ec. (3.18), la cual resulta más adecuada ya que todos los términos de la misma están definidos en la frontera interna Σ .

Precondicionadores

En conexión con el punto anterior podría ser factible el desarrollo de precondicionadores basados, por ejemplo, en el caso que usa polinomios lineales en Σ debido a su relativa simplicidad.

Esta es una vía que permite mejorar la eficiencia de los métodos iterativos usados en descomposición de dominio y consiste en transformar al sistema de ecuaciones en otro equivalente, en el sentido de que posea la misma solución del sistema original pero que a su vez tenga mejores condiciones espectrales. Esta transformación se conoce como *precondicionamiento* y consiste en aplicar al sistema de ecuaciones una matriz conocida como *precondicionador* encargada de realizar el mejoramiento del número de condicionamiento.

Aplicación a otras ecuaciones

Es interesante extender la aplicación del método de Colocación TH a otras ecuaciones o sistemas de éstas como se mostró en la sección 3.3: ecuación biarmónica, problema de Stokes, ecuaciones de elasticidad, etc.

ELLAM

Para problemas de transporte queda pendiente la implementación espacio-tiempo del método Euleriano-Lagrangiano del Adjunto Localizado, lo cual sería de sumo interés en casos con advección dominante.

Referencias

- [1] Allen, M.B., I. Herrera and G.F. Pinder, "Numerical modeling in science and engineering". John Wiley & Sons. 418 pp, 1988.
- [2] Allen, M. B. and G. F. Pinder, "The Convergence of Upstream Collocation in the Buckley-Leverett Problem," *Society of Petroleum Engineers Journal*, pp. 363-370, 1985.
- [3] Begehr, H. and R. P. Gilbert, "Transformations, transmutations, and kernel functions", Vol. 1. Longman Scientific & Technical, 1999.
- [4] Bennett C. and Sharpley R., "Interpolation of Operators", Academic Press, 469 pp, 1988.
- [5] Bergman, S., "Integral operators in the theory of linear partial differential equations." *Ergeb. Math. Grenzgeb.* 23, Springer, Berlin etc., 1961; 2, rev. print., 1969.
- [6] Berlanga, R. and I. Herrera, "The Gauss Theorem for Domain Decompositions in Sobolev Spaces", *Applicable Analysis: An International Journal*. Vol. 76, (1-2), p.p. 67-81, 2000.
- [7] Bialecki, B. and G. Fairweather, "Orthogonal Spline Collocation Methods for Partial Differential Equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 128, pp. 55-82, 2001.
- [8] Brill, S. H., *The Solution of Two-Dimensional Partial Differential Equations via Hermite Collocation with Block Red-Black Gauss-Seidel Preconditioner*, Ph.D. dissertation, Vermont University, 1998.
- [9] Carey, G.F. and B. A. Finlayson, "Orthogonal Collocation on Finite Elements", *Chem. Engrg. Sci.*, Vol. 30, pp. 587-596, 1975.
- [10] Celia, M. & I. Herrera, "Solution of general differential equations using the algebraic theory approach". *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 3(1): 117-129, 1987.
- [11] Celia, M. A. and G. F. Pinder, "Generalized Alternating-Direction Collocation Methods for Parabolic Equations. I. Spatially Varying Coefficients", *Numerical Methods Partial Differential Equations*, 6, pp. 193-214, 1990.
- [12] Celia, M. A. and G. F. Pinder, "Generalized Alternating-Direction Collocation Methods for Parabolic Equations. II. Transport Equations with Applications to Seawater Intrusion Problems", *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 6, pp. 215-230, 1990.
- [13] Celia, M. A., I. Herrera, E. Bouloutas, and J. S. Kindred, "A new numerical approach for the advective diffusive transport equation". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 5(3): 203-226, 1989.
- [14] Celia, M. A., *Collocation on Deformed Finite Elements and Alternating Direction Collocation Methods*, Ph.D. dissertation, Princeton University, 1983.
- [15] Celia, M. A., T. F. Russell, I. Herrera and R.E. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation". *Advances in Water Resources*, 13(4): 187-206, 1990
- [16] Celia, M. y Herrera, I. "Solution of General Differential Equations Using the Algebraic Theory Approach". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 3(1), pp. 117-129, 1987.

- [17] Celia, M.A. and G. F. Pinder, Generalized Alternating-Direction Collocation Methods for Parabolic Equations. III. Non rectangular Domains, *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 6, pp. 231-243, 1990.
- [18] Celia, M.A. & L.A. Ferrand, "A comparison of ELLAM formulations for simulation of reactive transport in groundwater". In S.S.Y.Wang, (ed.) *Advances in Hydro-Sciences and Engineering*. :1829-1836. Center for Computational Hydroscience and Engineering, The University of Mississippi, 1993.
- [19] Celia, M.A., "Eulerian-Lagrangian localized adjoint methods for contaminant transport simulations". *Computational Methods in Water Resources X*. 1: 207-216, 1994.
- [20] Celia, M.A., Herrera, I. y Bouloutas, T.E. "Adjoint Petrov-Galerkin Methods for Multi-Dimensional Flow Problems". *Finite Element Analysis in Fluids*, T.J. Chung and R. Karr, Eds. University of Alabama Press, pp. 953-958, 1989.
- [21] Celia, M.A., I. Herrera, & T.E. Bouloutas, "Adjoint Petrov-Galerkin methods for multi-dimensional flow problems". *Finite Element Analysis in Fluids*. In T.J. Chung & R. Karr (eds), University of Alabama Press. :953-958, 1989.
- [22] Celia, M.A., I. Herrera; E. Bouloutas & J.S. Kindred, "A new numerical approach for the advective diffusive transport equation". *Journal of Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 5(3): 203-226, 1989.
- [23] Celia, M.A., J.S. Kindred & I. Herrera, "Contaminant transport and biodegradation. 1: A numerical model for reactive transport in porous media". *Water Resources Research*. 25(6): 1141-1148, 1989.
- [24] Celia, M.A., T.F. Russell; I. Herrera & R.E. Ewing, "An Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for the advection-diffusion equation". *Advances in Water Resources*. 13(4): 187-206, 1990.
- [25] Colton, D.L., "*Analytic theory of partial differential equations*" Pitman, Boston etc., XII, 239 pp, 1980.
- [26] deBoor, C. and B. Swartz, "Collocation at the Gaussian Points," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 10, No. 4, pp. 582-606, 1973.
- [27] Finlayson, B. A., *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*, Academic, New York, 1972.
- [28] Gilbert, R. P., *Function theoretic methods in partial differential equations*. Academic Press, New York. XVIII, 311 pp., 1969.
- [29] Guarnaccia, J., I. Herrera, and G. Pinder, "Solution of Flow and Transport Problems Using a Collocation Discretization of a Domain Decomposition Algorithm," *Computational Methods in Water Resources X*, Vol. 1, pp. 265-272, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1994.
- [30] Guymon, G. L., "A Finite Element Solution of the One-Dimensional Diffusion-Convection Equation," *Water Resources Research*, Vol. 6, No. 1, pp. 204-210, 1970
- [31] Herrera, I., "Boundary methods. A criterion for completeness". *Proceedings National Academy of Sciences, U.S.A.*, 77(8): 4395-4398, 1980.
- [32] Herrera, I., "An algebraic theory of boundary value problems". *KINAM*, 3(2): 161-230, 1981.
- [33] Herrera, I., "Boundary methods for fluids". *Finite Elements in Fluids*, Vol. IV, R.H. Gallagher, D. Norrie, J.T. Oden & O.C. Zienkiewicz, Eds., John Wiley & Sons Ltd., Chapter 19, :403-432, 1982.

- [34] Herrera, I. and H. Gourgeon. "Boundary methods. C-complete systems for stokes problems. *Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering*. (30): 225-241, 1982.
- [35] Herrera I., *Boundary Methods. An Algebraic Theory*, Pitman Avanced Publishing Program. 136 pp, 1984.
- [36] Herrera, I., "Trefftz method". Topics in boundary element research, Vol.1: Basic Principles and Applications, C.A. Brebbia, Ed., Springer-Verlag, Chapter 10, pp. 225-253, 1984.
- [37] Herrera, I., "Unified approach to numerical methods. Part 1. Green's formulas for operators in discontinuous fields". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 1(1): 12-37, 1985.
- [38] Herrera, I., "Unified approach to numerical methods. Part 2. Finite elements, boundary methods and its coupling". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 1(3): 159-186, 1985.
- [39] Herrera, I., L. Chargoy, and G. Alduncin, "Unified approach to numerical methods. Part 3. Finite differences and ordinary differential equations". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 1(4): 241-258, 1985.
- [40] Herrera, I., "Some unifying concepts in applied mathematics". The Merging of Disciplines: New Directions in Pure, Applied, and Computational Mathematics. Edited by R.E. Ewing, K.I. Gross and C.F. Martin. Springer Verlag, New York, :79-88, 1986.
- [41] Herrera, I., "The algebraic theory approach for ordinary differential equations: highly accurate finite differences". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 3(3): 199-218, 1987.
- [42] Herrera, I., "New approach to advection-dominated Flows and comparison with other methods". Computational Mechanics'88, Springer Verlag, Heidelberg, vol. 2, 1988.
- [43] Herrera, I., Celia, M.A. y Martínez, J.D. "Localized Adjoint Method as a New Approach to Advection Dominated Flows". Recent Advances in Ground-Water Hydrology, J.E. Moore, A.A. Zaporozec, S.C. Csallany and T.C. Varney, Eds. American Institute of Hydrology, pp. 321-327, 1989.
- [44] Herrera, I. y Ewing, R.E. "Localized Adjoint Methods: Applications to Multiphase Flow Problems". Proceedings Fifth Wyoming Enhanced Oil Recovery Symposium, Mayo 10-11, 1989, Enhanced Oil Recovery Institute, University of Wyoming, pp. 155-173, 1990.
- [45] Herrera, I. "Localized Adjoint Method: Topics for Further Research". Computational Methods in Water Resources IX, Vol. I: Numerical Methods in Water Resources, T.F. Russell, R.E. Ewing, C.A. Brebbia, W.G. Gray & G.F. Pinder, Computational Mechanics Publications, Southampton & Boston, pp 9-12, 1992.
- [46] Herrera, I. "Localized Adjoint Methods: A New Discretization Methodology", Chapter 6 of the book: "Computational Methods in Geosciences", W.E. Fitzgibbon & M.F. Wheeler Eds., SIAM, pp. 66-77, 1992.
- [47] Herrera, I., "On operator extensions: the algebraic theory approach". Advances in Optimization and Numerical Analysis, (Proceedings of the VI Workshop on Optimization and Numerical Analysis, Oaxaca, Oax. México, January, 1992), Mathematics and its Applications, Kluwer Academic Publishers, :155-163, 1992.

- [48] Herrera, I., "Innovative discretization methodologies based on LAM". *Finite Elements in Fluids: New Trends and Applications*, Vol. 2. K. Morgan et al. (eds). Pineridge Press. : 1437-1447, 1993.
- [49] Herrera, I., Ewing, R.E., Celia, M.A. y Russell, T. "Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Method: The Theoretical Framework". *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 9(4), pp. 431-457, 1993.
- [50] Herrera, G. and I. Herrera, "An Eulerian-Lagrangian method of cells, based on localized adjoint methods". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 10: 205-223, 1994.
- [51] Herrera, I., J. Guarnaccia, and G. F. Pinder, "Domain Decomposition Method for Collocation Procedures," *Computational Methods in Water Resources X*, Vol. 1, pp. 273-280, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1994.
- [52] Herrera, I., "Trefftz-Herrera domain decomposition", Special Volume on Trefftz Method: 70 Years Anniversary; *Advances in Engineering Software*, 24: 43-56, 1995.
- [53] Herrera, I. "Trefftz Method, Domain Decomposition and TH-Collocation", XI International Conference on Computational Methods in Water Resources, Cancún, México, Vol. 1, pp. 515-524, 1996.
- [54] Herrera, I., "Trefftz-Herrera method". *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, Polish Academy of Sciences, 4 (3/4): 369-382, 1997.
- [55] Herrera, I. and M. Díaz, "Indirect methods of collocation: Trefftz-Herrera collocation". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 15(6): 709-738, 1999.
- [56] Herrera, I. "Collocation from a Broad Perspective". *Computation Methods in Water Vol. 2, Computational Methods, Surface Water Systems and Hidrology*; Eds. Bentley L.R. et al., Balkema, Rotterdam. pp. 661-667, 2000.
- [57] Herrera I., Herrera G., & J. Garfias, "ELLAM first decade: A review"; *Computational Methods in Water Resources*. Calgary, Alberta, Canada. 25 – 29 June 2000. pp 591 – 595, 2000.
- [58] Herrera, I., "Trefftz Method: A General Theory". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. 16 (6) 561-580, 2000.
- [59] Herrera, I. "On Jirousek Method and its Generalizations". *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*. Special Issue. 2000. (en prensa).
- [60] Herrera, I., Yates R. "General Theory of Domain Decomposition: Beyond Schwarz Methods". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 17, No. 5, pp. 495-517, 2001.
- [61] Herrera, I., R. Yates and M. Díaz, "General Theory of Domain Decomposition: Indirect Methods". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 2001 (en prensa).
- [62] Herrera, I., M. Díaz, *Notas de Clases del Curso de Modelación Matemática y Computacional de Sistemas Continuos*, 2001 (en preparación).
- [63] Hestenes, M. R. and E. Stiefel. "Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems," *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, Vol. 49, No. 6, pp. 409-436, 1952.
- [64] Huyakorn, P. S. and G. F. Pinder, *Computational Methods in Subsurface Flow*, Academic Press, 1983.

Bibliografia

- [65] International Scientific Committee for Domain Decomposition "Proceedings of 13 conferences on Domain Decomposition Methods". www.ddm.org, 1988-2000.
- [66] Jirousek, J. and N. Leon, "A powerful finite element for plate bending", *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **12**, 77-96, 1977.
- [67] Jirousek, J., "Basis for Development a Large Finite Elements Locally Satisfying all Field Equations", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **14**, pp. 65-92, 1978.
- [68] Jirousek, J. and P. Teodorescu, "Large finite elements method for the solution of problems in the theory of elasticity", *Comp. Struct.*, **15**(5), 575-587, 1982.
- [69] Jirousek, J. and L. Guex, "The hybrid-Trefftz finite element model and its application to plate bending", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **23**, 651-693, 1986.
- [70] Jirousek, J., "Hybrid-Trefftz plate bending elements with p-method capabilities", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **24**, 1367-1393, 1987.
- [71] Jirousek, J. and A. Venkatesh, "Implementation of curvilinear geometry into p-version HT plate elements", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **28**, 431-443, 1989.
- [72] Jirousek, J. and A. Venkatesh, "A simple stress error estimator for hybrid-Trefftz p-version elements", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **28**, 211-236, 1989.
- [73] Jirousek, J. and A. Venkatesh, "A new FE approach for adaptive reliability assurance", *Computers & Structures*, **37**, 217-230, 1990.
- [74] Jirousek, J. and A. Venkatesh, "Adaptivity in hybrid-Trefftz finite element formulation", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **29**, 391-405, 1990.
- [75] Jirousek, J. and M. N'Diaye, "Solution of orthotropic plates based on p extension of the hybrid-Trefftz finite element model", *Comp. Struct.*, **34**(1), 51-62, 1990.
- [76] Jirousek, J. and Q. H. Qin, "Application of hybrid-Trefftz element approach to transient heat conduction analysis", *Int. Rep. LSC 94/10*, Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, 1994.
- [77] Jirousek, J., B. Szybinski, and A. Wróblewski, "Mesh design and reliability assurance in hybrid-Trefftz p-element approach", *Int. Rep. LSC 94/15*, Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, 1994.
- [78] Jirousek, J., A. Wróblewski, and B. Szybinski, "A new 12 DOF quadrilateral element for analysis of thick and thin plates", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, **38**, 2619-2638, 1995.
- [79] Jirousek, J. and A. Wróblewski, "T-elements: state of the art and future trends", *Archives of Computational Methods in Engineering. State of the Art Reviews*, **3**, **4**, 323-434, 1996.
- [80] Jirousek, J. and A.P. Zielinski, "Survey of Trefftz-type element formulations". *Computers and Structures*, **63**(2), 225-242, 1997.
- [81] Lanczos, C., "Trigonometric Interpolation of Empirical and Analytical Functions," *J. of Math. And Phys.*, Vol. 17, No. 3, pp. 123-199, 1938.
- [82] Lions, J. L. and Magenes, E. (1972) "Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications" Vol. 1. Springer-Verlag, New York-Heidelberg-Berlin.
- [83] Marti, J. T., *Introduction to Sobolev Spaces and Finite Element Solution of Elliptic Boundary Value Problems*, Academic Press, London, 1986.
- [84] Oden T. J., "Finite Elements of Non-linear Continua", McGraw-Hill, New York, 1972.
- [85] Pinder, G. F. and W. G. Gray, *Finite Element Simulation is Surface and Subsurface Hydrology*, Academic Press, Inc., New York, 1977.

- [86] Prenter, P. M., *Splines and Variational Methods*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1975.
- [87] Prenter, P. M. and R. D. Russell, "Orthogonal Collocation for Elliptic Partial Differential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 13, No. 6, pp. 923-939, 1976.
- [88] Press, W.H., S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery, *Numerical Recipes In FORTRAN*, Second Edition, pp.963, 1992.
- [89] Quarteroni, A. and A. Valli, "Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations", *Numerical Mathematics and Scientific Computation*, 1999.
- [90] Reid, J. K., "On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations," *Large Sparse Sets of Linear Equations*, pp. 231-254, Academic Press, New York, 1971.
- [91] Russell R. D. and L. F. Shampine, "A Collocation Method for Boundary Value Problems", *Numer. Math.*, Vol. 19, pp. 1-28, 1972.
- [92] Sánchez Sesma, F.J., I. Herrera and J. Avilés, "A boundary method for elastic wave diffraction. Application to scattering of SH-waves by surface irregularities". *Bulletin of the Seismological Society of America*. **72**(2): 473-490, 1982.
- [93] Slater, J. C., "Electronic Energy Bands in Metals," *Phys. Rev.*, Vol. 45, pp. 794-801, 1934.
- [94] Spitz K. and J. Moreno, *A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modeling*, John Wiley & Sons, Inc., pp. 461, 1996.
- [95] Trefftz, E., "Ein Gegenstück zum Ritzschen Verfahren", in *Proceedings 2nd International Congress of Applied Mechanics*, (Zurich), 131-137, 1926.
- [96] Vekua, I.N., *New methods for solving elliptic equations*, North Holland, Amsterdam etc. And John Wiley, New York, XII, 358 pp., 1967.
- [97] Zielinski, A. P. and I. Herrera, "Trefftz method: fitting boundary conditions". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. (24): 871-891, 1987.
- [98] Zielinski, A. P. and O. C. Zienkiewicz, "Generalized finite element analysis with T-complete boundary solution functions", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **21**: 509-528, 1985.

