

Herramientas de software para resolver  
Ecuaciones en Derivadas Parciales  
utilizando el Método de Elementos Finitos

Alejandra C. Cáceres R.

Mayo 2011





Universidad de Carabobo  
Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología  
Departamento de Matemáticas



**Herramientas de software para resolver  
Ecuaciones en Derivadas Parciales  
utilizando el Método de Elementos Finitos  
Autor: Alejandra C. Cáceres R.**

Informe final de pasantía presentado ante el Departamento de Matemáticas de la  
Facultad Experimental de Ciencia y Tecnología de la Universidad de Carabobo

**Tutor Académico: Prof. Carlos Cadenas**  
**Tutor en la empresa: Prof. Carlos Cadenas**

Valencia, 2011



# Índice general

|                                                                        |           |
|------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>INTRODUCCIÓN</b>                                                    | <b>1</b>  |
| <b>1. Descripción de la empresa</b>                                    | <b>3</b>  |
| 1.1. Nombre y Ubicación de la Empresa . . . . .                        | 3         |
| 1.2. Misión . . . . .                                                  | 3         |
| 1.3. Visión . . . . .                                                  | 4         |
| <b>2. DESCRIPCIÓN DE LAS TAREAS REALIZADAS</b>                         | <b>5</b>  |
| <b>3. TAREA MÁS RELEVANTE</b>                                          | <b>11</b> |
| 3.1. Formulación Semi-discreta . . . . .                               | 12        |
| 3.1.1. Caso parabólico . . . . .                                       | 14        |
| 3.1.2. Caso elíptico . . . . .                                         | 17        |
| 3.1.3. Caso general . . . . .                                          | 18        |
| 3.2. Esquemas completamente Discretizados . . . . .                    | 20        |
| 3.3. Matrices Jacobianas y Jacobianos de transformaciones . . . . .    | 21        |
| 3.4. Cálculo de las matrices en el elemento de referencia . . . . .    | 23        |
| 3.4.1. Resolución numérica de las matrices del Caso Parabólico . . . . | 23        |
| 3.4.2. Resolución numérica de las matrices del Caso General . . . . .  | 26        |
| <b>4. ALGORITMOS DESARROLLADOS EN LA PASANTÍA</b>                      | <b>30</b> |

## ÍNDICE GENERAL

---

|                                       |           |
|---------------------------------------|-----------|
| <b>CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</b> | <b>35</b> |
| <b>BIBLIOGRAFÍA</b>                   | <b>37</b> |
| <b>Bibliografía</b>                   | <b>37</b> |

# INTRODUCCIÓN

Muchos fenómenos en la naturaleza, ya sean biológicos, geológicos o mecánicos pueden ser descritos mediante las leyes de la física, usando ecuaciones diferenciales o integrales que relacionan los factores de interés. Por esta razón, es necesario plantear modelos matemáticos para dichos fenómenos y tener métodos para resolverlos. La gran mayoría de las veces una solución analítica no es posible, ya sea porque no existe dicha solución o porque resulta muy complejo su cálculo. Así, la solución obtenida mediante métodos numéricos resulta fundamental y de suma importancia. Esto nos conduce a la búsqueda de herramientas computacionales eficientes que nos permitan resolver dichos problemas.

El método de elementos finitos es un método numérico general usado para hallar una aproximación a la solución de ecuaciones en derivadas parciales sobre geometrías complicadas, y muy utilizado en diversos problemas de la ingeniería y la física.

Desde su aparición en el año 1943 hasta la actualidad, se ha convertido en una de las mejores herramientas usadas para resolver ecuaciones en derivadas parciales con muchas ventajas sobre métodos anteriores, tales como el fácil manejo de condiciones de contorno generales y geometrías complejas, la posibilidad de obtener de forma concreta el error de estimación en la solución dada por el método, su sólido fundamento teórico y, debido a su clara estructura y versatilidad, el método de elementos finitos hace posible el desarrollo de softwares generales para aplicarlo a

problemas específicos.