Bibliografía sobre Métodos de Colocación

- [1] Allen, M. B. and G. F. Pinder, "Collocation Simulation of Multiphase Porous-Medium Flow," *Society of Petroleum Engineers Journal*, pp. 135-142, 1983.
- [2] Allen, M. B., "How Upstream Collocation Works," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 19, pp. 1753-1763, 1983.
- [3] Allen, M. B. and G. F. Pinder, "The Convergence of Upstream Collocation in the Buckley-Leverett Problem," *Society of Petroleum Engineers Journal*, pp. 363-370, 1985.
- [4] Allen, M. B. and M. C. Curran, Adaptive Local Grid Refinement Algorithms for Finite-Element Collocation, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 5, No. 3, pp. 121-132, 1989.
- [5] Alt, R. and J. Vignes, "Validation of Results of Collocation Methods for ODEs with the CADNA Library," *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 21, pp. 119-139, 1996.
- [6] Amodio, P. and F. Mazzia, "Parallel Block Preconditioning for the Solution of Boundary Value Methods," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 69, No. 2, pp. 191-206, 1996.
- [7] Archer, D., "An $O(h^4)$ Cubic Spline Collocation Method for Quasilinear Parabolic Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 14, No. 4, pp. 620-637, 1977.
- [8] Archer, D. and J. C. Díaz, "A Family of Modified Collocation Methods for Second Order Two Point Boundary Value Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 15, No. 2, pp. 242-254, 1978.
- [9] Archer, D., "Collocation in C^0 Spaces for First Order Hyperbolic Equations. I: Optimal Order Global Estimates for Quasilinear Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 15, No. 2, pp. 271-281, 1978.
- [10] Bentley, L. R., G. F. Pinder and I. Herrera, "Solution of the Advective-Dispersive Transport Equation Using a Least Squares Collocation, Eulerian-Lagrangian Method", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 5, No. 3, pp. 227-240, 1989.
- [11] Bhuiyan, M. A., R. I. Allayla, T. Hussain, A. M. Ishaq, and M. F. N. Mohsen, "Solution of the Transport Equation by the Collocation Method in Conjunction with the Adaptive Hermite Finite Element Family," *Water Resources Research*, Vol. 26, No. 11, pp. 2661-2677, 1990.
- [12] Bialecki, B., G. Fairweather and K. R. Bennett, "Fast Direct Solvers for Piecewise Hermite Bicubic Orthogonal Spline Collocation Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 29, No. 1, pp. 156-173, 1992.
- [13] Bialecki, B. and D. S. Dillery, "Fourier Analysis of Schwarz Alternating Methods for Piecewise Hermite Bicubic Orthogonal Spline Collocation," *BIT*, Vol. 33, No. 4, pp. 634-646, 1993.
- [14] Bialecki, B., "A Fast Domain Decomposition Poisson Solver on a Rectangle for Hermite Bicubic Orthogonal Spline Collocation", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 30, No. 2, pp. 425-434, 1993.
- [15] Bialecki, B. and G. Fairweather, "Matrix Decomposition Algorithms for Separable Elliptic Boundary Value Problems in Two Space Dimensions," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 46, pp. 369-386, 1993.

- [16] Bialecki, B. and R. I. Fernandes, "Orthogonal Spline Collocation Laplace-Modified and Alternating-Direction Methods for Parabolic Problems on Rectangles," *Math. Comp.*, Vol. 60, No. 202, pp. 545-573, 1993.
- [17] Bialecki, B. and X. C. Cai, " H^1 -Norm Error Bounds for Piecewise Hermite Bicubic Orthogonal Spline Collocation Schemes for Elliptic Boundary Value Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 31, No. 4, pp. 1128-1146, 1994.
- [18] Bialecki, B., "Preconditioned Richardson and Minimal Residual Iterative Methods for Piecewise Hermite Bicubic Orthogonal Spline Collocation Equations," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 15, No. 3, pp. 668-680, 1994.
- [19] Bialecki, B. and K. A. Remington, "Fourier Matrix Decomposition Methods for the Least Squares Solution of Singular Neumann and Periodic Hermite Bicubic Collocation Problems," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 16, No. 2, pp. 431-451, 1995.
- [20] Bialecki, B. and G. Fairweather, "Matrix Decomposition Algorithms in Orthogonal Spline Collocation for Separable Elliptic Boundary Value Problems," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 16, No. 2, pp. 330-347, 1995.
- [21] Bialecki, B., "Cyclic Reduction and FACR Methods for Piecewise Hermite Bicubic Orthogonal Spline Collocation," *Numerical Algorithms*, Vol. 8, No. 2-4, pp. 167-184, 1995.
- [22] Bialecki, B. and M. Dryja, "Multilevel Additive and Multiplicative Methods for Orthogonal Spline Collocation Problems," *Numer. Math.*, Vol. 77, No. 1, pp. 35-58, 1997.
- [23] Bialecki, B. and G. Fairweather, "Orthogonal Spline Collocation Methods for Partial Differential Equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 128, pp. 55-82, 2001.
- [24] Botha, J. F. and G. F. Pinder, *Fundamental Concepts in the Numerical Solution of Differential Equations*, John Wiley & Sons, New York, 1983.
- [25] Boyce, W. E. and R. C. DiPrima, *Elementary Differential Equations*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1992.
- [26] Brachtendorf, H. G., G. Welsch, and R. Laur, "A Simulation Tool for the Analysis and Verification of the Steady State of Circuit Designs," *International Journal of Circuit Theory and Applications*, Vol. 23, No. 4, pp. 311-323, 1995.
- [27] Brachtendorf, H. G., G. Welsch, and R. Laur, "Simulation of the Steady State of Circuits Using an Expansion Technique and Krylov Subspace Methods for Solving the Resulting Linear Indefinite Systems," *Systems Analysis Modelling Simulation*, Vol. 18-19, pp. 603-606, 1995.
- [28] Brezinski, C. and M. Redivo-Zaglia, "Look-Ahead in Bi-CGSTAB and Other Product Methods for Linear Systems," *BIT*, Vol. 35, pp. 169-201, 1995.
- [29] Brill, S. H. and G. F. Pinder, "A Parallel Preconditioned Bi-Conjugate Gradient Algorithm for Two-Dimensional Elliptic and Parabolic Equations Using Hermite Collocation," *Proceedings of the Eighth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, 1997.
- [30] Brown, P., A. Hindmarsh, and M. K. Seager, "SLATEC driver routine DSLUGM," *Lawrence Livermore National Laboratory*, 1989.
- [31] Brunner, H., "On the Numerical Solution of Nonlinear Volterra-Fredholm Integral Equations by Collocation Methods", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 27, No. 4, pp. 987-1000, 1990.

- [32] Bucchignani, E. and F. Stella, "A Fully Implicit Parallel Solver for Viscous Flows," Numerical Tests on High Performance Machines, Parallel Computational Fluid Dynamics. Implementations and Results Using Parallel Computers. *Proceedings of the Parallel CFD '95 Conference*, pp. 569-575, 1996.
- [33] Cai, W. and J. Wang, "Adaptive Multiresolution Collocation Methods for Initial Boundary Value Problems of Nonlinear PDEs", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 33, No. 3, pp. 937-970, 1996.
- [34] Cao, Z.-H. "Avoiding Breakdown in Variants of the Bi-CGSTAB Algorithm," *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 263, pp. 113-132, 1997.
- [35] Carey, G.F. and B. A. Finlayson, "Orthogonal Collocation on Finite Elements", *Chem. Engrg. Sci.*, Vol. 30, pp. 587-596, 1975.
- [36] Carlenzoli, C. and P. Gervasio, "Effective Numerical Algorithms for the Solution of Algebraic Systems Arising in Spectral Methods," *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 10, No. 2, pp. 87-113, 1992.
- [37] Celia, M. A., *Collocation on Deformed Finite Elements and Alternating Direction Collocation Methods*, Ph.D. dissertation, Princeton University, 1983.
- [38] Chan, T. F. and T. Szeto, "Composite Step Product Methods for Solving Nonsymmetric Linear Systems," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 17, No. 6, pp. 1491-1508, 1996.
- [39] Chan, T. F., E. Gallopoulos, V. Simoncini, T. Szeto, and C. H. Ting, "A Quasi-Minimal Residual Variant of the Bi-CGSTAB Algorithm for Nonsymmetric Systems." *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 15, No. 2, pp. 338-347, 1994.
- [40] Chen, G. S. and D. Y. Yang, "Comparison of Preconditioned Generalized Conjugate Gradient Methods to Two-Dimensional Neutron and Photon Transport Equation," *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 25, No. 1-3, pp. 97-115, 1998.
- [41] Chin, P. and P. A. Forsyth, "A Comparison of GMRES and CGSTAB Accelerations for Incompressible Navier-Stokes Problems," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 46, pp. 415-426, 1993.
- [42] Christara, C. C., E. N. Houstis, and J. R. Rice, "A Parallel Spline Collocation-Capacitance Method for Elliptic Partial Differential Equations," *Supercomputing. 1988 Conference Proceedings*, pp. 375-384, ACM Press, New York, 1988.
- [43] Chuang, C. C. and C. C. Chieng, "Comparison of Variants of the Bi-Conjugate Gradient Method for Compressible Navier-Stokes Solver with Second-Moment Closure," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 20, No. 3, pp. 233-253, 1995.
- [44] Clift, S. S. and P. A. Forsyth, "Linear and Nonlinear Iterative Methods for the Incompressible Navier-Stokes Equations," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 18, No. 3, pp. 229-256, 1994.
- [45] Concus, P., G. H. Golub, and D. P. O'Leary, "A Generalized Conjugate Gradient Method for the Numerical Solution of Elliptic Partial Differential Equations," *Sparse Matrix Computations*, pp. 309-322, Academic Press, 1976.
- [46] Cooper, K. D. and P. M. Prenter, "Alternating Direction Collocation for Separable Elliptic Partial Differential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 28, No. 3, pp. 711-727, 1991.

- [47] Cooper, K. D., "Domain-Imbedding Alternating Direction Method for Linear Elliptic Equations on Irregular Regions Using Collocation", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 9, No. 1, pp. 93-106, 1993.
- [48] Cooper, K. D., K. M. Arthur, and P. M. Prenter, "Alternating Direction Collocation for Irregular Regions", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 12, pp. 147-159, 1996.
- [49] Cottle, R. W., "Manifestations of the Schur Complement," *Linear Algebra and its Applications*, Vol. 8, pp. 189-211, 1974.
- [50] Curran, M. C. and Myron B. Allen, "Domain-Decomposition Approach to Local Grid Refinement in Finite Element Collocation", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 8, pp. 341-355, 1992.
- [51] Curran, M. C., "An Iterative Finite-Element Collocation Method for Parabolic Problems using Domain Decomposition", *Contemporary Mathematics*, Vol. 157, pp. 245-253, 1994.
- [52] Dahl, O. and S. O. Wille, "An ILU Preconditioner with Coupled Node Fill-In for Iterative Solution of the Mixed Finite Element Formulation of the 2D and 3D Navier-Stokes Equations," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 15, No. 5, pp. 525-544, 1992.
- [53] deBoor, C. and B. Swartz, "Collocation at the Gaussian Points," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 10, No. 4, pp. 582-606, 1973.
- [54] deBoor, C., *A Practical Guide to Splines*, Springer-Verlag, New York, 1978.
- [55] de Hoog, F. R. and R. Weiss, "Collocation Methods for Singular Boundary Value Problems," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 15, No. 1, pp. 198-217, 1978.
- [56] Diaz, J. C., "A Collocation-Galerkin Method for the Two Point Boundary Value Problem using Continuous Piecewise Polynomial Spaces", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 14, No. 5, pp. 844-858, 1977.
- [57] Diaz, J. C. and K. Sheno, "Domain Decomposition and Schur Complement Approaches to Coupling the Well Equations in Reservoir Simulation," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 16, No. 1, pp. 29-39, 1995.
- [58] Dijkstra, H. A., M. J. Molemaker, A. Van Der Ploeg, and E. F. F. Botha, "An Efficient Code to Compute Non-Parallel Steady Flows and Their Linear Stability," *Computers and Fluids*, Vol. 24, No. 4, pp. 415-434, 1995.
- [59] Doi, S. and A. Hoshi, "Large-Numbered Multicolor, MILU Preconditioning on SX-3/14," *International Journal of Computer Mathematics*, Vol. 44, No. 1-4, pp. 143-152, 1992.
- [60] Doucette, R. L., A Collocation Method for Numerical Solution of Laplace's Equation with Nonlinear Boundary Conditions on a Polygon, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 30, No. 3, pp. 717-732, 1993.
- [61] Douglas, J., Jr. and T. Dupont, "A Finite Element Collocation Method for Quasilinear Parabolic Equations", *Math. of Comp.*, Vol. 27, No. 121, pp. 17-28, 1973.
- [62] Dunn, R. J. and M. F. "Wheeler, Some Collocation-Galerkin Methods for Two-Point Boundary Value Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 13, No. 5, pp. 720-733, 1976.
- [63] Dyksen, W. R., E. N. Houstis, R. E. Lynch, and J. R. Rice, "The Performance of the Collocation and Galerkin Methods with Hermite Bi-Cubics," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 21, No. 4, pp. 695-715, 1984.

- [64] Dyksen, W. R. and J. R. Rice, "The Importance of Scaling for the Hermite Bicubic Collocation Equations," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, No. 3, pp. 707-719, 1986.
- [65] Fairweather, G., "On Solving Almost Block Diagonal Linear Systems Arising in Two-Point Boundary Value Problems," *IX Congreso Educaciones Diferenciales y Aplicaciones*, pp. 1-22, 1986.
- [66] Fairweather, G., "Spline Collocation Methods for a Class of Hyperbolic Partial Integro-Differential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 31, No. 2, pp. 444-460, 1994.
- [67] Fernandes, R. I. and G. Fairweather, "Analysis of Alternating Direction Collocation Methods for Parabolic and Hyperbolic Problems in Two Space Variables," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 9, pp. 191-211, 1993.
- [68] Fernandes, R. I., "Efficient Orthogonal Spline Collocation Methods for Solving Linear Second Order Hyperbolic Problems on Rectangles," *Numer. Math.*, Vol. 77, No. 2, pp. 223-241, 1997.
- [69] Fletcher, R., "Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems," *Lecture Notes in Mathematics 506. Numerical Analysis. Dundee 1975.* pp. 73-89, Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- [70] Forsyth, P. A. and H. Jiang, "Nonlinear Iteration Methods for the High Speed Laminar Compressible Navier Stokes Equations," *Computers & Fluids*, Vol. 26, No. 3, pp. 249-268, 1997.
- [71] Freeze, R. A. and J. A. Cherry, *Groundwater*, Prentice Hall, 1979.
- [72] Frind, E. O. and G. F. Pinder, "A Collocation Finite Element Method for Potential Problems in Irregular Domains," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 14, pp. 681-701, 1979.
- [73] Funaro, D., "A New Scheme for the Approximation of Advection-Diffusion Equations by Collocation," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol.30, No. 6, pp. 1664-1676, 1993.
- [74] Gohberg, I., P. Lancaster, and L. Rodman, *Matrix Polynomials*, Academic Press, 1982.
- [75] Golik, W. L. and J. A. Kolodziej, "An Adaptive Boundary Collocation Method for Linear PDEs", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 11, pp. 555-560, 1995.
- [76] Golub, G. H. and C. F. van Loan, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, 1996.
- [77] Guarnaccia, J. F., P. T. Imhoff, B. C. Missildine, M. Oostrom, M. A. Celia, J. H. Dane, P. R. Jaffe, and G. F. Pinder, "Multiphase Chemical Transport in Porous Media", EPA/600/S-92/002, U.S. E.P.A. 1992.
- [78] Guarnaccia, J. F. and G. F. Pinder, "A Collocation Based Parallel Algorithm to Solve Immiscible Two Phase Flow in Porous Media," *Proceedings of the Fifth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, pp. 205-210, 1992.
- [79] Guarnaccia, J. F. and G. F. Pinder, "A New Two-Phase Flow and Transport Model with Interphase Mass Exchange," *Computational Methods in Water Resources IX. Vol. 2: Numerical Methods in Water Resources. Proceedings of the 9th Conference on Computational Methods in Water Resources*, pp. 281-288, 1992.
- [80] Guarnaccia, J. F. and G. F. Pinder, "Domain-Decomposition-Collocation Algorithm for Solution of the Multiphase Flow Equations," *Basel World CFD User Days 1994. Second World Conference in Applied Computational Dynamics. Proceedings of the*

- Ninth Annual Conference of the International Hightech-Forum*, pp. 20-26, Basel, Switzerland, 1994.
- [81] Guarnaccia, J. F. and G. F. Pinder, "Simulation of Dense Non-Aqueous Phase Fluid Flow in Porous Media Using Collocation Finite Elements," *The Mathematics of Finite Elements and Applications*, John Wiley & Sons, Ltd., pp. 243-253, 1994.
- [82] Guarnaccia, J. F., G. F. Pinder, and M. Fishman, NAPL: Simulator Documentation, EPA/600/R-97/102, U.S. E.P.A., 1997.
- [83] Guarnaccia, J., I. Herrera, and G. Pinder, "Solution of Flow and Transport Problems Using a Collocation Discretization of a Domain Decomposition Algorithm," *Computational Methods in Water Resources X*, Vol. 1, pp. 265-272, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1994.
- [84] Gutknecht, M. H., "Variants of BiCGSTAB for Matrices with Complex Spectrum," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 14, No. 5, pp. 1020-1033, 1993.
- [85] Guymon, G. L., "A Finite Element Solution of the One-Dimensional Diffusion-Convection Equation," *Water Resources Research*, Vol. 6, No. 1, pp. 204-210, 1970.
- [86] Guymon, G. L., V. H. Scott, and L. R. Herrmann, "A General Numerical Solution of the Two-Dimensional Diffusion-Convection Equation by the Finite Element Method," *Water Resources Research*, Vol. 6, No. 6, pp. 1611-1617, 1970.
- [87] Guymon, G. L., "Note on the Finite Element Solution of the Diffusion-Convection Equation," *Water Resources Research*, Vol. 8, No. 5, pp. 1357-1360, 1972.
- [88] Hadjidimos, A., E. N. Houstis, J. R. Rice, and E. A. Vavalis, "Iterative Line Cubic Spline Collocation Methods for Elliptic Partial Differential Equations in Several Dimensions," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 14, No. 3, pp. 715-734, 1993.
- [89] Hangelbroek, R. J., H. G. Kaper, and G. K. Leaf, "Collocation Methods for Integro-Differential Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 14, No. 3, pp. 377-390, 1977
- [90] Hayes, L., G. Pinder and M. Celia, "Alternating-Direction Collocation for Rectangular Regions", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, North Holl. 27, pp. 265-277, 1981.
- [91] Herrera, I., J. Guarnaccia, and G. F. Pinder, "Domain Decomposition Method for Collocation Procedures," *Computational Methods in Water Resources X*, Vol. 1, pp. 273-280, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1994.
- [92] Hestenes, M. R. and E. Stiefel. "Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems," *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, Vol. 49, No. 6, pp. 409-436, 1952.
- [93] Houstis, E. N. and M. Vavalis, "Spline-Collocation Methods for Elliptic Partial Differential Equations," *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations*, Vol. V., pp. 191-194, IMACS, 1984.
- [94] Houstis, E. N., W. F. Mitchell, and J. R. Rice. "Collocation Software for Second-Order Elliptic Partial Differential Equations," *ACM Trans. Math. Software*, Vol. 11, No. 4, pp. 379-412, 1985.
- [95] Houstis, E. N., M. Vavalis, and J. R. Rice, "Convergence of $O(h^4)$ Cubic Spline Collocation Methods for Elliptic Partial Differential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 25, No. 1, pp. 54-74, 1988.
- [96] Hriberšek, M., P. Škerget, and H. Mang, "Preconditioned Conjugate Gradient Methods for Boundary-Domain Integral Method," *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 12, No. 2, pp. 111-118, 1993.

- [97] Huyakorn, P. S. and G. F. Pinder, *Computational Methods in Subsurface Flow*, Academic Press, 1983.
- [98] Jiang, H. and P. A. Forsyth, "Robust Linear and Nonlinear Strategies for Solution of the Transonic Euler Equations," *Computers and Fluids*, Vol. 24, No. 7, pp. 753-770, 1995.
- [99] Johnson, L. W., R. D. Riess, and J. T. Arnold, *Introduction to Linear Algebra*, Addison-Wesley, 1993.
- [100] Joo, H. G. and T. J. Downar, "Comparison of Iterative Methods for the Solution of the CMFD Problem in the Nonlinear Nodal Method," *Transactions of the American Nuclear Society*, Vol. 73, pp. 434-436, 1995.
- [101] Kanschat, G., "Parallel Adaptive Algorithms for Radiative Transfer Problems," *Parallel Programming and Applications. Proceedings of the Workshop on Parallel Programming and Computation and the 4th Nordic Transputer Conference*, pp. 238-243, 1995.
- [102] Kim, S. D. and S. V. Parter, "Preconditioning Chebyshev Spectral Collocation by Finite-Difference Operators", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 34, No. 3, pp. 939-958, 1997.
- [103] Kim, S. D. and S. V. Parter, "Preconditioning Chebyshev Spectral Collocation Method for Elliptic Partial Differential Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 33, No. 6, pp. 2268-2400, 1996.
- [104] Kulkarni, A. Y., M. A. Pai, and P. W. Sauer, "Power System Dynamic Response Calculations Using Krylov Subspace Based Methods," *Proceedings of the Twelfth Power Systems Computation Conference*, pp. 207-213, 1996.
- [105] Kumar, V., A. Grama, A. Gupta, and G. Karypis, *Introduction to Parallel Computing*, Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Redwood City, California, 1994.
- [106] Kurreck, M. and S. Wittig, "A Comparative Study of Pressure Correction and Block-Implicit Finite Volume Algorithms on Parallel Computers," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 24, No. 11, pp. 1111-1128, 1997.
- [107] Lai, Y.-L., A. Hadjidimos, E. N. Houstis, and J. R. Rice, "General Interior Hermite Collocation Methods for Second-Order Elliptic Partial Differential Equations," *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 16, pp. 183-200, 1994.
- [108] Lai, Y.-L., A. Hadjidimos, E. N. Houstis, and J. R. Rice, "On the Iterative Solution of Hermite Collocation Equations," *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 16, No. 1, pp. 254-277, 1995. (also Technical Report CSD-TR-92-094, Purdue University, 1992)
- [109] Lai, Y.-L., A. Hadjidimos, and E. N. Houstis, "A Generalized Schwarz Splitting Method Based on Hermite Collocation for Elliptic Boundary Value Problems," *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 21, pp. 265-290, 1996.
- [110] Laible, J. P. and G. F. Pinder, Least Squares Collocation Solution of Differential Equations on Irregularly Shaped Domains Using Orthogonal Meshes, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 5, No. 3, pp. 347-361, 1989.
- [111] Lanczos, C., "Trigonometric Interpolation of Empirical and Analytical Functions," *J. of Math. And Phys.*, Vol. 17, No. 3, pp. 123-199, 1938.
- [112] Lapidus, L. and G. F. Pinder, *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1982.
- [113] Laubin, P. and M. Baiwir, "Spline Collocation For a Boundary Integral Equation on Polygons with Cuts", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 35, No. 4, pp. 1452-1472, 1998.

- [114] Lenhard, R. J., M. Oostrom, C. S. Simmons, and M. D. White, "Investigation of Density- Dependent Gas Advection of Trichloroethylene: Experiment and a Model Validation Exercise," *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 19, pp. 47-67, 1995.
- [115] Li, B., G. Fairweather and B. Bialecki, "Discrete-Time Orthogonal Spline Collocation Methods for Schrödinger Equations in Two Space Variables", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 35, No. 2, pp. 453-477, 1998.
- [116] Lin, S. H., "Non-Linear Diffusion and Adsorption in Heterogeneous Systems by the Orthogonal Collocation Method," *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, Vol. 88, No. 11, pp. 1573-1576, 1992.
- [117] Majaess, F., P. Keast, G. Fairweather, and K. R. Bennett, "Algorithm 704: ABDPACK and ABBPACK --- FORTRAN Programs for the Solution of Almost Block Diagonal Linear Systems Arising in Spline Collocation at Gaussian Points with Monomial Basis Functions," *ACM Transaction on Mathematical Software*, Vol. 8, No. 2, pp. 205-210, 1992.
- [118] Majaess, F., P. Keast, G. Fairweather, and K. R. Bennett, "The Solution of Almost Block Diagonal Linear Systems Arising in Spline Collocation at Gaussian Points with Monomial Basis Functions," *ACM Transaction on Mathematical Software*, Vol. 8, No. 2, pp. 193-204, 1992.
- [119] McCarthy Ch. A., Fourth Order Accuracy for Cubic Spline Collocation Method, (INTERNET), Sep. 1992.
- [120] Mohsen, M. F. N. and G. F. Pinder, "Orthogonal Collocation with 'Adaptive' Finite Elements," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, pp. 1901-1910, 1984.
- [121] Montero, G. and A. Suarez, "Left-Right Preconditioning Versions of BCG-Like Methods," *Neural, Parallel & Scientific Computations*, Vol. 3, No. 4, pp. 487-502, 1995.
- [122] Morrison, J. C., C. Baunach, L. Larson, B. Bialecki, and G. Fairweather, "Spline Collocation Calculation for H_2^+ ," *Journal of Physics B (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, Vol. 29, No. 12, pp. 2375-2391, 1996.
- [123] Mu, M. and J. R. Rice, "An Experimental Performance Analysis for the Rate of Convergence of Collocation on General Domains," *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 5, pp. 45-52, 1989.
- [124] Muramatsu, K., S. Doi, T. Washio, and T. Nakata, "Cenju-3 Parallel Computer and its Application to CFD," *Proceedings of the 1994 International Symposium on Parallel Architectures, Algorithms and Networks*, pp. 318-325, 1994.
- [125] Muramatsu, K., S. Doi, T. Washio, and T. Nakata, "Implementing a CFD Solver on a Cenju-3 Parallel Computer," *Parallel Computation Fluid Dynamics. New Algorithms and Applications. Proceedings of the Parallel CFD '94 Conference*, pp. 63-72, 1995.
- [126] Murtaugh, B. A. and M. A. Saunders, MINOS 5.1 User's Guide, Technical Report SOL 83-20R, Stanford University, 1987.
- [127] Papatheodorou, T. S., "Block AOR Iteration for Nonsymmetric Matrices," *Mathematics of Computation*, Vol. 41, No. 164, pp. 511-525, 1983.
- [128] Parter, S. V. and E. E. Rothman, "Preconditioning Legendre Spectral Collocation Approximations to Elliptic Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 32, No. 2, pp. 333-385, 1995.

- [129] Pena, T. F., J. D. Bruguera, and E. L. Zapata, "Finite Element Resolution of the 3D Stationary Semiconductor Device Equations on Multiprocessors," *Integrated Computer-Aided Engineering*, Vol. 4, No. 1, pp. 66-77, 1997.
- [130] Percell, P. and M. F. Wheeler, "A C^1 Finite Element Collocation Method for Elliptic Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 17, No. 5, pp. 605-619, 1980.
- [131] Peters, A., "Non-Symmetric CG-Like Schemes and the Finite Element Solution of the Advection-Dispersion Equation," *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, Vol. 17, No. 11, pp. 955-974, 1993.
- [132] Piccirilli D. Th., *Using the Collocation Method with Splines under Tension and Upstream Weighting to Solve the One Dimensional Convection-Diffusion Equation*, Thesis for Degree of Master of Science Specializing in Mathematics, University of Vermont, Oct. 1994.
- [133] Pinder, G. F. and W. G. Gray, *Finite Element Simulation is Surface and Subsurface Hydrology*, Academic Press, Inc., New York, 1977.
- [134] Prenter, P. M. and R. D. Russell, "Orthogonal Collocation for Elliptic Partial Differential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 13, No. 6, pp. 923-939, 1976.
- [135] Prenter, P. M., *Splines and Variational Methods*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1975.
- [136] Quarteroni, A. and E. Zangari, "Finite Element Preconditioning for Legendre Spectral Collocation Approximations to Elliptic Equations and Systems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 29, No. 4, pp. 917-936, 1992.
- [137] Reid, J. K., "On the Method of Conjugate Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations," *Large Sparse Sets of Linear Equations*, pp. 231-254, Academic Press, New York, 1971.
- [138] Reid, J. K., "The Use of Conjugate Gradients for Systems of Linear Equations Possessing Property A," *SIAM J. Num Anal.*, Vol. 9, pp. 325-332, 1972.
- [139] Reiter, J., "A Biplicit Spectral-Collocation-Type Ansatz for the Numerical Integration of Partial Differential Equations with the Transversal Methods of Lines", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 11, pp. 625-635, 1995.
- [140] Robinson, M. P. and G. Fairweather, "Orthogonal Cubic Spline Collocation Solution of Underwater Acoustic Wave Propagation Problems," *Journal of Computational Acoustics*, Vol. 1, No. 3, pp. 355-370, 1993.
- [141] Robinson, M. P. and G. Fairweather, "Orthogonal Cubic Spline Collocation Methods for Schrödinger-Type Equations in One Space Variable," *Numer. Math.*, Vol. 68, pp. 355-376, 1994.
- [142] Russell, R. R. and W. Sun, "Spline Collocation Differentiation Matrices", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 34, No. 6, pp. 2274-2287, 1997.
- [143] Russell R. D. and L. F. Shampine, "A Collocation Method for Boundary Value Problems", *Numer. Math.*, Vol. 19, pp. 1-28, 1972.
- [144] Saad, Y. and M. H. Schultz, Parallel Implementation of Preconditioned Conjugate Gradient Methods, Research Report YALEU/DCS/RR-425, Yale University, 1985.
- [145] Saad, Y. and M. H. Schultz, "GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, No. 3, pp. 856-869, 1986.
- [146] Saranen, J. and G. Vainikko, Trigonometric Collocation Methods with Product Integration for Boundary Integral Equations on Closed Curves. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 33, No. 4, pp. 1577-1596, 1996.

- [147] Scarbnick, C. D., M. C. Chang, M. H. Schultz, A. B. Sherman. "A Parallel Software Package for Solving Linear Systems," *Fourth Symposium on the Frontiers of Massively Parallel Computation*, pp. 397-401, 1992.
- [148] Schmid, W., M. Paffrath, and R. H. W. Hoppe, "Application of Iterative Methods for Solving Nonsymmetric Linear Systems in the Simulation of Semiconductor Processing," *Surveys on Mathematics for Industry*, Vol. 5, No. 1, pp. 1-26, 1995.
- [149] Shadid, J. N. and R. S. Tuminaro. "A Comparison of Preconditioned Nonsymmetric Krylov Methods on a Large-Scale MIMD Machine," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 15, No. 2, pp. 440-459, 1994.
- [150] Shapiro, A. and G. F. Pinder, "Analysis of an Upstream Weighted Collocation Approximation to the Transport Equation", *J. Comp. Phys.*, Vol. 39, pp. 46-71, 1981.
- [151] Sincovec, R. F., "On The Relative Efficiency of Higher Order Collocation Methods for Solving Two-Point Boundary Value Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 14, No. 1, pp. 112-123, 1977.
- [152] Slater, J. C., "Electronic Energy Bands in Metals," *Phys. Rev.*, Vol. 45, pp. 794-801, 1934.
- [153] Sleijpen, G. L. G. and D. R. Fokkema, "BiCGstab(ℓ) for Linear Equations Involving Unsymmetric Matrices With Complex Spectrum," *Electron. Trans. Numer. Anal.*, Vol. 1, pp. 11-32, 1993.
- [154] Sleijpen, G. L. G., H. A. van der Vorst, and D. R. Fokkema. "Bi-CGSTAB(ℓ) and Other Hybrid Bi-CG Methods," *Numerical Algorithms*. Vol. 7. No. 1, pp. 75-109, 1994.
- [155] Sleijpen, G. L. G. and H. A. van der Vorst, "An Overview of Approaches for the Stable Computation of Hybrid BiCG Methods," *Applied Numerical Mathematics*, Vol. 19, No. 3, pp. 235-254, 1995.
- [156] Sleijpen, G. L. G. and H. A. van der Vorst, "Reliable Updated Residuals in Hybrid Bi-CG Methods." *Computing*, Vol. 56, No. 2, pp. 141-163, 1996.
- [157] Soliman, M. A., "A Spline Collocation Method for the Solution of Diffusion-Convection Problems with Chemical Reactions," *Chemical Engineering Science*, Vol. 47, No. 15/16, pp. 4209-4213, 1992.
- [158] Sonneveld, P., "CGS: a Fast Lanczos-type Solver for Nonsymmetric Linear Systems," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 10, pp. 36-52, 1989.
- [159] Stella, F. and E. Bucchignani, "True Transient Vorticity-Velocity Method Using Preconditioned Bi-CGSTAB," *Numerical Heat Transfer, Part B (Fundamentals)*, Vol. 30, No. 3, pp. 315-339, 1996.
- [160] Sun, W., "Block Iterative Algorithms for Solving Hermite Bicubic Collocation Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 33, No. 2, pp. 589-601, 1996.
- [161] Sun, W., W. Huang, and R. D. Russell, "Finite Difference Preconditioning for Solving Orthogonal Collocation Equations for Boundary Value Problems," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 33, No. 6, pp. 2268-2285, 1996.
- [162] van Blerk, J. J. and J. F. Botha. "Numerical Solution of Partial Differential Equations on Curved Domains by Collocation". *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 9, pp. 357-371, 1993.
- [163] van der Vorst, H. A., "Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 13, No. 2, pp. 631-644, 1992.