Esta pasantía tuvo como objetivo, contribuir al desarrollo de herramientas computacionales que faciliten la implementación del método de elementos finitos a ecuaciones en derivadas parciales generales; esto, estudiando el método, aplicándolo a una ecuación en derivadas parciales en 2D y con términos de difusión, convección y reacción, y obteniéndose rutinas en Lenguaje C que permiten hallar las matrices involucradas en el esquema semi-discreto de 3 casos de ecuaciones en derivadas parciales, una parabólica, una elíptica y el caso general.

Con el fin de resumir y dar una idea global de las tareas realizadas en dicha pasantía, se estructuró este informe de la forma siguiente: en el capítulo 2, se describen las tareas realizadas por el alumno, desde la revisión bibliográfica hasta la implementación de los algoritmos desarrollados; en el capítulo 3 se explica brevemente la tarea técnica más relevante, que en nuestro caso es la formulación del método de elementos finitos para los 3 casos antes mencionados y la obtención de expresiones que permitan la implementación computacional del método; Por último, en el capítulo 4, se hace una breve descripción de algunos algoritmos desarrollados en la pasantía.

# Capítulo 1

## Descripción de la empresa

### 1.1. Nombre y Ubicación de la Empresa

Departamento de Matemáticas, Universidad de Carabobo ubicada en el sector de Bárbula, al norte de la ciudad de Valencia.

### 1.2. Misión

Forma Matemáticos con conocimientos sólidos, con capacidad de comunicación para el trabajo interdisciplinario y preocupado por su medio social. Capaz de adaptarse a los cambios tecnológicos y de conocimientos significativos en sus áreas de aplicación. El Departamento de Matemáticas garantizará la ejecución de un plan de estudio en continua revisión curricular y adaptado a las necesidades del entorno productivo, bajo la conducción de docentes debidamente capacitados, con instalaciones dotadas con tecnología de punta.

Realiza investigación en áreas prioritarias para el desarrollo del país tales como: Biomedicina, Aplicaciones Matemáticas al Sector Petrolero, Ingeniería Didáctica, entre otras; interactuando con organismos nacionales e internacionales.

El Departamento de Matemáticas participa activamente en la formación de profesionales de las carreras de la FaCyT (Química, Computación, Física, Biología y

Matemáticas) mediante un servicio de docencia en áreas propias de su competencia y apoyo a la investigación.

El Departamento de Matemáticas se vincula con la comunidad a través del diseño y desarrollo de proyectos sociales, de igual forma divulga resultados de estudios que permitan el crecimiento económico y tecnológico del país. Por otra parte, colabora con instituciones educativas en la realización de proyectos de iniciación científica y tecnológica.

### **1.3. Visión**

El Departamento de Matemáticas será un ente modelo, de referencia a nivel nacional e internacional, en la formación de matemáticos con una estrecha relación con el entorno productivo y de generación de conocimientos.

## Capítulo 2

# Descripción general de las tareas realizadas por el alumno

### 1. Selección del lenguaje de programación a utilizar

Se decidió implementar los programas relacionados con la generación de las matrices de conectividades y coordenadas de los dominios estudiados, generación de los puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto* en 1D, integración numérica y construcción de las matrices involucradas en el esquema de elementos finitos, en Lenguaje C debido a su potencia y su comprobada eficiencia en el manejo de matrices, rapidez de cómputo, disponibilidad de rutinas diseñadas para manejar matrices *sparse* y resolver sistemas de ecuaciones lineales *sparse* en dicho lenguaje y por los conocimientos y experiencias previas del pasante sobre el mismo.

Por otra parte, las rutinas relacionadas con el gráfico de las mallas rectangulares y triangulares, se implementaron en Matlab debido a las facilidades que presenta el mismo en el manejo de las herramientas de graficación.

En el apéndice se podrá encontrar un resumen para cada algoritmo desarrollado que incluye: entradas, salidas, y una sinapsis del cuerpo central del algoritmo.