- [164] van der Vorst, H. A., "Parallel Iterative Solution Methods for Linear Systems Arising from Discretized PDEs," *Special Course on Parallel Computing in CFD*, pp. 1-39, Neuilly sur Seine, France, 1995.
- [165] van der Vorst, H. A., "Iterative Methods for Unsymmetric Linear Systems," SOFSEM '96: Theory and Practice on Informatics. 23rd Seminar on Current Trends in Theory and Practice on Informatics, pp. 217-234. Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [166] van der Vorst, H. A., "Parallelism in CG-Like Methods," *Parallel Computing: State-of-the-Art and Perspectives*, pp. 3-19, 1996.
- [167] Van Geel, P. J. and J. F. Sykes, "Laboratory and Model Simulations of a LNAPL Spill in a Variably-Saturated Sand Medium: 1. Laboratory Experiment and Image Analysis Techniques," *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 17, No. 1, pp. 1-26, 1995.
- [168] Van Geel, P. J. and J. F. Sykes, "Laboratory and Model Simulations of a LNAPL Spill in a Variably-Saturated Sand Medium: 2. Comparison of Laboratory and Model Results," *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 17, No. 1, pp. 27-53, 1995.
- [169] Villadsen, J. V. and W. E. Stewart, "Solution of Boundary Value Problems by Orthogonal Collocation," *Chem. Engr. Sci.*, Vol. 22, pp. 1843-1501, 1967.
- [170] Vulk, C., "Further Experiences with GMRESR," *Supercomputer*, Vol. 10, No. 3, pp. 13-27, 1993.
- [171] Watkins, D. S., *Fundamentals of Matrix Computations*, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1991.
- [172] Wheeler, M. F., "A C^0 -Collocation-Finite Element Method for the Two-Point Boundary Value Problems and One Space Dimensional Parabolic Problems", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 14, No. 1, pp. 71-90, 1977.
- [173] Wheeler, M. F., "An Elliptic Collocation-Finite Element Method with Interior Penalties", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 15, No. 1, pp. 152-161, 1978.
- [174] Wilkinson, J. H., *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, 1965.
- [175] Wille, S. O., "A Local Predictive Convection-Diffusion Refinement Indicator for the Tri-Tree Adapted Finite Element Multigrid Algorithm of the Navier-Stokes Equations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 134, No. 1-2, pp. 181-196, 1996.
- [176] Wille, S. O., "A Tri-Tree Multigrid Recoarsement Algorithm for the Finite Element Formulation of the Navier-Stokes Equations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 135, No. 1-2, pp. 129-142, 1996.
- [177] Wille, S. O., "A Non-Linear Adaptive Full Tri-Tree Multigrid Method for the Mixed Finite Element Formulation of the Navier-Stokes Equations," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 24, No. 10, pp. 1037-1047, 1997.
- [178] Wille, S. O., "The Three-Dimensional Prolonged Adaptive Unstructured Finite Element Multigrid Method for the Navier-Stokes Equations," *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 25, No. 14, pp. 371-392, 1997.
- [179] Wittenbrink, K. A., "High Order Projection Methods of Moment -and Collocation-Type for Nonlinear Boundary Value Problems", *Computing*, Vol. 11, pp. 255-274, 1973.
- [180] Yan, Y. and G. Fairweather, "Orthogonal Spline Collocation Methods for Some Partial Integrodifferential Equations," *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 29, No. 3, pp. 755-768, 1992.

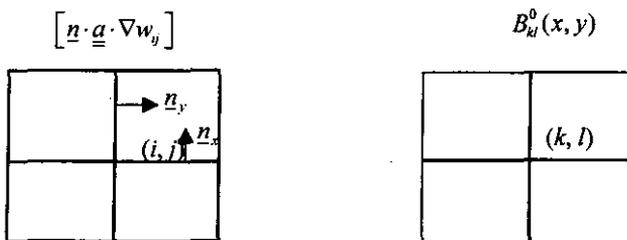
- [181] Zampieri, E., "A Multidomain Spectral Collocation Solver for the Elasticity Problem", University of Minnesota Supercomputer Institute Research Report UMSI 91/180, 1991.
- [182] Zhang, S.-L., "GPBi-CG: Generalized Product-Type Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems," *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 18, No. 2, pp. 537-551, 1997.
- [183] Zlatev, Z. and J. Wasniewski, "PARASPAR: Parallel Solvers for Sparse Linear Algebraic Systems," *Parallel Scientific Computing. First International Workshop, PARA '94. Proceedings*, pp. 547-556, 1994.

ANEXO A: Cálculo de la Matriz y Término Derecho en Colocación TH

A.1 Casos para los coeficientes de la matriz

Sin pérdida de generalidad consideraremos el caso de las funciones de peso lineales, es decir, en lo sucesivo tomaremos $w_y = w_{ij}^0$.

$$M_{ijkl} = - \int_{\Sigma} B_{kl}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}] d\underline{x}; \tag{A.1}$$



En líneas gruesas donde la función $[\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}]$ es desigual de cero en Σ

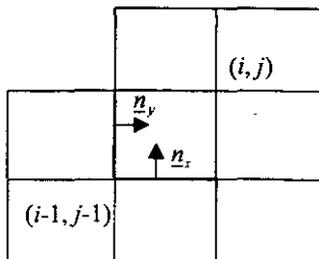
En líneas gruesas donde la función $B_{kl}^0(x, y)$ es desigual de cero en Σ

$$n_x = (0, 1), n_y = (1, 0)$$

$$\begin{aligned} \underline{n}_x \cdot \underline{a} \cdot \nabla w &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial w / \partial x \\ \partial w / \partial y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} \partial w / \partial x + a_{12} \partial w / \partial y \\ a_{21} \partial w / \partial x + a_{22} \partial w / \partial y \end{pmatrix} \\ &= a_{21} \partial w / \partial x + a_{22} \partial w / \partial y \end{aligned} \tag{A.2}$$

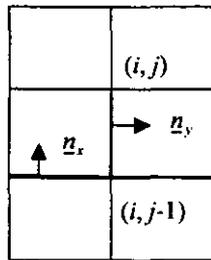
$$\begin{aligned} \underline{n}_y \cdot \underline{a} \cdot \nabla w &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial w / \partial x \\ \partial w / \partial y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} \partial w / \partial x + a_{12} \partial w / \partial y \\ a_{21} \partial w / \partial x + a_{22} \partial w / \partial y \end{pmatrix} \\ &= a_{11} \partial w / \partial x + a_{12} \partial w / \partial y \end{aligned} \tag{A.3}$$

Caso 1:



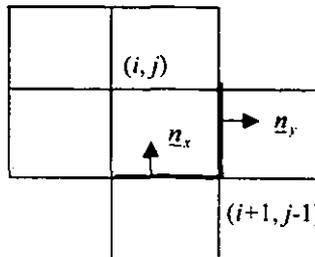
$$\begin{aligned}
 M_{y,j-1,j-1} &= - \int_{\Sigma} B_{i-1,j-1}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_{j-1}}^{x_j} B_{i-1,j-1}^0(x, y_{j-1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j-1}} + a_{22}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j-1}} \right\} dx \quad (A.4) \\
 &\quad - \int_{y_{j-1}}^{y_j} B_{i-1,j-1}^0(x_{i-1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_{i-1}} + a_{12}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_{i-1}} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 2:



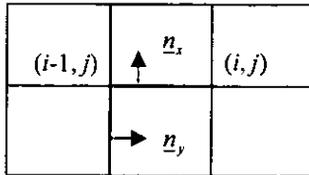
$$\begin{aligned}
 M_{y,j,j-1} &= - \int_{\Sigma} B_{y-1}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_{j-1}}^{x_j} B_{y-1}^0(x, y_{j-1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j-1}} + a_{22}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j-1}} \right\} dx \\
 &\quad - \int_{x_i}^{x_{i+1}} B_{y-1}^0(x, y_{j-1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j-1}} + a_{22}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j-1}} \right\} dx \quad (A.5) \\
 &\quad - \int_{y_{j-1}}^{y_j} B_{y-1}^0(x_i, y) \left\{ a_{11}(x_i, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_i} + a_{12}(x_i, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_i} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 3:



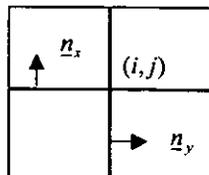
$$\begin{aligned}
 M_{y,i+1,j-1} &= - \int_{\Sigma} B_{i+1,j-1}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_i}^{x_{i+1}} B_{i+1,j-1}^0(x, y_{j-1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j-1}} + a_{22}(x, y_{j-1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j-1}} \right\} dx \quad (A.6) \\
 &\quad - \int_{y_{j-1}}^{y_j} B_{i+1,j-1}^0(x_{i+1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i+1}, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_{i+1}} + a_{12}(x_{i+1}, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_{i+1}} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 4:



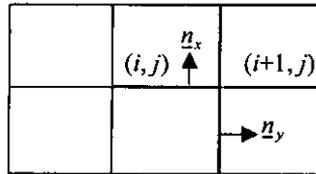
$$\begin{aligned}
 M_{y,i-1,j} &= - \int_{\Sigma} B_{i-1,j}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_{i-1}}^{x_i} B_{i-1,j}^0(x, y_j) \left\{ a_{21}(x, y_j) [\partial w_y / \partial x]_{y_j} + a_{22}(x, y_j) [\partial w_y / \partial y]_{y_j} \right\} dx \\
 &\quad - \int_{y_{j-1}}^{y_j} B_{i-1,j}^0(x_{i-1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_{i-1}} + a_{12}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_{i-1}} \right\} dy \quad (A.7) \\
 &\quad - \int_{y_j}^{y_{j+1}} B_{i-1,j}^0(x_{i-1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_{i-1}} + a_{12}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_{i-1}} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 5:



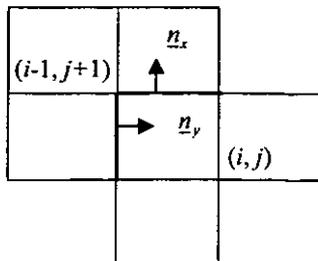
$$\begin{aligned}
 M_{y,y} &= - \int_{\Sigma} B_{ij}^0 \left[\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij} \right] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_{i-1}}^{x_i} B_{ij}^0(x, y_j) \left\{ a_{21}(x, y_j) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{y_j} + a_{22}(x, y_j) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{y_j} \right\} dx \\
 &\quad - \int_{x_i}^{x_{i+1}} B_{ij}^0(x, y_j) \left\{ a_{21}(x, y_j) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{y_j} + a_{22}(x, y_j) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{y_j} \right\} dx \quad (A.8) \\
 &\quad - \int_{y_{j-1}}^{y_j} B_{ij}^0(x_i, y) \left\{ a_{11}(x_i, y) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{x_i} + a_{12}(x_i, y) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{x_i} \right\} dy \\
 &\quad - \int_{y_j}^{y_{j+1}} B_{ij}^0(x_i, y) \left\{ a_{11}(x_i, y) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{x_i} + a_{12}(x_i, y) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{x_i} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 6:



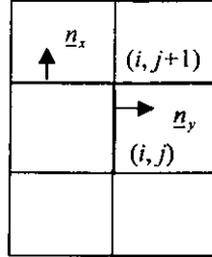
$$\begin{aligned}
 M_{y,i+1j} &= - \int_{\Sigma} B_{i+1j}^0 \left[\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij} \right] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_i}^{x_{i+1}} B_{i+1j}^0(x, y_j) \left\{ a_{21}(x, y_j) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{y_j} + a_{22}(x, y_j) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{y_j} \right\} dx \\
 &\quad - \int_{y_{j-1}}^{y_j} B_{i+1j}^0(x_{i+1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i+1}, y) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{x_{i+1}} + a_{12}(x_{i+1}, y) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{x_{i+1}} \right\} dy \quad (A.9) \\
 &\quad - \int_{y_j}^{y_{j+1}} B_{i+1j}^0(x_{i+1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i+1}, y) \left[\partial w_{ij} / \partial x \right]_{x_{i+1}} + a_{12}(x_{i+1}, y) \left[\partial w_{ij} / \partial y \right]_{x_{i+1}} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 7:



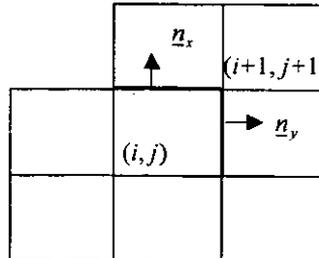
$$\begin{aligned}
 M_{i,j-1,j+1} &= - \int_{\Sigma} B_{i-1,j+1}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\bar{x} \\
 &= - \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} B_{i-1,j+1}^0(x, y_{j+1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j+1}} + a_{22}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j+1}} \right\} dx \quad (A.10) \\
 &\quad - \int_y^{y_{j+1}} B_{i-1,j+1}^0(x_{i-1}, y) \left\{ a_{11}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_{i-1}} + a_{12}(x_{i-1}, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_{i-1}} \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 8:



$$\begin{aligned}
 M_{j,j+1} &= - \int_{\Sigma} B_{j+1}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\bar{x} \\
 &= - \int_{x_{j-1}}^{x_j} B_{j+1}^0(x, y_{j+1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j+1}} + a_{22}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j+1}} \right\} dx \\
 &\quad - \int_x^{x_{j+1}} B_{j+1}^0(x, y_{j+1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j+1}} + a_{22}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j+1}} \right\} dx \quad (A.11) \\
 &\quad - \int_y^{y_{j+1}} B_{j+1}^0(x, y) \left\{ a_{11}(x, y) [\partial w_y / \partial x]_x + a_{12}(x, y) [\partial w_y / \partial y]_x \right\} dy
 \end{aligned}$$

Caso 9:

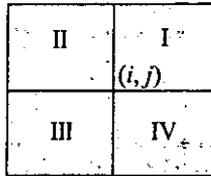


$$\begin{aligned}
 M_{y_{j+1}, j+1} &= - \int_{\Sigma} B_{i+1, j+1}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} \\
 &= - \int_{x_j}^{x_{j+1}} B_{i+1, j+1}^0(x, y_{j+1}) \left\{ a_{21}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial x]_{y_{j+1}} + a_{22}(x, y_{j+1}) [\partial w_y / \partial y]_{y_{j+1}} \right\} dx \quad (A.12) \\
 &\quad - \int_{y_j}^{y_{j+1}} B_{i+1, j+1}^0(x_{j+1}, y) \left\{ a_{11}(x_{j+1}, y) [\partial w_y / \partial x]_{x_{j+1}} + a_{12}(x_{j+1}, y) [\partial w_y / \partial y]_{x_{j+1}} \right\} dy
 \end{aligned}$$

A.2 Casos para el Término Derecho

$$\begin{aligned}
 F_u = & \int_{\Omega} w_y f_{\Omega} d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} u_{\partial} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\mathbf{x} + \sum_{(r,s) \in \eta_c} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\mathbf{x} \\
 & + \int_{\Sigma} j_{\Sigma}^0 (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y + b_n w_y) d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} w_y j_{\Sigma}^1 d\mathbf{x} + \sum_{(k,j) \in \eta_c} \frac{\sigma}{2} [u_{\Sigma}]_k \int_{\Sigma} B_{kj}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y^u] d\mathbf{x}; \quad (A.13) \\
 & i = 1, \dots, E_x - 1, j = 1, \dots, E_y - 1
 \end{aligned}$$

A.2.1 Cálculo de la integral $F_y^1 = \int_{\Omega} w_y f_{\Omega} d\mathbf{x}$



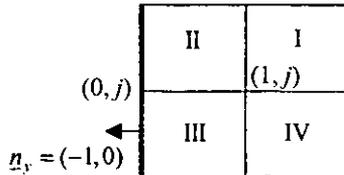
$$\begin{aligned}
 F_y^1 = & \int_{\Omega} w_y f_{\Omega} d\mathbf{x} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_j}^{y_{j+1}} w_y^I(x, y) f_{\Omega}(x, y) dx dy + \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{y_j}^{y_{j+1}} w_y^{II}(x, y) f_{\Omega}(x, y) dx dy \\
 & + \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{y_{j-1}}^{y_j} w_y^{III}(x, y) f_{\Omega}(x, y) dx dy + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{y_{j-1}}^{y_j} w_y^{IV}(x, y) f_{\Omega}(x, y) dx dy
 \end{aligned} \quad (A.14)$$

A.2.2 Cálculo de la integral $F_y^2 = \int_{\partial\Omega} u_{\partial} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\mathbf{x}$

1. Nodo interior

$$\int_{\partial\Omega} u_{\partial} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\mathbf{x} = 0; \quad i = 2, \dots, E_x - 2; j = 2, \dots, E_y - 2 \quad (A.15)$$

2. Frontera izquierda

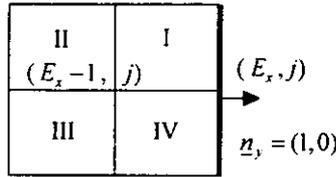


$$\int_{\partial\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\underline{x} = - \int_{y_j}^{y_{j+1}} u_{\rho}(x_0, y) \left\{ a_{11}(x_0, y) \left(\frac{\partial w'_{1,j}}{\partial x} \right)_{x_0} + a_{12}(x_0, y) \left(\frac{\partial w'_{1,j}}{\partial y} \right)_{x_0} \right\} dy$$

$$- \int_{y_{j-1}}^{y_j} u_{\rho}(x_0, y) \left\{ a_{11}(x_0, y) \left(\frac{\partial w''_{1,j}}{\partial x} \right)_{x_0} + a_{12}(x_0, y) \left(\frac{\partial w''_{1,j}}{\partial y} \right)_{x_0} \right\} dy; \text{ (A.16)}$$

$j = 2, \dots, E_y - 2$

3. Frontera derecha

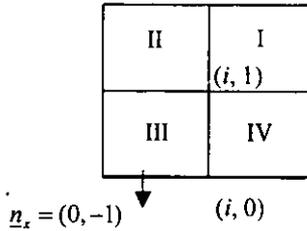


$$\int_{\partial\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\underline{x} = \int_{y_j}^{y_{j+1}} u_{\rho}(x_{E_x}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w'_{E_x-1,j}}{\partial x} \right)_{x_{E_x}} + a_{12}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w'_{E_x-1,j}}{\partial y} \right)_{x_{E_x}} \right\} dy$$

$$+ \int_{y_{j-1}}^{y_j} u_{\rho}(x_{E_x}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w''_{E_x-1,j}}{\partial x} \right)_{x_{E_x}} + a_{12}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w''_{E_x-1,j}}{\partial y} \right)_{x_{E_x}} \right\} dy; \text{ (A.17)}$$

$j = 2, \dots, E_y - 2$

4. Frontera inferior

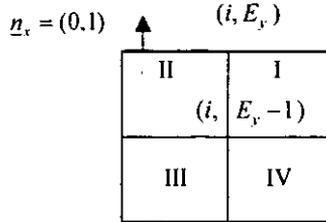


$$\int_{\partial\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\underline{x} = - \int_{x_{i-1}}^{x_i} u_{\rho}(x, y_0) \left\{ a_{21}(x, y_0) \left(\frac{\partial w'''_{i1}}{\partial x} \right)_{y_0} + a_{22}(x, y_0) \left(\frac{\partial w'''_{i1}}{\partial y} \right)_{y_0} \right\} dx$$

$$- \int_{x_i}^{x_{i+1}} u_{\rho}(x, y_0) \left\{ a_{21}(x, y_0) \left(\frac{\partial w''_{i1}}{\partial x} \right)_{y_0} + a_{22}(x, y_0) \left(\frac{\partial w''_{i1}}{\partial y} \right)_{y_0} \right\} dx; \text{ (A.18)}$$

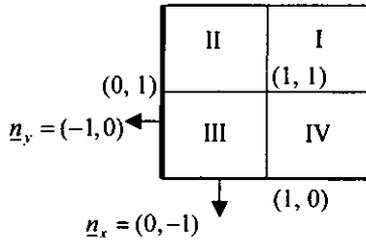
$i = 2, \dots, E_x - 2$

5. Frontera superior



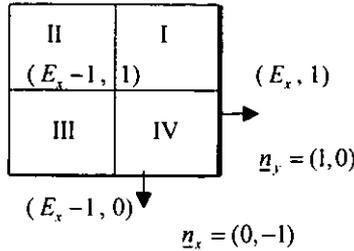
$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij} d\underline{x} &= \\
 &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} u_{\rho}(x, y_{E_y}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_y}) \left(\frac{\partial w_{i, E_y - 1}''}{\partial x} \right)_{y_{E_y}} + a_{22}(x, y_{E_y}) \left(\frac{\partial w_{i, E_y - 1}''}{\partial y} \right)_{y_{E_y}} \right\} dx \\
 &+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} u_{\rho}(x, y_{E_y}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_y}) \left(\frac{\partial w'_{i, E_y - 1}}{\partial x} \right)_{y_{E_y}} + a_{22}(x, y_{E_y}) \left(\frac{\partial w'_{i, E_y - 1}}{\partial y} \right)_{y_{E_y}} \right\} dx; \\
 & \quad i = 2, \dots, E_x - 2
 \end{aligned} \tag{A.19}$$

6. Esquina inferior izquierda



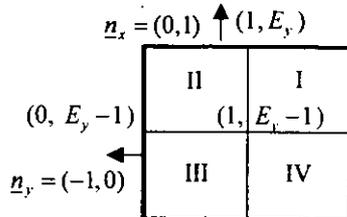
$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij} d\underline{x} &= - \int_{x_0}^{x_1} u_{\rho}(x, y_0) \left\{ a_{21}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{11}'''}{\partial x} \right)_{y_0} + a_{22}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{11}'''}{\partial y} \right)_{y_0} \right\} dx \\
 &- \int_{x_1}^{x_2} u_{\rho}(x, y_0) \left\{ a_{21}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{11}'''}{\partial x} \right)_{y_0} + a_{22}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{11}'''}{\partial y} \right)_{y_0} \right\} dx \\
 &- \int_{y_1}^{y_2} u_{\rho}(x_0, y) \left\{ a_{11}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{11}''}{\partial x} \right)_{x_0} + a_{12}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{11}''}{\partial y} \right)_{x_0} \right\} dy \\
 &- \int_{y_0}^{y_1} u_{\rho}(x_0, y) \left\{ a_{11}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{11}'''}{\partial x} \right)_{x_0} + a_{12}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{11}'''}{\partial y} \right)_{x_0} \right\} dy;
 \end{aligned} \tag{A.20}$$

7. Esquina inferior derecha



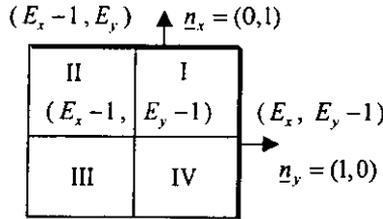
$$\begin{aligned}
 \int_{\partial \Omega} u_{\varphi} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y d\underline{x} = & - \int_{x_{E_x-2}}^{x_{E_x-1}} u_{\varphi}(x, y_0) \left\{ a_{21}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{E_x-1,1}^{III}}{\partial x} \right)_{y_0} + a_{22}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{E_x-1,1}^{III}}{\partial y} \right)_{y_0} \right\} dx \\
 & - \int_{x_{E_x-1}}^{x_{E_x}} u_{\varphi}(x, y_0) \left\{ a_{21}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{E_x-1,1}^{II}}{\partial x} \right)_{y_0} + a_{22}(x, y_0) \left(\frac{\partial w_{E_x-1,1}^{II}}{\partial y} \right)_{y_0} \right\} dx \\
 & + \int_{y_1}^{y_2} u_{\varphi}(x_{E_x}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w'_{E_x-1,1}}{\partial x} \right)_{x_{E_x}} + a_{12}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w'_{E_x-1,1}}{\partial y} \right)_{x_{E_x}} \right\} dy \\
 & + \int_{y_0}^{y_1} u_{\varphi}(x_{E_x}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w''_{E_x-1,1}}{\partial x} \right)_{x_{E_x}} + a_{12}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w''_{E_x-1,1}}{\partial y} \right)_{x_{E_x}} \right\} dy
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

8. Esquina superior izquierda



$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{\rho} d\underline{x} &= \int_{x_0}^{x_1} u_{\rho}(x, y_{E_x}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}''}{\partial x} \right)_{y_{E_x}} + a_{22}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}''}{\partial y} \right)_{y_{E_x}} \right\} dx \\
 &+ \int_{y_1}^{y_2} u_{\rho}(x, y_{E_x}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}'}{\partial x} \right)_{y_{E_x}} + a_{22}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}'}{\partial y} \right)_{y_{E_x}} \right\} dx \\
 &- \int_{y_{E_x,-1}}^{y_{E_x}} u_{\rho}(x_0, y) \left\{ a_{11}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}''}{\partial x} \right)_{x_0} + a_{12}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}''}{\partial y} \right)_{x_0} \right\} dy \\
 &- \int_{y_{E_x,-2}}^{y_{E_x,-1}} u_{\rho}(x_0, y) \left\{ a_{11}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}'''}{\partial x} \right)_{x_0} + a_{12}(x_0, y) \left(\frac{\partial w_{1,E_x,-1}'''}{\partial y} \right)_{x_0} \right\} dy
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

9. Esquina superior derecha



$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} u_{\rho} \underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{\rho} d\underline{x} &= \\
 &= \int_{y_{E_x,-2}}^{y_{E_x,-1}} u_{\rho}(x, y_{E_x}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}''}{\partial x} \right)_{y_{E_x}} + a_{22}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}''}{\partial y} \right)_{y_{E_x}} \right\} dx \\
 &+ \int_{y_{E_x,-1}}^{y_{E_x}} u_{\rho}(x, y_{E_x}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}'}{\partial x} \right)_{y_{E_x}} + a_{22}(x, y_{E_x}) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}'}{\partial y} \right)_{y_{E_x}} \right\} dx \tag{A.23} \\
 &+ \int_{y_{E_x,-1}}^{y_{E_x}} u_{\rho}(x_{E_x}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}'}{\partial x} \right)_{x_{E_x}} + a_{12}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}'}{\partial y} \right)_{x_{E_x}} \right\} dy \\
 &+ \int_{y_{E_x,-2}}^{y_{E_x,-1}} u_{\rho}(x_{E_x}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}''}{\partial x} \right)_{x_{E_x}} + a_{12}(x_{E_x}, y) \left(\frac{\partial w_{E_x,-1,E_x,-1}''}{\partial y} \right)_{x_{E_x}} \right\} dy;
 \end{aligned}$$

A.2.3 Cálculo de la integral $F_y^3 = \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}] d\underline{x}$

1. Nodo interior

$$\sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}] d\underline{x} = 0; \quad i = 2, \dots, E_x - 2; \quad j = 2, \dots, E_y - 2 \quad (\text{A.24})$$

2. Frontera izquierda

II	I
(0, j)	(1, j)
III	IV

$$\begin{aligned} & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}] d\underline{x} = \\ & = u_{\partial}(x_0, y_{j-1}) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,j-1}^0(x, y_{j-1}) \{ a_{21}(x, y_{j-1}) [\partial w_{ij} / \partial x]_{y_{j-1}} + a_{22}(x, y_{j-1}) [\partial w_{ij} / \partial y]_{y_{j-1}} \} dx \\ & + u_{\partial}(x_0, y_j) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,j}^0(x, y_j) \{ a_{21}(x, y_j) [\partial w_{ij} / \partial x]_{y_j} + a_{22}(x, y_j) [\partial w_{ij} / \partial y]_{y_j} \} dx \quad (\text{A.25}) \\ & + u_{\partial}(x_0, y_{j+1}) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,j+1}^0(x, y_{j+1}) \{ a_{21}(x, y_{j+1}) [\partial w_{ij} / \partial x]_{y_{j+1}} + a_{22}(x, y_{j+1}) [\partial w_{ij} / \partial y]_{y_{j+1}} \} dx; \\ & \quad j = 2, \dots, E_y - 2 \end{aligned}$$

3. Frontera derecha

II	I
(E _x - 1, j)	(E _x , j)
III	IV

$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r s} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}] d\underline{x} = \\
 & = u_{\partial}(x_{E_x}, y_{j-1}) \int_{x_{E_x-1}}^{x_{E_x}} B_{E_x, j-1}^0(x, y_{j-1}) \{ a_{21}(x, y_{j-1}) [\partial w_{E_x-1, j} / \partial x]_{y_{j-1}} + a_{22}(x, y_{j-1}) [\partial w_{E_x-1, j} / \partial y]_{y_{j-1}} \} dx \\
 & + u_{\partial}(x_{E_x}, y_j) \int_{x_{E_x-1}}^{x_{E_x}} B_{E_x, j}^0(x, y_j) \{ a_{21}(x, y_j) [\partial w_{E_x-1, j} / \partial x]_{y_j} + a_{22}(x, y_j) [\partial w_{E_x-1, j} / \partial y]_{y_j} \} dx \quad (A.26) \\
 & + u_{\partial}(x_{E_x}, y_{j+1}) \int_{x_{E_x-1}}^{x_{E_x}} B_{E_x, j+1}^0(x, y_{j+1}) \{ a_{21}(x, y_{j+1}) [\partial w_{E_x-1, j} / \partial x]_{y_{j+1}} + a_{22}(x, y_{j+1}) [\partial w_{E_x-1, j} / \partial y]_{y_{j+1}} \} dx; \\
 & \quad j = 2, \dots, E_y - 2
 \end{aligned}$$

4. Frontera inferior

II	I (i, 1)
III	IV (i, 0)

$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r s} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_{ij}] d\underline{x} = \\
 & = u_{\partial}(x_{i-1}, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{i-1, 0}^0(x_{i-1}, y) \{ a_{11}(x_{i-1}, y) [\partial w_{i, 1} / \partial x]_{x_{i-1}} + a_{12}(x_{i-1}, y) [\partial w_{i, 1} / \partial y]_{x_{i-1}} \} dy \\
 & + u_{\partial}(x_i, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{i, 0}^0(x_i, y) \{ a_{11}(x_i, y) [\partial w_{i, 1} / \partial x]_{x_i} + a_{12}(x_i, y) [\partial w_{i, 1} / \partial y]_{x_i} \} dy \quad (A.27) \\
 & + u_{\partial}(x_{i+1}, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{i+1, 0}^0(x_{i+1}, y) \{ a_{11}(x_{i+1}, y) [\partial w_{i, 1} / \partial x]_{x_{i+1}} + a_{12}(x_{i+1}, y) [\partial w_{i, 1} / \partial y]_{x_{i+1}} \} dy; \\
 & \quad i = 2, \dots, E_x - 2
 \end{aligned}$$

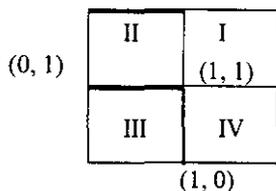
5. Frontera superior

(i, E_y)

II (i, E _y - 1)	I
III	IV

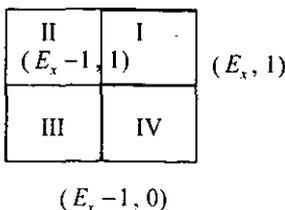
$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r s} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} = \\
 & = u_{\partial}(x_{i-1}, y_{E_i}) \int_{y_{E_{i-1}}}^{y_{E_i}} B_{i-1, E_i}^0(x_{i-1}, y) \{ a_{11}(x_{i-1}, y) [\partial w_{i, E_i-1} / \partial x]_{x_{i-1}} + a_{12}(x_{i-1}, y) [\partial w_{i, E_i-1} / \partial y]_{x_{i-1}} \} dy \\
 & + u_{\partial}(x_i, y_{E_i}) \int_{y_{E_{i-1}}}^{y_{E_i}} B_{i, E_i}^0(x_i, y) \{ a_{11}(x_i, y) [\partial w_{i, E_i-1} / \partial x]_{x_i} + a_{12}(x_i, y) [\partial w_{i, E_i-1} / \partial y]_{x_i} \} dy \quad (A.28) \\
 & + u_{\partial}(x_{i+1}, y_{E_i}) \int_{y_{E_{i-1}}}^{y_{E_i}} B_{i+1, E_i}^0(x_{i+1}, y) \{ a_{11}(x_{i+1}, y) [\partial w_{i, E_i-1} / \partial x]_{x_{i+1}} + a_{12}(x_{i+1}, y) [\partial w_{i, E_i-1} / \partial y]_{x_{i+1}} \} dy; \\
 & i = 2, \dots, E_x - 2
 \end{aligned}$$

6. Esquina inferior izquierda



$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r s} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} = \\
 & = u_{\partial}(x_1, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{1,0}^0(x_1, y) \{ a_{11}(x_1, y) [\partial w_{11} / \partial x]_{x_1} + a_{12}(x_1, y) [\partial w_{11} / \partial y]_{x_1} \} dy \\
 & + u_{\partial}(x_2, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{2,0}^0(x_2, y) \{ a_{11}(x_2, y) [\partial w_{11} / \partial x]_{x_2} + a_{12}(x_2, y) [\partial w_{11} / \partial y]_{x_2} \} dy \quad (A.29) \\
 & + u_{\partial}(x_0, y_1) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,1}^0(x, y_1) \{ a_{21}(x, y_1) [\partial w_{11} / \partial x]_{y_1} + a_{22}(x, y_1) [\partial w_{11} / \partial y]_{y_1} \} dx \\
 & + u_{\partial}(x_0, y_2) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,2}^0(x, y_2) \{ a_{21}(x, y_2) [\partial w_{11} / \partial x]_{y_2} + a_{22}(x, y_2) [\partial w_{11} / \partial y]_{y_2} \} dx;
 \end{aligned}$$

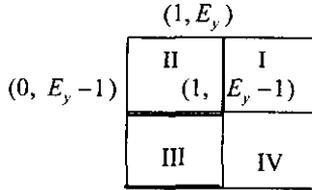
7. Esquina inferior derecha



$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rx}^0 \left[\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y \right] d\underline{x} = \\
 & = u_{\partial}(x_{E,-2}, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{E,-2,0}^0(x_{E,-2}, y) \left\{ a_{11}(x_{E,-2}, y) [\partial w_{E,-1,1} / \partial x]_{x_{E,-2}} + a_{12}(x_{E,-2}, y) [\partial w_{E,-1,1} / \partial y]_{x_{E,-2}} \right\} dy \\
 & + u_{\partial}(x_{E,-1}, y_0) \int_{y_0}^{y_1} B_{E,-1,0}^0(x_{E,-1}, y) \left\{ a_{11}(x_{E,-1}, y) [\partial w_{E,-1,1} / \partial x]_{x_{E,-1}} + a_{12}(x_{E,-1}, y) [\partial w_{E,-1,1} / \partial y]_{x_{E,-1}} \right\} dy \\
 & + u_{\partial}(x_E, y_1) \int_{x_{E,-1}}^{x_E} B_{E,1}^0(x, y_1) \left\{ a_{21}(x, y_1) [\partial w_{E,-1,1} / \partial x]_{y_1} + a_{22}(x, y_1) [\partial w_{E,-1,1} / \partial y]_{y_1} \right\} dx \\
 & + u_{\partial}(x_E, y_2) \int_{x_{E,-1}}^{x_E} B_{E,2}^0(x, y_2) \left\{ a_{21}(x, y_2) [\partial w_{E,-1,1} / \partial x]_{y_2} + a_{22}(x, y_2) [\partial w_{E,-1,1} / \partial y]_{y_2} \right\} dx;
 \end{aligned}$$

(A.30)

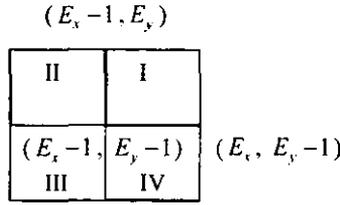
8. Esquina superior izquierda



$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rx}^0 \left[\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y \right] d\underline{x} \\
 & = u_{\partial}(x_1, y_{E_1}) \int_{y_{E_1-1}}^{y_{E_1}} B_{1,E_1}^0(x_1, y) \left\{ a_{11}(x_1, y) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial x]_{x_1} + a_{12}(x_1, y) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial y]_{x_1} \right\} dy \\
 & + u_{\partial}(x_2, y_{E_1}) \int_{y_{E_1-1}}^{y_{E_1}} B_{2,E_1}^0(x_2, y) \left\{ a_{11}(x_2, y) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial x]_{x_2} + a_{12}(x_2, y) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial y]_{x_2} \right\} dy \\
 & + u_{\partial}(x_0, y_{E_1-2}) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,E_1-2}^0(x, y_{E_1-2}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_1-2}) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial x]_{y_{E_1-2}} + a_{22}(x, y_{E_1-2}) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial y]_{y_{E_1-2}} \right\} dx \\
 & + u_{\partial}(x_0, y_{E_1-1}) \int_{x_0}^{x_1} B_{0,E_1-1}^0(x, y_{E_1-1}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_1-1}) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial x]_{y_{E_1-1}} + a_{22}(x, y_{E_1-1}) [\partial w_{1,E_1-1} / \partial y]_{y_{E_1-1}} \right\} dx;
 \end{aligned}$$

(A.31)

9. Esquina superior derecha



$$\begin{aligned}
 & \sum_{(r,s) \in \partial\Omega} u_{\partial r} \int_{\Sigma} B_{rs}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x} = \\
 & = u_{\partial}(x_{E_x-2}, y_{E_y}) \int_{y_{E_y-1}}^{y_{E_y}} B_{E_x-2, E_y}^0(x_{E_x-2}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x-2}, y) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial x]_{x_{E_x-2}} + a_{12}(x_{E_x-2}, y) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial y]_{x_{E_x-2}} \right\} dy \\
 & + u_{\partial}(x_{E_x-1}, y_{E_y}) \int_{y_{E_y-1}}^{y_{E_y}} B_{E_x-1, E_y}^0(x_{E_x-1}, y) \left\{ a_{11}(x_{E_x-1}, y) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial x]_{x_{E_x-1}} + a_{12}(x_{E_x-1}, y) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial y]_{x_{E_x-1}} \right\} dy \\
 & + u_{\partial}(x_{E_x}, y_{E_y-2}) \int_{x_{E_x-1}}^{x_{E_x}} B_{E_x, E_y-2}^0(x, y_{E_y-2}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_y-2}) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial x]_{y_{E_y-2}} + a_{22}(x, y_{E_y-2}) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial y]_{y_{E_y-2}} \right\} dx \\
 & + u_{\partial}(x_{E_x}, y_{E_y-1}) \int_{x_{E_x-1}}^{x_{E_x}} B_{E_x, E_y-1}^0(x, y_{E_y-1}) \left\{ a_{21}(x, y_{E_y-1}) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial x]_{y_{E_y-1}} + a_{22}(x, y_{E_y-1}) [\partial w_{E_x-1, E_y-1} / \partial y]_{y_{E_y-1}} \right\} dx; \\
 & \hspace{15em} (A.32)
 \end{aligned}$$

A.2.4 Cálculo de la integral $F_y^4 = \int_{\underline{x}} j_{\Sigma}^0 (\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y + b_n w_y) d\underline{x} - \int_{\underline{x}} w_y j_{\Sigma}^1 d\underline{x};$

A.2.5 Cálculo de la integral $F_y^5 = \sum_{(k,l) \in \eta_{\Sigma}} \frac{\sigma}{2} [u_{\Sigma}]_k \int_{\Sigma} B_{kl}^0 [\underline{n} \cdot \underline{a} \cdot \nabla w_y] d\underline{x};$

ANEXO B: Modelo General de Flujo y Transporte en Medios Porosos

B.1 Conceptos y Resultados usados en la Modelación de Sistemas Continuos

B.1.1 El concepto de sistema continuo

La premisa fundamental consiste en considerar que un sistema continuo llena todo el espacio que ocupa. Es decir, cada punto del sistema continuo está lleno de materia.