## 2. Estudio y discusión del método de Elementos Finitos (MEF)

El método de los elementos finitos es un método numérico general para la aproximación de soluciones de ecuaciones en derivadas parciales sobre geometrías complicadas, muy utilizado en diversos problemas de la ingeniería y la física.

El MEF permite obtener una solución numérica aproximada sobre un dominio (medio continuo), sobre el que están definidas ciertas ecuaciones diferenciales en forma débil o integral que caracterizan el comportamiento físico del problema, dividiéndolo en un número elevado de subdominios no-intersectantes entre sí denominados elementos finitos. El conjunto de elementos finitos forma una partición del dominio también denominada discretización. Dentro de cada elemento se distinguen una serie de puntos representativos llamados "nodos". Dos nodos son adyacentes si pertenecen al mismo elemento finito; además, un nodo sobre la frontera de un elemento finito puede pertenecer a varios elementos. El conjunto de nodos considerando sus relaciones de adyacencia se llama "malla".

Los cálculos se realizan sobre una malla de puntos (llamados nodos), que sirven a su vez de base para la discretización del dominio en elementos finitos. De acuerdo con estas relaciones de adyacencia o conectividad se relaciona el valor de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo, denominadas grados de libertad. El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable y los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales. La matriz de dicho sistema de ecuaciones se llama matriz de rigidez del sistema. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos.

El método de los elementos finitos es muy usado debido a su generalidad y a la facilidad de introducir dominios de cálculo complejos (en dos o tres dimensiones). Una importante propiedad del método es la convergencia; si

se consideran particiones de elementos finitos sucesivamente más finas o se aumenta el grado de los polinomios de aproximación, la solución numérica calculada es una mejor aproximación y, además, converge rápidamente hacia la solución exacta del sistema de ecuaciones.

### Formulación débil

La formulación débil (o formulación variacional) de un problema definido mediante ecuaciones diferenciales es una forma alternativa en que dichas ecuaciones se escriben en forma integral, dando lugar a ecuaciones tratables mediante los métodos del álgebra lineal sobre un espacio vectorial de dimensión infinita o espacio funcional.

Consideremos una ecuación diferencial y unas condiciones de contorno de la forma:

$$\begin{aligned} L(u) - f &= 0 \\ u|_{\Gamma} &= u_0 \quad u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad \Gamma = \partial\Omega \end{aligned}$$

Donde  $L$  es un operador diferencial,  $u$  es la función incógnita en la ecuación diferencial y  $f$  es una función conocida.

Sea  $v \in L^2(\Omega)$ . Si multiplicamos la ecuación diferencial por la función  $v$ , que se denomina función de prueba, obtenemos:

$$(L(u) - f)v = 0$$

e integrando sobre el dominio  $\Omega$  tenemos la forma integral:

$$\int_{\Omega} (L(u) - f)v d\mathbf{x} = 0$$

La solución de la ecuación diferencial original también es solución de la forma integral anterior para todas las funciones  $v \in L^2(\Omega)$ . Esto se resume de la siguiente manera, debemos encontrar  $u$  tal que

$$\int_{\Omega} (L(u) - f)v d\mathbf{x} = 0 \quad \forall v \in L^2(\Omega)$$

A este problema se le denomina formulación variacional o formulación débil y su solución es equivalente a la solución del problema original.

Sea  $u \approx \bar{u} = \sum_{i=1}^M \alpha_i \varphi_i$  con  $\varphi_i$  en el espacio de Sobolev. En otras palabras, estamos aproximando  $u$  con una función  $\bar{u}$  que pertenece a un subespacio de dimensión finita  $V_h$  de un espacio de Sobolev  $H^1$  y que tiene como base el conjunto:  $\beta_{V_h} = \{\varphi_i, i \in \{1, \dots, M\}\}$ . Y por lo tanto el problema se reduce en hallar  $\alpha_i, i \in \{1, \dots, M\}$  tal que

$$\int_{\Omega} (L(\bar{u}) - f)v_j d\mathbf{x} = 0 \quad \forall v_j \in L^2(\Omega) \text{ con } j \in \{1, \dots, M\}$$