En los sistemas continuos se trabaja con los promedios de sus propiedades físicas y existe un volumen llamado representativo, para el cual se calculan y son válidos los promedios de dichas propiedades.

B.1.2 Propiedades Extensivas e Intensivas

Cuando una propiedad puede expresarse como una integral sobre la región $B(t)$ ocupada por el cuerpo, decimos que la propiedad es una propiedad extensiva. Dada una función cualquiera $\psi(x,t)$, defina

$$E(t) \equiv \int_{B(t)} \psi(\underline{x},t) d\underline{x}; \quad (\text{B.1})$$

entonces $E(t)$ es una propiedad extensiva. Aún más, una propiedad $E(t)$ es extensiva si y solamente si, se puede expresar en la forma dada por la Ec.(B.1). En tal caso a la función $\psi(x,t)$ se le llama “la propiedad intensiva asociada a la propiedad extensiva $E(t)$ ”. Así, toda función integrable define una propiedad intensiva y la Ec.(B.1) establece una correspondencia biunívoca entre propiedades extensivas e intensivas. En particular, si los valores de la función integrable $\psi(x,t)$ son vectoriales, entonces la función extensiva correspondiente también es vectorial.

Hay que hacer notar que hay diferentes modos de definir a la propiedad intensiva. En nuestro caso la hemos definido como la propiedad por unidad de volumen. Sin embargo, es

frecuente que se le defina por unidad de masa [1] y en tal caso se puede obtener una de la otra multiplicando por la densidad.

B.1.3 Ecuación de Balance Global

La hipótesis básica desde el punto de vista físico para formulación de las ecuaciones de balance de las propiedades extensivas en la teoría de sistemas continuos se puede enunciar de la siguiente manera: *cualquier variación de la propiedad extensiva proviene de lo que se genera o se destruye dentro del cuerpo o de lo que entra o sale a través de su frontera.* La expresión matemática de esta hipótesis es:

$$\frac{dE(t)}{dt} = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x}; \quad (\text{B.2})$$

donde $g(\underline{x}, t)$ - es lo que se genera o se destruye en el interior del cuerpo $B(t)$

$\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ - es lo que entra o sale a través de la frontera del cuerpo $\partial B(t)$

B.1.4 Ecuaciones de Balance Local

Las ecuaciones de balance local de una propiedad intensiva $\psi(x, t)$ en presencia de discontinuidades de salto, tanto de la función misma como de sus derivadas, en alguna superficie que designaremos por $\Sigma(t)$, son:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\psi \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau}; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.3})$$

$$[\psi (\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} = 0; \quad \forall \underline{x} \in \Sigma(t) \quad (\text{B.4})$$

Aquí \underline{n} es el vector normal a la superficie $\Sigma(t)$ cuyo sentido se elige de manera arbitraria y $[f]$ se define como el salto de una función f y está dado por $[f] \equiv f_+ - f_-$, donde el signo positivo se toma en el lado hacia donde apunta el vector normal. Los detalles de la derivación de las Ecs.(B.3) y (B.4) se pueden ver en [55].

Una manera alternativa de expresar la ecuación de balance local (B.3) es en función de la derivada material de la propiedad intensiva. Si desarrollamos el término de la divergencia en (B.3) resulta:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot \underline{v} = g + \nabla \cdot \underline{\tau}; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.5})$$

Como los dos primeros términos son por definición la derivada material de la propiedad intensiva, es decir $\frac{D\psi}{Dt} \equiv \frac{\partial\psi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \psi$, entonces resulta la expresión:

$$\frac{D\psi}{Dt} + \psi \nabla \cdot \underline{v} = g + \nabla \cdot \underline{\tau}; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.6})$$

la cual en muchos casos es más conveniente emplear para fines de manipulación algebraica.

B.2 Flujo de Fluidos en Medios Porosos

B.2.1 Caracterización de un medio poroso

Las hipótesis básicas en las que se sustenta el modelo de flujo en medios porosos son:

- El fluido es compresible, es decir puede haber variación de la densidad como función de la presión.
- El sólido poroso conocido también como matriz es elástico, es decir en general la porosidad depende de la presión,
- No hay difusión del fluido,
- La velocidad del fluido está dada por la ley de Darcy, que es una ecuación constitutiva que relaciona a la velocidad de las partículas del fluido con la presión.

B.2.2 Ley de Darcy

Aquí sólo enunciaremos la ley de Darcy [64] que es un resultado empírico para medios porosos saturados y dice que la velocidad de Darcy \underline{U} es una función lineal del gradiente de la presión en ausencia de gravedad. En general esta se expresa en presencia de gravedad como:

$$\underline{U} = -\frac{1}{\mu} k \cdot (\nabla p - \rho \underline{\hat{g}}) \quad (\text{B.7})$$

donde $\underline{\hat{g}}$ - es el vector de aceleración de la gravedad,

μ - es la viscosidad dinámica del fluido,

\underline{k} - es el tensor de permeabilidad intrínseca,

p - es la presión del fluido,

$\underline{U} = \phi \underline{v}$ - es la velocidad de Darcy que se define como el gasto volumétrico por unidad de área,

\underline{v} - es la velocidad del fluido,

ϕ - es la porosidad del medio.

Si consideramos a z como la altura respecto a un nivel de referencia dado, entonces el vector aceleración de la gravedad se puede expresar como:

$$\underline{\hat{g}} = -\hat{g}\nabla z \quad (\text{B.8})$$

y consecuentemente la ley de Darcy se puede describir como

$$\underline{U} = -\frac{1}{\mu} \underline{k} \cdot (\nabla p + \rho \hat{g} \nabla z) \quad (\text{B.9})$$

donde \hat{g} - es el módulo del vector aceleración de la gravedad.

La expresión equivalente en notación indicial sería:

$$U_i = -\frac{k_{ij}}{\mu} \left(\frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho \hat{g} \frac{\partial z}{\partial x_j} \right); \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.10})$$

B.2.3 Balance de masa

Propiedad Extensiva: Masa de fluido $M_f(t)$

Propiedad Intensiva: $\psi \equiv \phi \rho$.

$$M_f(t) = \int_{B(t)} \phi(\underline{x}, t) \rho(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (\text{B.11})$$

donde la porosidad está definida por $\phi(\underline{x}, t) = \frac{\text{Volumen de Poros}}{\text{Volumen Total}}$

Ecuación de Balance Local:

Cuando no hay difusión $\tau = 0$, entonces sustituyendo la propiedad intensiva en la ecuación general de balance local Ec.(B.3), resulta

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi\rho \underline{v}) = g; \quad \forall x \in B(t) \quad (\text{B.12})$$

que en términos de la velocidad de Darcy se escribe como

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{U}) = g; \quad (\text{B.13})$$

Condiciones de salto:

$$[\phi\rho(\underline{v} - \underline{v}_z)] \cdot \underline{n}_z = 0; \quad \forall \underline{x} \in \Sigma \quad (\text{B.14})$$

Si definimos el nivel piezométrico como:

$$h = \frac{1}{\hat{g}} \int_{p_0}^p \frac{d\xi}{\rho(\xi)} + z \quad (\text{B.15})$$

y correspondientemente su gradiente resulta

$$\nabla h = (\hat{g})^{-1} \nabla p + \nabla z \quad (\text{B.16})$$

Entonces la ley de Darcy la podemos describir en términos del nivel piezométrico como

$$\underline{U} = -\frac{\rho \hat{g}}{\mu} \underline{k} \cdot \left(\frac{\nabla p}{\rho \hat{g}} + \nabla z \right) = -\underline{K} \cdot \nabla h \quad (\text{B.17})$$

donde $\underline{K} = \frac{\rho \hat{g}}{\mu} \underline{k}$ - es el tensor de conductividad hidráulica.

Por las hipótesis del modelo de flujo la densidad y la porosidad son funciones de la presión, es decir $\rho = \rho(p)$ y $\phi = \phi(p)$, por lo que el primer término de la ecuación de balance de masa Ec.(B.13) se puede desarrollar como

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \phi \frac{d\rho}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} + \rho \frac{d\phi}{dp} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{B.18})$$

Si tomamos la siguiente notación $\alpha = \frac{d\phi}{dp}$ y $\beta = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp}$ y sustituimos, tenemos que

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \rho(\alpha + \beta\phi) \frac{\partial p}{\partial t} \quad (\text{B.19})$$

Si consideramos que $S_s = \rho \hat{g} (\alpha + \beta \phi)$ es el coeficiente de almacenamiento específico, entonces

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = \frac{1}{\hat{g}} S_s \frac{\partial p}{\partial t} = \rho S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (\text{B.20})$$

ya que de la definición del nivel piezométrico tenemos que $\frac{\partial p}{\partial t} = \rho \hat{g} \frac{\partial h}{\partial t}$.

Al sustituir la Ec.(B.20) en la Ec.(B.13) se obtiene

$$\rho S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{U}) = g; \quad (\text{B.21})$$

Si desarrollamos el término de la divergencia y dividimos por ρ , resulta:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{U} + \underline{U} \cdot \nabla \ln \rho = \rho^{-1} g; \quad (\text{B.22})$$

Debido a que en la mayoría de las aplicaciones $|\nabla \ln \rho| \ll 1$, este término se puede despreciar y entonces la expresión mas usada es:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{U} = \rho^{-1} g; \quad (\text{B.23})$$

Finalmente, sustituyendo la velocidad de Darcy Ec.(B.17), obtenemos la ecuación general de flujo:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla h) = \rho^{-1} g; \quad (\text{B.24})$$

Si consideramos el caso de flujo conservativo ($g = 0$), entonces la ecuación de flujo se escribe como:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot (\underline{K} \cdot \nabla h) \quad (\text{B.25})$$

Para el caso isotrópico tenemos que $\underline{K} = K \underline{I}$, entonces

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = K \Delta h \quad (\text{B.26})$$

B.2.4 Problemas de flujo bien planteados

Un problema de flujo es bien planteado cuando se prescriben condiciones iniciales y de frontera apropiadas.

Condiciones iniciales

$$h(\underline{x}, t_0) = h_0(\underline{x}); \quad \forall \underline{x} \in \Omega \quad (\text{B.27})$$

Condiciones de frontera

Pueden ser de tres tipos:

- a. Condiciones de Dirichlet

$$h(\underline{x}, t) = h_e(t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.28})$$

- b. Condiciones de Neumann

$$(\underline{K} \cdot \nabla h) \cdot \underline{n} = q(\underline{x}, t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.29})$$

Se prescribe el flujo o gasto por unidad de área en la frontera.

- c. Condiciones de Robin

$$\alpha(\underline{x}, t) \frac{\partial h}{\partial n}(\underline{x}, t) + \beta(\underline{x}, t) h(\underline{x}, t) = \gamma(\underline{x}, t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.30})$$

B.3 Transporte de Solutos en Fluidos en Medios Porosos

B.3.1 Ecuación general de transporte monofásico

a) Fluidos libres

En transporte de fluidos libres consideraremos como la propiedad *extensiva* a la masa de soluto disuelto en el fluido $M_s(t)$ y a la concentración del soluto $c(\underline{x}, t)$ como su propiedad *intensiva* correspondiente, que es igual a la masa de soluto por unidad de volumen de fluido. La relación de ambas esta dada por:

$$M_s(t) = \int_{\Omega(t)} c(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (\text{B.31})$$

A partir de la ecuación global de balance Ec.(B.2) para la masa de soluto

$$\frac{dM_s(t)}{dt} = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (\text{B.32})$$

y aplicando el resultado de la *ecuación general de balance local* Ec. (B.3) se obtiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau}, \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.33})$$

y su correspondiente *condición de salto* en el caso con discontinuidades

$$[c(\underline{v} - \underline{v}_\tau) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n}_\tau = 0; \quad \forall \underline{x} \in \Sigma \quad (\text{B.34})$$

donde $g(\underline{x}, t)$ - es la masa de soluto por unidad de volumen de fluido que se genera o se destruye en el interior del cuerpo $B(t)$ y $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ - es el flujo de masa que entra o sale a través de la frontera del mismo $\partial B(t)$. Como ejemplos de g y $\underline{\tau}$ tenemos:

$g(\underline{x}, t) = -\lambda c(\underline{x}, t)$ - en presencia de decaimiento radiactivo del soluto, donde λ es la constante de semi-desintegración.

$\underline{\tau}(\underline{x}, t) = \underline{k} \cdot \nabla c$ -en presencia de difusión molecular y es conocida como ley de Fick.

b) En medios porosos (saturados)

De manera análoga al caso anterior se puede formular el modelo de transporte en medios porosos. Se considera como la propiedad *extensiva* a la masa de soluto disuelto en el fluido $M_s(t)$, pero en este caso la propiedad *intensiva* correspondiente es igual a la masa de soluto por unidad de volumen de fluido y está dada por $\phi(\underline{x}, t)c(\underline{x}, t)$, debido a que

$$M_s(t) = \int_{B(t)} \phi(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (\text{B.35})$$

donde la porosidad del medio $\phi(\underline{x}, t)$ se define como el volumen de poros por unidad de volumen del cuerpo. Nótese que en el caso de un medio poroso saturado el volumen de fluido es igual al volumen total de poros, puesto que se considera a los poros completamente llenos de fluido. Entonces el volumen de fluido es también una propiedad extensiva y se expresa como sigue:

$$V_f(t) = \int_{n(t)} \phi(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (\text{B.36})$$

Aplicando el resultado del capítulo anterior, la *ecuación de balance local* de la concentración de soluto resulta:

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi c \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau}; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.37})$$

que se puede escribir de manera equivalente como

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} + \nabla \cdot (c \underline{U}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau}; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.38})$$

donde $\underline{U} = \phi \underline{v}$ - es conocida como la velocidad de Darcy.

Y la correspondiente *condición de salto* en presencia de discontinuidades

$$[\phi c (\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n}_\Sigma = 0; \quad \forall \underline{x} \in \Sigma \quad (\text{B.39})$$

Como análogos de los ejemplos de g y $\underline{\tau}$ presentados anteriormente para fluidos libres tenemos:

$g(\underline{x}, t) = -\lambda \phi(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t)$ - en presencia de decaimiento radiactivo del soluto, donde λ es la constante de semi-desintegración.

$\underline{\tau}(\underline{x}, t) = \underline{k} \cdot \nabla c$ - ley de Fick en medios porosos.

Una hipótesis importante que se debe cumplir para que los modelos de transporte obtenidos resulten completos es que la velocidad de las partículas \underline{v} sea conocida.

B.3.2 Restricciones en el movimiento: incompresibilidad

Un cuerpo de fluido es incompresible cuando conserva su volumen. A continuación derivaremos las condiciones de incompresibilidad para los casos de fluidos libres y en medios porosos.

a) Fluidos libres

En este caso la propiedad extensiva es el volumen de fluido que se expresa como

$$V_f(t) = \int_{B(t)} 1 d\underline{x} \quad (\text{B.40})$$

consecuentemente su correspondiente propiedad intensiva es $\psi \equiv 1$.

Si escribimos la ecuación global de balance correspondiente

$$\frac{dV_f}{dt}(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n} d\underline{x} \quad (\text{B.41})$$

Como no existe variación de volumen, es decir $\frac{dV_f}{dt}(t) = 0$, entonces $g = 0$ y $\underline{\tau} = 0$, y la ecuación de balance local correspondientes se escribe como:

$$\frac{\partial 1}{\partial t} + \nabla \cdot (1 \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau} = 0; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.42})$$

y por lo tanto resulta que

$$\nabla \cdot \underline{v} = 0; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.43})$$

la cual es la condición de incompresibilidad para un fluido libre.

b) Medios porosos

De modo similar, el volumen de un fluido en medios porosos se define como

$$V_f(t) = \int_{B(t)} \phi(\underline{x}, t) d\underline{x} \quad (\text{B.44})$$

por lo que la porosidad es su propiedad intensiva correspondiente $\psi \equiv \phi$.