Otra manera de plantear este problema es a través del método de Residuos Ponderados. Como  $\bar{u}$  es una aproximación de  $u$  y esta cumple con  $L(u) - f = 0$ , si llamamos  $L(\bar{u}) - f = R \neq 0$  ( $R$  es el Residuo), entonces el método de residuos ponderados requiere que los parámetros  $\alpha_i, i \in \{1, \dots, M\}$  sean determinados de tal forma que se satisfaga

$$\int_{\Omega} \omega R d\mathbf{x} = 0 \quad \forall j \in \{1, \dots, M\}$$

donde la función  $\omega$  es una función de peso arbitraria. Notemos que la expresión encontrada es la misma que la formulación variacional (con  $\omega = v$ ).

Dicha función de prueba puede ser elegida de muchas maneras obteniéndose distintos métodos. Si tomamos  $\omega \in V_h$ , es decir,  $\omega = \sum_{j=1}^M \beta_j \varphi_j$  entonces el problema se convierte en:

$$\sum_{j=1}^M \beta_j \int_{\Omega} (L(\bar{u}) - f) \varphi_j d\mathbf{x} = 0$$

y como este requerimiento lo debe satisfacer cualquier función  $v \in V_h$  entonces se debe cumplir para todas las posibles elecciones de los escalares  $\beta_j, j \in \{1, \dots, M\}$ . Luego, en particular

$$\int_{\Omega} (L(\bar{u}) - f) \varphi_j d\mathbf{x} = 0 \quad j \in \{1, \dots, M\} \quad (2.1)$$

Así cuando las funciones de forma son iguales a las funciones de prueba entonces el método se denomina Método de *Galerkin* (el método de Elementos Finitos es un método de *Galerkin*).

Una vez fijadas dichas funciones, que tienden a tomarse como una familia de polinomios completos, entonces para cada  $j \in \{1, \dots, M\}$  se obtiene una ecuación (de la ecuación (2.1)) con incógnitas  $\alpha_i, i \in 1, \dots, M$ , armando un sistema de ecuaciones lineales para cada uno de los elementos. Luego dichos sistemas se ensamblan en un sistema de ecuaciones que involucra todos los elementos del dominio. Al resolver dicho sistema se hallan los escalares  $\alpha_i, i \in 1, \dots, M$  de la combinación lineal de las funciones de  $\beta_{V_h}$  y, por lo tanto, a la función aproximación de  $u$ ,  $\bar{u}$ .

3. Generación de mallas
  - a) Elaboración de un código para generar mallas rectangulares uniformes en dominios rectangulares y tipo L
  - b) Elaboración de un código para generar mallas triangulares uniformes en dominios rectangulares y tipo L
  - c) Elaboración de una rutina para graficar las mallas rectangulares y triangulares
4. Elaboración de rutinas para hallar los puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto* en el intervalo  $[-1, 1]$  y los respectivos pesos para integrar usando cuadratura gaussiana
5. Elaboración de rutinas para las matrices del elemento de referencia
  - a) Matrices de Masa, Convección y Reacción en el elemento de referencia rectangular
  - b) Matrices de Masa, Convección y Reacción en el elemento de referencia triangular
6. Elaboración de rutinas para las matrices en un elemento genérico
  - a) Elaboración de rutinas para los jacobianos de las transformaciones
  - b) Matrices de Masa, Convección y Reacción en un elemento genérico para mallas rectangulares
  - c) Matrices de Masa, Convección y Reacción en un elemento genérico para mallas triangulares
7. Elaboración del informe
8. Elaboración de la presentación

## Capítulo 3

# Descripción técnica de la tarea más relevante

En este capítulo se describirá el método de elementos finitos para tres ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, las cuales separaremos en tres casos: parabólico, elíptico y general. En la sección 3.1 se desarrollará la formulación semi-discreta para cada uno de los casos mencionados anteriormente. Básicamente el objetivo de dicha formulación es la discretización de las variables espaciales en cada uno de los problemas y la aplicación del método de Elementos Finitos para hallar los términos genéricos de las matrices involucradas en los esquemas. En el caso elíptico, tal y como se verá más adelante, obtendremos un esquema totalmente discretizado, debido a la ausencia de la derivada parcial de la función incognita con respecto al tiempo, lo que reduce el problema al sistema de ecuaciones lineales que se obtiene al aplicar el método de Elementos Finitos. En los dos casos restantes el esquema hallado con la formulación semi-discreta es continuo en el tiempo y por lo tanto es necesario usar un método para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (Euler, Crank-Nicholson, Runge-Kutta, etc.) para discretizarlos completamente. En la sección 3.2 se explica cómo usar el método implícito de Crank-Nicholson al caso parabólico.

En las siguientes secciones conseguiremos expresiones que nos permitan resolver numéricamente los elementos genéricos de las matrices encontradas en los esquemas

anteriores, desarrollando en cada uno de los casos las matrices de Rigidez, Masa y Convección. Así, en la sección 3.3 se obtendrán las Jacobianas y Jacobianos de las transformaciones que se usarán para facilitar el cálculo numérico de las integrales en cuestión. Y por último, en la sección 3.4, se obtendrán dichas expresiones en el elemento de referencia triangular.

En el caso rectangular se obtienen expresiones más simples ya que sólo es necesario un cambio de variable que viene dado por una transformación lineal de un elemento rectangular cualquiera al elemento de referencia.

### 3.1. Formulación Semi-discreta

En esta sección plantearemos la formulación semi-discreta para los casos parabólico, elíptico y general. En los casos parabólico y general la formulación se denomina semi-discreta ya que en el esquema matricial obtenido al usar elementos finitos en la discretización espacial, resultará en un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden en la variable temporal. Para resolver este tipo de problemas después de hallar el esquema semi-discreto, es necesario usar un esquema de Crank-Nicolson, Euler o Runge Kutta, que se explicará con más detalle en la próxima sección. En el caso elíptico, la función que acompaña a la primera derivada temporal es la función nula. Por lo tanto el esquema que se halla usando elementos finitos está totalmente discretizado.

En esta pasantía se consideró la siguiente ecuación diferencial:

$$\Phi \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla p) + b \cdot \nabla p + cp = f \quad \Omega \times J \quad (3.1)$$

sujeta a  $p = 0$  sobre  $\Gamma \times J$  y  $p(\cdot, 0) = p_0$  en  $\Omega$ , donde  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  es un dominio acotado con frontera  $\Gamma$ ,  $J = (0, T](T > 0)$  es el intervalo de tiempo de interés,  $\phi, k, c, f$  y  $p_0$  son funciones continuas de  $\mathbb{R}^2$  en  $\mathbb{R}$  y  $b = (b_1(x, y), b_2(x, y))$  con  $b_1$  y  $b_2$  funciones

continuas de  $\mathbb{R}^2$  en  $\mathbb{R}$ .

Considerando casos especiales para las funciones  $\Phi$  y  $k$  en la ecuación (3.1) se obtendrán los primeros dos casos. A continuación se encontrará una expresión para  $\int_{\Omega} w(\Delta \cdot v) d\mathbf{x}$  que será útil en las siguientes subsecciones.

Consideremos  $V = \{v : v \text{ continua en } \Omega, \frac{\partial v}{\partial x_1} \text{ y } \frac{\partial v}{\partial x_2} \text{ continuas a trozos y acotadas en } \Omega \text{ y } v = 0 \text{ en } \Gamma\} \subset H^1$

Si  $\eta = (\eta_1, \eta_2)$  es un vector unitario normal a  $\Gamma$  tenemos, por el teorema de la divergencia lo siguiente:

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot b) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} (b \cdot \eta) d\mathbf{l}$$

Así, si hacemos  $v, w \in V$ ,  $b^1 = (\frac{\partial v}{\partial x_1} w, 0)^T$  y  $b^2 = (0, \frac{\partial v}{\partial x_2} w)^T$ , por el teorema de la divergencia entonces