Como no existe variación de volumen, es decir $\frac{dV_f}{dt}(t) = 0$, entonces $g = 0$ y $\underline{\tau} = 0$, y la ecuación de balance local correspondientes se escribe como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \underline{v}) = g + \nabla \cdot \underline{\tau} = 0; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.45})$$

y por lo tanto la condición de incompresibilidad para fluidos en medios porosos es:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \underline{v}) = 0; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.46})$$

B.3.3 Transporte conservativo

B.3.3.1 Caso particular para fluido incompresible

a) Fluidos Libres

Haciendo uso de la ecuación general de transporte Ec. (B.33) y considerando que $g = 0$ y $\underline{\tau} = 0$ para el caso conservativo, resulta que

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \underline{v}) = \frac{Dc}{Dt} + c \nabla \cdot \underline{v} = 0; \quad (\text{B.47})$$

entonces, en términos de la derivada material de la concentración

$$\frac{Dc}{Dt} = -c \nabla \cdot \underline{v} \quad (\text{B.48})$$

Si consideramos además que el fluido sea incompresible ($\nabla \cdot \underline{v} = 0$), entonces la Ec.(B.48) se transforma en

$$\frac{Dc}{Dt} = 0; \quad (\text{B.49})$$

La expresión (B.49) se puede describir de la siguiente manera

$$\frac{Dc(\underline{x}, t)}{Dt} = \frac{Dc(\underline{p}(\underline{X}, t), t)}{Dt} = \frac{\partial C(\underline{X}, t)}{\partial t} = 0 \quad (\text{B.50})$$

donde $C(\underline{X}, t)$ - es la representación lagrangiana de la concentración

Lo cual implica que $C(\underline{X}, t)$ es independiente del tiempo. Es decir, si el transporte es conservativo, en el caso de fluidos incompresibles las partículas conservan su concentración.

b) Medios Porosos

Se procede de manera similar al caso de fluidos libres. Se toma la ecuación general de transporte para medios porosos Ec.(B.37) y se considera que $g = 0$ y $\underline{\tau} = 0$.

$$\frac{\partial \phi c}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi c \underline{v}) = 0; \quad (\text{B.51})$$

que términos de la derivada material se escribe como:

$$\frac{D\phi c}{Dt} + \phi c \nabla \cdot \underline{v} = 0 \quad (\text{B.52})$$

Si desarrollamos el primer término aplicando la regla de la derivada del producto, se obtiene que

$$c \frac{D\phi}{Dt} + \phi \frac{Dc}{Dt} + \phi c \nabla \cdot \underline{v} = c \left(\frac{D\phi}{Dt} + \phi \nabla \cdot \underline{v} \right) + \phi \frac{Dc}{Dt} = 0 \quad (\text{B.53})$$

donde $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \underline{v}) = \frac{D\phi}{Dt} + \phi \nabla \cdot \underline{v} = 0$ es la condición de incompresibilidad (B.46) de un fluido en medios porosos expresada en términos de la derivada material y por lo tanto la Ec. (B.53) se reduce a

$$\frac{Dc}{Dt} = 0 \quad (\text{B.54})$$

que resulta equivalente al caso de fluidos libres y consecuentemente se interpreta del mismo modo.

B.3.3.2 Caso general para fluido compresible

Suponga que el movimiento del fluido se conoce y la masa del mismo se conserva.

Nota.- La hipótesis de conservación de masa del fluido se cumple en muchísimos casos de interés práctico.

Si definimos a $\omega(\underline{x}, t) = \frac{c(\underline{x}, t)}{\rho(\underline{x}, t)} = \frac{\text{masa de soluto}}{\text{masa de fluido}}$ como la fracción de masa de soluto.

a) Fluidos Libres

Si calculamos la derivada material de la fracción de masa, ésta se puede expresar como

$$\frac{D\omega}{Dt}(\underline{x}, t) = \rho^{-1} \frac{Dc}{Dt} - \rho^{-2} c \frac{D\rho}{Dt} = \rho^{-2} \left(\rho \frac{Dc}{Dt} - c \frac{D\rho}{Dt} \right) \quad (\text{B.55})$$

Por la condición de conservación de masa del fluido tenemos que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0 \Leftrightarrow \frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \underline{v} \quad (\text{B.56})$$

mientras que por la condición de conservación de masa del soluto tenemos que:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \underline{v}) = 0 \Leftrightarrow \frac{Dc}{Dt} = -c \nabla \cdot \underline{v} \quad (\text{B.57})$$

Al sustituir las ecuaciones (B.56) y (B.57) en la Ec. (B.55) se obtiene

$$\frac{D\omega}{Dt}(x,t) = \rho^{-2} (\rho c \nabla \cdot \underline{v} - \rho c \nabla \cdot \underline{v}) = 0 \quad (\text{B.58})$$

Por lo que en este caso decimos que las partículas conservan la fracción de masa del soluto.

b) Medios Porosos

De manera análoga al caso de fluidos libres, calculamos la derivada material de la fracción de masa

$$\frac{D\omega}{Dt}(x,t) = \frac{D}{Dt} \left(\frac{\phi c}{\phi \rho} \right) = (\phi \rho)^{-2} \left(\phi \rho \frac{D(\phi c)}{Dt} - \phi c \frac{D(\phi \rho)}{Dt} \right) \quad (\text{B.59})$$

Por la condición de conservación de masa del fluido en medios porosos tenemos que:

$$\frac{\partial(\phi \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \rho \underline{v}) = 0 \Leftrightarrow \frac{D(\phi \rho)}{Dt} = -\phi \rho \nabla \cdot \underline{v} \quad (\text{B.60})$$

mientras que la condición de conservación de masa del soluto es:

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi c \underline{v}) = 0 \Leftrightarrow \frac{D(\phi c)}{Dt} = -\phi c \nabla \cdot \underline{v} \quad (\text{B.61})$$

Al sustituir las ecuaciones (B.60) y (B.61) en la Ec. (B.59) se obtiene

$$\frac{D\omega}{Dt}(x,t) = 0 \quad (\text{B.62})$$

Por lo que en este caso también decimos que las partículas conservan la fracción de masa del soluto.

B.3.4 Transporte no conservativo

Transporte con Fuentes (o Resumideros) Lineales

Caso más sencillo, g es función lineal de c . Consideraremos $g = \mu(c - c_0)$ si $\mu(c - c_0) > 0$ es fuente y si $\mu(c - c_0) < 0$ es sumidero.

Ejemplo.- Material radioactivo

a) Fluidos Libres

$$g = -\lambda c, \quad \lambda > 0,$$

$$\frac{D\omega}{Dt} + \lambda\omega = 0 \quad (\text{B.63})$$

b) Medios Porosos

$$g = -\phi\lambda c, \quad \lambda > 0,$$

$$\frac{D\omega}{Dt} + \lambda\omega = 0 \quad (\text{B.64})$$

Otras Fuentes.- Adsorción en Medios Porosos:

Caso $F(\underline{x}, t)$, con F dato

B.3.5 Transporte difusivo

En presencia de procesos difusivos los cuales podemos clasificar en dos tipos:

- a) Difusión molecular (ley de Fick), debido a la interacción molecular de las moléculas de soluto y de fluido.
- b) Difusión mecánica, asociada al carácter aleatorio del medio poroso.

Analicemos estos procesos para fluidos libres y en medios porosos

a) Fluidos libres

Según la ley de Fick $\underline{\tau}$ es una función lineal del gradiente de la concentración del soluto ∇c en presencia de difusión molecular, y se expresa como:

$$\underline{\tau}(\underline{x}, t) = \underline{\underline{D}} \cdot \nabla c \quad (\text{B.65})$$

donde $\underline{\underline{D}}$ - es el tensor de dispersión hidrodinámica cuyos componentes se escriben:

$$D_y = D_d \tau \delta_y \quad (\text{B.66})$$

aquí D_d - es el coeficiente de difusión molecular y τ caracteriza la tortuosidad

Sustituyendo en la ecuación general de transporte (B.33) resulta:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\underline{D} \cdot \nabla c) + \nabla \cdot (c \underline{v}) = g; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.67})$$

Para el caso isotrópico (no depende de la dirección) la ley de Fick se puede describir como $\underline{\tau}(\underline{x}, t) = D \nabla c$ y consecuentemente la Ec. (B.67) se transforma en:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \Delta c + \nabla \cdot (c \underline{v}) = g; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.68})$$

b) Medios porosos

En este caso también $\underline{\tau}(\underline{x}, t) = \phi \underline{D} \cdot \nabla c$, pero los componentes del tensor de dispersión hidrodinámica se expresan como:

$$D_y = D_T |\underline{v}| \delta_y + (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|} + D_d \tau \delta_y \quad (\text{B.69})$$

donde D_T - es el coeficiente de dispersividad mecánica transversal y D_L - es el coeficiente de dispersividad mecánica longitudinal.

En términos de la velocidad de Darcy se puede describir como:

$$\phi D_y = D_T |\underline{U}| \delta_y + (D_L - D_T) \frac{U_i U_j}{|\underline{U}|} + \phi D_d \tau \delta_y \quad (\text{B.70})$$

Analicemos la dispersión mecánica (macroscópica), para lo cual veremos dos casos:

a) Cuando el gradiente de la concentración es paralelo a la velocidad $\nabla c \parallel \underline{v}$

En este caso el gradiente de la concentración se puede escribir como $\nabla c = \alpha \underline{v}$, donde $\alpha \in \mathbb{R}$, entonces

$$\tau_i = \phi D_y \alpha v_i = \phi \alpha \left\{ D_T |\underline{v}| \delta_{ij} + (D_L - D_T) \frac{v_i v_j}{|\underline{v}|} \right\} v_j \quad (\text{B.71})$$

$$\tau_r = \phi \alpha \left\{ D_r |\underline{v}| v_r + (D_l - D_r) \frac{v_r |\underline{v}|^2}{|\underline{v}|} \right\} \quad (\text{B.72})$$

$$\tau_r = \phi \alpha D_l |\underline{v}| v_r = D_l |\underline{U}| (\nabla c)_r, \quad (\text{B.73})$$

lo cual implica que $\underline{\tau}_{mec} = D_l |\underline{U}| \nabla c$.

b) Cuando el gradiente de la concentración es ortogonal a la velocidad $\nabla c \perp \underline{v}$

$$\tau_r = \phi D_y (\nabla c)_r = \phi \left\{ D_r |\underline{v}| \delta_{ry} + (D_l - D_r) \frac{v_r v_y}{|\underline{v}|} \right\} \frac{\partial c}{\partial x_r} \quad (\text{B.74})$$

$$\tau_r = \phi D_r |\underline{v}| \frac{\partial c}{\partial x_r} \quad (\text{B.75})$$

y finalmente resulta que $\underline{\tau}_{mec} = D_r |\underline{U}| \nabla c$

En el caso mas general el gradiente de la concentración se puede expresar como $\nabla c = (\nabla c)_l + (\nabla c)_r$, entonces

$$\underline{\tau}_{mec} = D_l |\underline{U}| (\nabla c)_l + D_r |\underline{U}| (\nabla c)_r \quad (\text{B.76})$$

lo cual implica que $\underline{\tau}_{mec} \sim |\underline{U}|$

Una observación interesante resulta si consideramos:

a) Si el vector normal a la frontera es paralelo a la velocidad de las partículas $\underline{n} \parallel \underline{v}$, entonces

$$\underline{\tau}_{mec} \cdot \underline{n} = \underline{n} \cdot \phi \underline{D} \cdot \nabla c = \phi D_l \frac{\partial c}{\partial n} \quad (\text{B.77})$$

b) Si el vector normal a la frontera es perpendicular a la velocidad de las partículas $\underline{n} \perp \underline{v}$, entonces

$$\underline{\tau}_{mec} \cdot \underline{n} = \underline{n} \cdot \phi \underline{D} \cdot \nabla c = \phi D_r \frac{\partial c}{\partial n} \quad (\text{B.78})$$

Sustituyendo $\underline{x}(\underline{x}, t)$ en la Ec. (B.38) se obtiene la expresión general de transporte en medios porosos:

$$\frac{\partial(\phi c)}{\partial t} - \nabla \cdot (\phi \underline{D} \cdot \nabla c) + \nabla \cdot (c \underline{U}) = g; \quad \forall \underline{x} \in B(t) \quad (\text{B.79})$$

B.3.6 Procesos de transporte: advección, difusión y generación

Proceso de advección

Decimos que existe advección cuando la velocidad de las partículas no es nula, es decir $\underline{v} \neq 0$.

Proceso de difusión

Decimos que existe difusión cuando el tensor de dispersión hidrodinámica no se anula, $\underline{D} \neq 0$.

Proceso de generación

Cuando $g \neq 0$

B.3.7 Problemas de transporte bien planteados

Un problema de transporte es bien planteado con condiciones iniciales y de frontera apropiadas.

Condiciones iniciales

$$c(\underline{x}, t_0) = c_0(\underline{x}); \quad \forall \underline{x} \in \Omega \quad (\text{B.80})$$

Condiciones de frontera

Pueden ser de tres tipos:

- a. Condiciones de Dirichlet

$$c(\underline{x}, t) = c_e(\underline{x}, t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.81})$$

b. Condiciones de Neumann

$$\frac{\partial c}{\partial n}(\underline{x}, t) = q(\underline{x}, t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.82})$$

c. Condiciones de Robin

$$\alpha(\underline{x}, t) \frac{\partial c}{\partial n}(\underline{x}, t) + \beta(\underline{x}, t) c(\underline{x}, t) = \gamma(\underline{x}, t); \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.83})$$

Un caso particular de las condiciones de tipo Robin, es cuando se prescribe el flujo total de masa:

$$-(\underline{D} \cdot \nabla c) \cdot \underline{n} + (\underline{v} \cdot \underline{n}) c = q; \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega, \quad t > 0 \quad (\text{B.84})$$

ANEXO C: Estimación del Orden de Error de Colocación TH en una Dimensión

Sean u y w' las aproximaciones de u y w' , respectivamente. Además, definimos

$$e(x) = u(x) - \hat{u}(x) \quad \text{y} \quad v'(x) = w'(x) - \hat{w}'(x) \tag{C.1}$$

y observe que el soporte de $v'(x)$, está contenido en (x_{i-1}, x_{i+1}) . Además, esta función se anula en x_{i-1}, x_i y x_{i+1} .

Teorema C.1: Sea v' definido por la Ec.(C.1). Entonces, existe una función $\varepsilon_\Omega(x) \in H^0(0,1)$, tal que

$$\int_0^1 \varepsilon_\Omega(\xi) w'(\xi) d\xi = \langle K * \hat{u}, v' \rangle + \langle f - g - j, v' \rangle \tag{C.2}$$

y una constante genérica $M > 0$, independiente de h e i , con la propiedad que

$$\|\varepsilon_\Omega\|_\infty < Mh^{\lambda+2N} \tag{C.3}$$

Aquí, $\lambda = \begin{cases} 0 & \text{si } b + \frac{da}{dx} = 0 \text{ o } N = G - 1 = 1 \\ -1 & \text{en el resto de los casos} \end{cases}$

Demostración.- Este Teorema será demostrado a partir de una secuencia de lemas que serán enunciados a continuación.

Para formular el primero, es necesario considerar la ecuación elíptica adjunta en una dimensión escrita de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}^* w = \hat{a} \frac{d^2 w}{dx^2} + \hat{b} \frac{dw}{dx} + \hat{c} w = 0 \tag{C.4}$$

donde

$$\hat{a} = -a; \hat{b} = -(b + \frac{da}{dx}); \hat{c} = c \tag{C.5}$$

Sea $w \in D$, una función que satisface la Ec.(C.4) en un subintervalo (x_{i-1}, x_i) , anulándose fuera del mismo, y sujeta a las condiciones de frontera:

$$w(x_{i-1}) = 0; \quad \text{y} \quad w(x_i) = 1; \tag{C.6}$$

Por otro lado, sea $\hat{w}(x)$ la aproximación polinomial de w , de grado $G \geq 2$, que satisface $G-1$ condiciones ortogonales de colocación en los puntos Gaussianos. Y definamos la función residuo $r(x)$ como

$$r(x) \equiv \mathcal{L}^* w(x) - \mathcal{L}^* \hat{w}(x) = -\mathcal{L}^* \hat{w}(x) \tag{C.7}$$

Entonces,

Lema 1:- Existe una cota para la función $hr(x)$, independiente de h e $i=1, \dots, E$. Además,

lo mismo se cumple para $r(x)$ cuando $b + \frac{da}{dx} \equiv 0$ ó $G=2$.