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot b^1) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} ((\frac{\partial v}{\partial x_1} w, 0) \cdot \eta) d\mathbf{l}$$

y

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot b^2) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} ((0, \frac{\partial v}{\partial x_2} w) \cdot \eta) d\mathbf{l}$$

Luego, para  $b^1$  y  $b^2$  obtenemos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial^2 v}{\partial x_1^2} w d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_1} \frac{\partial w}{\partial x_1} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} w \frac{\partial v}{\partial x_1} \eta_1 d\mathbf{l}$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial^2 v}{\partial x_2^2} w d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_2} \frac{\partial w}{\partial x_2} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} w \frac{\partial v}{\partial x_2} \eta_2 d\mathbf{l}$$

respectivamente.

Sumando miembro a miembro las ecuaciones obtenidas

$$\int_{\Omega} \frac{\partial^2 v}{\partial x_1^2} w d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\partial^2 v}{\partial x_2^2} w d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_1} \frac{\partial w}{\partial x_1} d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\partial v}{\partial x_2} \frac{\partial w}{\partial x_2} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} w \frac{\partial v}{\partial x_1} \eta_1 d\mathbf{l} + \int_{\Gamma} w \frac{\partial v}{\partial x_2} \eta_2 d\mathbf{l}$$

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x_2^2} \right) w d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \left( \frac{\partial v}{\partial x_1} \frac{\partial w}{\partial x_1} + \frac{\partial v}{\partial x_2} \frac{\partial w}{\partial x_2} \right) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} w \left( \frac{\partial v}{\partial x_1} \eta_1 + \frac{\partial v}{\partial x_2} \eta_2 \right) d\mathbf{l}$$

y como  $\frac{\partial v}{\partial \eta} = \frac{\partial v}{\partial x_1} \eta_1 + \frac{\partial v}{\partial x_2} \eta_2$  tenemos:

$$\int_{\Omega} w (\Delta \cdot v) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} w \frac{\partial v}{\partial \eta} d\mathbf{l} - \int_{\Omega} (\nabla v \cdot \nabla w) d\mathbf{x}$$

Expresión que usaremos al plantear los esquemas semi-discretos en cada uno de los casos siguientes.

### 3.1.1. Caso parabólico

Consideremos la ecuación diferencial:

$$\frac{\partial p}{\partial t} - \Delta p + b \cdot \nabla p + cp = f$$

Que se obtiene de la anterior haciendo  $\Phi = 1$  y  $k = \mathbb{I}$ . Sea  $v \in V = H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\Gamma} = 0\}$ . Al multiplicar  $v$  por la ecuación anterior obtenemos:

$$v \frac{\partial p}{\partial t} - v \Delta p + v b \cdot \nabla p + cpv = fv$$

ahora, integrando sobre  $\Omega$  y haciendo  $d\mathbf{x} = dx dy$ :

$$\int_{\Omega} v \frac{\partial p}{\partial t} d\mathbf{x} - \int_{\Omega} v (\Delta p) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} v (b \cdot \nabla p) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (cp) v d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f v d\mathbf{x}$$

Y como

$$\int_{\Omega} v (\Delta p) d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} v \frac{\partial p}{\partial \eta} d\mathbf{l} - \int_{\Omega} (\nabla p \cdot \nabla v) d\mathbf{x}$$

y  $v \in V$  ( $v = 0$  en  $\Gamma$ ) entonces, por la expresión encontrada en la sección anterior

$$\int_{\Omega} v(\Delta p) d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} (\nabla p \cdot \nabla v) d\mathbf{x}$$

Así que si consideramos la siguiente notación compacta:

$$a(\varphi, \psi) = \int_{\Omega} (\nabla \varphi \cdot \nabla \psi) d\mathbf{x}$$

y

$$(\varphi, \psi) = \int_{\Omega} (\varphi \psi) d\mathbf{x}$$

Y el problema queda planteado en su forma variacional:

$$\left( \frac{\partial p}{\partial t}, v \right) + a(p, v) + (b \nabla p, v) + (cp, v) = (f, v) \quad (3.2)$$

$$\forall v \in V, t \in J \text{ con } p(x, 0) = p_0(x) \quad \forall x \in \Omega$$

Si  $V_h$  es el subespacio de  $V$  de elementos finitos, es decir, que tiene como base  $\beta_{V_h} = \{\varphi_i : i \in \{1, \dots, M\}\}$  y si  $p_h : J \rightarrow V_h$  el planteamiento resulta en:

$$\left( \frac{\partial p_h}{\partial t}, v \right) + a(p_h, v) + (b \nabla p_h, v) + (cp_h, v) = (f, v) \quad (3.3)$$

$$\forall v \in V_h, t \in J \text{ con } (p_h(\cdot, v)) = (p_0(x), v) \quad \forall v \in V_h$$

Como este sistema está discretizado en espacio pero es continuo en tiempo entonces se denomina esquema Semi-discreto.

Ahora consideremos  $\beta_{V_h} = \{\varphi_i : i \in \{1, \dots, M\}\}$  que es la base del espacio de elemento finito y

$$p_h(x, t) = \sum_{i=1}^M p_i(t) \varphi_i(x), \quad (x, t) \in \Omega \times J$$

entonces si para  $j = 1, \dots, M$  hacemos  $v = \varphi_j$  en (II) y considerando que:

$$\frac{\partial p_h}{\partial t} = \sum_{i=1}^M \varphi_i(x) \frac{\partial p_i(t)}{\partial t}; \quad \frac{\partial p_h}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^M p_i(x)(t) \frac{\partial \varphi_i(x)}{\partial x_j}$$

resulta para  $j = 1, \dots, M$  y  $t \in J$

$$\begin{aligned} \left( \sum_{i=1}^M \varphi_i(x) \frac{\partial p_i(t)}{\partial t}, \varphi_j \right) &+ a \left( \sum_{i=1}^M p_i(t) \varphi_i(x), \varphi_j \right) \\ &+ \left( b \nabla \left( \sum_{i=1}^M p_i(t) \varphi_i(x) \right), \varphi_j \right) + \left( c \sum_{i=1}^M p_i(t) \varphi_i(x), \varphi_j \right) = (f, \varphi_j) \end{aligned}$$

con

$$\left( \sum_{i=1}^M p_i(0) \varphi_i, \varphi_j \right) = (p_0, \varphi_j)$$

y simplificando se tiene, para cada  $j \in \{1, \dots, M\}$ :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M \frac{\partial p_i(t)}{\partial t} (\varphi_i(x), \varphi_j(x)) &+ \sum_{i=1}^M p_i(t) a(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) \\ &+ \sum_{i=1}^M p_i(t) (b \cdot \nabla \varphi_i, \varphi_j) + \sum_{i=1}^M p_i(t) (c \varphi_i, \varphi_j) = (f, \varphi_j) \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^M p_i(0) (\varphi_i, \varphi_j) = (p_0, \varphi_j)$$

que en forma matricial se expresa:

$$M \frac{dp(t)}{dt} + (K + C + E)p(t) = f(t), t \in J$$

y  $Mp(0) = p_0$  Donde  $K, M, C$  y  $E$  son  $M \times M$  y  $p, f, p_0$  son:

$$\begin{aligned}
K &= (k_{ij}), & k_{ij} &= a(\varphi_i, \varphi_j) \\
M &= (m_{ij}), & m_{ij} &= (\varphi_i, \varphi_j) \\
C &= (c_{ij}), & c_{ij} &= (b \cdot (\nabla \varphi_i), \varphi_j) \\
E &= (e_{ij}), & e_{ij} &= (c \varphi_i, \varphi_j) \\
f &= (f_j), & f_j &= (f, \varphi_j) \\
p &= (p_j(t)), & p_0 &= ((p_0)_j) = (p_0, \varphi_j)
\end{aligned}$$