Prueba:- Sea ξ dado por

$$\xi = \frac{x - x_{r-1}}{x_i - x_{r-1}} \tag{C.8}$$

Observe que ξ satisface las condiciones de frontera Ec.(C.6). La expresión polinomial de $\hat{w}(x)$ es:

$$\hat{w}(x) \equiv \sum_{j=1}^G A_j \xi^j \tag{C.9}$$

Los coeficientes A_j ($j=1, \dots, G$) deben satisfacer las siguientes condiciones:

$$\sum_{j=1}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1) \frac{\xi^{j-2}}{h^2} + \frac{\hat{b}}{h} j \xi^{j-1} + \hat{c} \xi^j \right\} A_j = 0 \tag{C.10}$$

en $G-1$ puntos de colocación, y además

$$\sum_{j=1}^G A_j = 1 \tag{C.11}$$

debido a la segunda condición de frontera. De manera más explícita, la Ec.(C.10) se expresa:

$$\sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1) \frac{\xi^{j-2}}{h^2} + \frac{\hat{b}}{h} j \xi^{j-1} + \hat{c} \xi^j \right\} A_j + \left(\frac{\hat{b}}{h} + \hat{c} \xi \right) A_1 = 0 \tag{C.12}$$

Usando la Ec.(C.11), resulta que

$$A_1 = 1 - \sum_{j=2}^G A_j \tag{C.13}$$

y por lo tanto

$$\sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1) \frac{\xi^{j-2}}{h^2} + \frac{\hat{b}}{h} (j\xi^{j-1} - 1) + \hat{c}(\xi^j - \xi) \right\} A_j + \frac{\hat{b}}{h} + \hat{c}\xi = 0 \quad (C.14)$$

Observe que los coeficientes A_j , ($j=2, \dots, G$) pueden ser determinados por la condición de que la Ec. (C.14) sea satisfecha en $G-1$ puntos de colocación. Además, luego de multiplicar por h^2 , se puede ver que

$$h^2 r(x) \equiv \sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1)\xi^{j-2} + \hat{b}h(j\xi^{j-1} - 1) + \hat{c}h^2(\xi^j - \xi) \right\} A_j + \hat{b}h + \hat{c}h^2\xi \quad (C.15)$$

y por lo tanto en los puntos de colocación se debe cumplir que

$$\sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1)\xi^{j-2} + \hat{b}h(j\xi^{j-1} - 1) + \hat{c}h^2(\xi^j - \xi) \right\} A_j = -\hat{b}h - \hat{c}h^2\xi \quad (C.16)$$

La única solución de este sistema de ecuaciones cuando $h=0$, es $A_2 = \dots = A_G = 0$, en ese caso $A_1 = 1$. Entonces, usando este hecho, se puede mostrar que existe una constante genérica $M > 0$, independiente de h , tal que $|A_j| < Mh$, para $j=2, \dots, G$. Por lo tanto, la función

$$hr(x) \equiv \sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1)\xi^{j-2} + \hat{b}h(j\xi^{j-1} - 1) + \hat{c}h^2(\xi^j - \xi) \right\} \frac{A_j}{h} + \hat{b} + \hat{c}h\xi \quad (C.17)$$

esta acotada, ya que A_j/h lo está, $\forall j \geq 2$.

Cuando $G=2$,

$$h^2 r(x) = \left\{ 2\hat{a} + h\hat{b}(2\xi - 1) + h^2\hat{c}(\xi^2 - \xi) \right\} A_2 + \hat{b}h + h^2\hat{c}\xi \quad (C.18)$$

y evaluando en el único punto de colocación ($\xi_c = 1/2$), esto es:

$$h^2 r(x) = \left\{ 2\hat{a}^* + h\hat{b}^*(2\xi_c - 1) + h^2\hat{c}^*(\xi_c^2 - \xi_c) \right\} A_2 + \hat{b}^*h + h^2\hat{c}^*\xi_c = 0 \quad (C.19)$$

donde \hat{a}^* , \hat{b}^* and \hat{c}^* , son los valores de \hat{a} , \hat{b} and \hat{c} , en el punto de colocación respectivamente. Substrayendo esta última ecuación de la Ec. (C.18), se puede mostrar que $r(x)$ está acotada cuando $a(x)$ es Lipschitz continua.

Finalmente, cuando $\hat{b} \equiv 0$, se tiene:

$$h^2 r(x) \equiv \sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1)\xi^{j-2} + \hat{c}h^2(\xi^j - \xi) \right\} A_j + \hat{c}h^2\xi \quad (C.20)$$

y se puede ver que A_j/h^2 está acotada para $j=2,\dots,G$. Entonces,

$$r(x) \equiv \sum_{j=2}^G \left\{ \hat{a}_j(j-1)\xi^{j-2} + \hat{c}h^2(\xi^j - \xi) \right\} \frac{A_j}{h^2} + \hat{c}\xi \tag{C.21}$$

resulta también acotada.

Recordando la definición de λ dada en el Teorema C.1, este Lema puede ser resumido mediante la ecuación:

$$\|r\|_\infty = O(h^\lambda) \tag{C.22}$$

Lema 2:- Sea $v' \equiv w' - \hat{w}'$, entonces

$$\langle K^* \hat{u}, v' \rangle + \langle f - g - j, v' \rangle = O(h^{\lambda+2N+1}) \tag{C.23}$$

Prueba:- Sea $G^i(x, \xi)$ la función de Green para cada intervalo (x_{i-1}, x_i) , $i=1,\dots,E$, que satisface la ecuación homogénea (C.4) y las condiciones de frontera

$$G^i(x_{i-1}, \xi) = G^i(x_i, \xi) = 0 \tag{C.24}$$

Se puede mostrar que existe una constante genérica $M' \geq 0$, tal que

$$\begin{aligned} |G^i(x, \xi)| &\leq M'h; & \text{y} & \quad |G^{i+1}(x, \xi)| \leq M'h \\ \left| \frac{dG^i}{dx}(x, \xi) \right| &\leq M' & \text{y} & \quad \left| \frac{dG^{i+1}}{dx}(x, \xi) \right| \leq M' \end{aligned} \tag{C.25}$$

Se define a $r^i \equiv \mathcal{L}^* v^i$ y observe que el soporte de $v^i \equiv w^i - \hat{w}^i$, así como de r^i es el subintervalo (x_{i-1}, x_{i+1}) . Además v^i se anula en los nodos

$$v^i(x_{i-1}) = v^i(x_i) = v^i(x_{i+1}) = 0 \tag{C.26}$$

Usando las Ecs.(C.25) y el Lema 1, se puede mostrar que (ver [86], p.307)

$$v^i(x) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} G^i(x, \xi) r^i(\xi) d\xi = O(h^{\lambda+2N+2}); \quad \text{para } x \in (x_{i-1}, x_i) \tag{C.27}$$

mientras que

$$\frac{dv^i}{dx}(x) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dG^i}{dx}(x, \xi) r^i(\xi) d\xi = O(h^{\lambda+2N+1}); \quad \text{para } x \in (x_{i-1}, x_i) \tag{C.28}$$

y se cumplen relaciones similares para $x \in (x_i, x_{i+1})$. Por lo tanto:

$$\langle f, v' \rangle = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} v^i f_n dx = O(h^{\lambda+2N+2}) \tag{C.29}$$

$$\langle g, v' \rangle = u_l \left(a \frac{dv'}{dx} \right)_l - u_0 \left(a \frac{dv'}{dx} \right)_0 = O(h^{\lambda+2N+1}) \quad (C.30)$$

$$\langle j^0, v' \rangle = - \sum_{k=1}^{k_{m+1}} j_k^0 \left(a \frac{dv'}{dx} + bv' \right)_k = O(h^{\lambda+2N+1}) \quad (C.31)$$

$$\langle j^1, v' \rangle = - \sum_{k=1}^{k_{m+1}} j_k^1 v'_k = O(h^{\lambda+2N+1}) \quad (C.32)$$

$$\langle K^0 v', \hat{u} \rangle = \sum_{k=1}^{k_{m+1}} \hat{u}_k \left[a \frac{dv'}{dx} + bv' \right]_k = O(h^{\lambda+2N+1}) \quad (C.33)$$

y

$$\langle K^1 v', \hat{u} \rangle = - \sum_{k=1}^{k_{m+1}} \overbrace{\left(a \frac{d\hat{u}}{dx} \right)_k}^{\cdot} [v']_k = 0 \quad (C.34)$$

Entonces

$$\langle K * \hat{u}, v' \rangle + \langle f - g - j, v' \rangle = O(h^{\lambda+2N+1}) \quad (C.35)$$

Lema 3:- Las funciones especializadas de peso w^i , se pueden escribir en la siguiente forma:

$$w^i(x) = \ell_{i,j-1}(x) + s^i(x); \quad x_{i-1} < x < x_i \quad (C.36)$$

y

$$w^i(x) = \ell_{i,j+1}(x) + s^i(x); \quad x_i < x < x_{i+1} \quad (C.37)$$

Aquí $\ell_{i,j-1}(x) = \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}$, $\ell_{i,j+1}(x) = \frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}$ y $s^i(x) = \ell_{i,j-1}(x)\ell_{i,j+1}(x)P_i(x)$, donde $P_i(x)$ - es

un polinomio de grado $G-2$ definido en el intervalo.

Entonces, existe un número $M > 0$, tal que

$$\|s^i\|_{\infty} \leq Mh \quad (C.38)$$

Prueba:- En el intervalo (x_{i-1}, x_i) , la función s^i , satisface:

$$\hat{a} \frac{d^2 s^i}{dx^2} + \hat{b} \frac{ds^i}{dx} + \hat{c} s^i = -\frac{\hat{b}}{h} - \hat{c} \ell_{i,j-1} \quad (C.39)$$

y

$$s^i(x_{i-1}) = s^i(x_i) = 0 \quad (C.40)$$

Por lo que

$$hs'(x) = - \int_0^t \{ \hat{b} + h\hat{c}t_{i-1} \} G'(x, \xi) d\xi: \text{ para } x \in (x_{i-1}, x_i) \tag{C.41}$$

y entonces

$$h|s'(x)| \leq M' \|\hat{b}\|_{\infty} h^2 + M'' \|\hat{c}\|_{\infty} h^3; \text{ para } x \in (x_{i-1}, x_i) \tag{C.42}$$

donde M' y M'' , son constantes genéricas adecuadas. De manera análoga, relaciones similares se cumplen para el intervalo (x_i, x_{i+1}) , y por lo tanto, de ahí implica que se cumpla el Lema 3.

Lema 4:- Existe un número $M > 0$, independiente de h , tal que para cualquier sistema dado de números q^i ($i=1, \dots, E-1$), existe una función $\varepsilon_{\Omega}(x) \in H^0(0,1)$ tal que para cada $i=1, \dots, E-1$, se tiene que:

$$\int_0^t \varepsilon_{\Omega}(x) w'(x) dx = q^i \tag{C.43}$$

y

$$h \|\varepsilon_{\Omega}\|_{\infty} \leq M \max_i |q^i| \tag{C.44}$$

Prueba:- Efectivamente, se puede ver que cuando existe una constante $M > 0$, entonces existen muchas funciones que pertenecen a $H^0(0,1)$ las cuales satisfacen la Ec. (C.43) y la restricción (C.44). Entonces resulta suficiente para probar el Lema que se muestre una de tales funciones. La notación siguiente será usada:

Dado cualquier par de funciones $p, s \in H^0(0,1)$:

$$(p, s) = \int_0^t p(\xi) s(\xi) d\xi \tag{C.45}$$

$$(p, s) = \int_0^t p(\xi) s(\xi) d\xi \tag{C.46}$$

Entonces, para cada $i=1, \dots, E$, se introducen las siguientes funciones auxiliares $\varpi^i(x) \in H^0(0,1)$, las cuales están definidas en el intervalo (x_{i-1}, x_i) por:

$$\tilde{w}^i(x) = w^i(x); \quad \tilde{w}^E(x) = 0; \quad (\text{C.47})$$

y cuando $i=2, \dots, E-1$ por:

$$\tilde{w}^i(x) = w^i(x) + \rho^i w^{i-1}(x) \quad (\text{C.48})$$

donde

$$\rho^i = -\frac{(w^{i-1}, w^i)_i}{(w^{i-1}, w^{i-1})_i} \quad (\text{C.49})$$

En adición, para cada $i=1, \dots, E$, $\tilde{w}^i(x)$ se anula idénticamente fuera del intervalo (x_{i-1}, x_i) .

Entonces, observe que el soporte de \tilde{w}^i es (x_{i-1}, x_i) , mientras que de w^i es (x_{i-1}, x_{i+1}) .

También, observe que $(\tilde{w}^i, w^{i-1})_i = 0$.

Si se define

$$\varepsilon_\Omega(x) = A^i \tilde{w}^i(x); \quad x_{i-1} < x < x_i \quad (\text{C.50})$$

donde $A^i = \mu_i q^i$ y $\mu_i = \frac{1}{(\tilde{w}^i, w^i)_i}$.

No es difícil verificar que esta definición de $\varepsilon_\Omega(x)$ satisface la Eq.(C.2). En efecto, para cada $i=1, \dots, E-1$:

$$\begin{aligned} \int \varepsilon_\Omega(x) w^i(x) dx &= \sum_{j=1}^E (\varepsilon_\Omega, w^j)_j = (\varepsilon_\Omega, w^i)_i + (\varepsilon_\Omega, w^i)_{i+1} = \\ & A^i (\tilde{w}^i, w^i)_i + A^{i+1} (\tilde{w}^{i+1}, w^i)_{i+1} = A^i (\tilde{w}^i, w^i)_i = q^i \end{aligned} \quad (\text{C.51})$$

En vista de la Ec.(C.50), está claro que

$$\|\varepsilon_\Omega\|_\infty \leq (\max_i |\mu_i|) (\max_i \|\tilde{w}^i\|) (\max_i |q^i|) \quad (\text{C.52})$$

Usando el Lema 3 se puede ver que

$$\max_i \|\tilde{w}^i\|_\infty \leq 1 + O(h) \quad (\text{C.53})$$

y

$$h\mu_i = 4 + O(h) \quad (\text{C.54})$$

Por lo tanto

$$h\|\varepsilon_\Omega\| \leq \max_i |q^i| \{4 + O(h)\} \quad (\text{C.55})$$

Quedando el lema demostrado.

De manera directa el Teorema C.1 queda demostrado si aplicamos en forma conjunta los Lemmas 2 y 4.

Sean \hat{u} y \hat{w}' las aproximaciones de u y w' , respectivamente. Además, definimos

$$e(x) = u(x) - \hat{u}(x) \quad \text{y} \quad v'(x) = w'(x) - \hat{w}'(x) \quad (\text{C.56})$$

y observe que el soporte de $v'(x)$, está contenido en (x_{i-1}, x_{i+1}) . Además, esta función se anula en x_{i-1} , x_i y x_{i+1} .

Se cumple según Ec.(i) que

$$- \langle K * u, w' \rangle = \langle f - g - j, w' \rangle; \quad \forall i = 1, \dots, E-1 \quad (\text{C.57})$$

Por otra parte, una solución aproximada en las fronteras interiores, de acuerdo con la Ec.(i), satisface

$$- \langle K * \hat{u}, \hat{w}' \rangle = \langle f - g - j, \hat{w}' \rangle; \quad \forall i = 1, \dots, E-1 \quad (\text{C.58})$$

que se puede describir como

$$- \langle K * \hat{u}, w' \rangle + \langle K * \hat{u}, v' \rangle = \langle f - g - j, \hat{w}' \rangle; \quad \forall i = 1, \dots, E-1 \quad (\text{C.59})$$

Restando la Ec.(C.59) de la Ec.(C.57), se obtiene:

$$- \langle K * e, w' \rangle = \langle K * \hat{u}, v' \rangle + \langle f - g - j, v' \rangle; \quad \forall i = 1, \dots, E-1 \quad (\text{C.60})$$

Por el Teorema C.1, existe una función $\varepsilon_\Omega(x) \in H^0(0,1)$ y una constante genérica M , tal que $\|\varepsilon_\Omega\|_\infty < Mh^{\lambda+2N}$ con la propiedad que, para todo $i = 1, \dots, E-1$, se tiene:

$$\int_0^1 \varepsilon_\Omega(\xi) w'(\xi) d\xi = \langle K * \hat{u}, v' \rangle + \langle f - g - j, v' \rangle \quad (\text{C.61})$$

Aquí, $\lambda=0$ si $b + \frac{da}{dx} = 0$, o si $G=2$ (es decir, $N=1$), y $\lambda=-1$ en caso contrario. Usando esta función, se define la función $\varrho(x)$ por:

$$\hat{e}(x) = \int_0^1 G(x, \xi) \varepsilon_\Omega(\xi) d\xi \quad (\text{C.62})$$

donde $G(x, \xi)$ es la función de Green para el problema de contorno Section 3, cuando los valores en la frontera y las condiciones de salto se anulan. Con esta definición, $\varrho(x)$ satisface la ecuación diferencial

$$\mathcal{L}\hat{e}(x) = \varepsilon_{\Omega}(x); \tag{C.63}$$

junto con las condiciones de frontera

$$\hat{e}(0) = \hat{e}(1) = 0; \tag{C.64}$$

y las condiciones de continuidad

$$[\hat{e}]_i = \left[a \frac{d\hat{e}}{dx} \right]_i = 0; \tag{C.65}$$

Por lo tanto, la Ec.(3.7) puede ser aplicada a \hat{e} , con $g, j \in D^*$, igual a cero y

$$\langle f, w' \rangle \equiv \int_0^1 \varepsilon_{\Omega}(\xi) w(\xi) d\xi \tag{C.66}$$

Lo cual implica que

$$-\langle K^* \hat{e}, w' \rangle = \int_0^1 \varepsilon_{\Omega}(\xi) w'(\xi) d\xi; \quad \forall i = 1, \dots, E-1 \tag{C.67}$$

Usando éste resultado junto con las Ecs. (C.60) y (C.61), se puede ver que

$$-\langle K^* \hat{e}, w' \rangle = -\langle K^* e, w' \rangle; \quad \forall i = 1, \dots, E-1 \tag{C.68}$$

Esto implica que

$$K^* \hat{e} = K^* e; \tag{C.69}$$

Ya que el sistema de funciones de peso $\{w^1, \dots, w^{E-1}\}$, es TH-completo. Y por lo tanto,

$$\hat{e}(x_i) = e(x_i); \tag{C.70}$$

Finalmente resulta que

$$\begin{aligned} |e(x_i)| &= |\hat{e}(x_i)| = \left| \int_0^1 G(x_i, \xi) \varepsilon_{\Omega}(\xi) d\xi \right| \leq \\ &\|\varepsilon_{\Omega}\|_{\infty} \int_0^1 |G(x_i, \xi)| d\xi \leq M' \|\varepsilon_{\Omega}\|_{\infty} < M' M h^{\lambda-2N} \end{aligned} \tag{C.71}$$

En conclusión, se ha mostrado que el error de colocación TH, cuando las funciones de peso son construidas aplicando colocación ortogonal en polinomios, es $O(h^{2N})$ si $\frac{da}{dx} + b = 0$ o $N=1$, y este es $O(h^{2N-1})$ en caso contrario. Donde, N es el número de puntos de colocación en cada subintervalo de la partición. Recuerde que el grado G del polinomio aproximante está dado por $G=N+1$.