### 3.1.2. Caso elíptico

Supongamos  $\Phi = 0$  y  $k$  no constante con condiciones no homogéneas, sobre el mismo dominio y condiciones iniciales y de frontera; entonces la ecuación diferencial se reduce a:

$$-\nabla \cdot (k \nabla p) + b \cdot \nabla p + cp = f \quad \text{en } \Omega$$

Multiplicando por  $v$  e integrando en  $\Omega$  resulta:

$$-\int_{\Omega} v \nabla \cdot (k \nabla p) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} v (b \cdot \nabla p) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} v (cp) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} (fv) d\mathbf{x}$$

Luego, por el Teorema de Green sabemos que:

$$-\int_{\Omega} v \nabla \cdot (k \nabla p) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} k (\nabla v \cdot \nabla p) d\mathbf{x} - \int_{\Gamma} q_n (kv) ds$$

donde  $q_n$  es el término de flujo definido por:

$$q_n = n_x \frac{\partial p}{\partial x} + n_y \frac{\partial p}{\partial y}$$

y  $\mathbf{n} = (n_x, n_y)^T$  es normal a  $\Omega$ .

Notemos que aparece el término de flujo ya que estamos suponiendo que las condiciones de contorno no son homogéneas en el dominio  $\Omega$ , a diferencia del caso

anterior donde suponíamos  $p \in V$ .

Sustituyendo  $p = \sum_{i=1}^M p_i \varphi_i$  y  $v = \varphi_j$  en la expresión anterior, tenemos:

$$-\int_{\Omega} \phi_j \nabla \cdot \left( k \nabla \left( \sum_{i=1}^M p_i \varphi_i \right) \right) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^M p_i \int_{\Omega} k (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mathbf{x} - \sum_{i=1}^M p_i \int_{\Gamma} k \varphi_j \left( n_x \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + n_y \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) ds$$

Sabiendo esto y los términos obtenidos en el caso 1 tenemos que la ecuación diferencial considerada se transforma en:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M p_i \int_{\Omega} k (\nabla \varphi_j \cdot \nabla \varphi_i) d\mathbf{x} &- \sum_{i=1}^M p_i \int_{\Gamma} k \varphi_j \left( n_x \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + n_y \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) ds \\ &+ \sum_{i=1}^M p_i \int_{\Omega} (b \cdot \nabla \varphi_i) \phi_j d\mathbf{x} + \sum_{i=1}^M p_i \int_{\Omega} c (\phi_i \varphi_j) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f \varphi_j d\mathbf{x} \end{aligned}$$

Lo cual podemos escribir en notación matricial como:

$$(K - H + C + E)p = f$$

donde:

$$\begin{aligned} K &= (k_{ij}), & k_{ij} &= (k, \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) \\ H &= (h_{ij}), & h_{ij} &= \int_{\Gamma} k \varphi_j \left( n_x \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + n_y \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) ds \\ C &= (c_{ij}), & c_{ij} &= (b \cdot (\nabla \varphi_i), \varphi_j) \\ E &= (e_{ij}), & e_{ij} &= (c \varphi_i, \varphi_j) \\ f &= (f_j), & f_j &= (f, \varphi_j) \\ p &= (p_j), \end{aligned}$$

### 3.1.3. Caso general

Si suponemos  $\Phi$  no nula,  $k$  no constante, sobre el mismo dominio, condiciones iniciales y condiciones no homogéneas en la frontera, estamos considerando la siguiente ecuación:

$$\Phi \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla p) + b \cdot \nabla p + cp = f$$

Notemos que para hallar el esquema semidiscreto en este caso debemos ver el aporte de  $\Phi \frac{\partial p}{\partial t}$  y agregarlo al esquema anterior. Así, si  $p = \sum_{i=1}^M p_i(t) \varphi_i$  y  $v = \varphi_j$  se tiene:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} (\Phi v) \frac{\partial p}{\partial t} d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \Phi \frac{\partial (\sum_{i=1}^M p_i \varphi_i)}{\partial t} \varphi_j d\mathbf{x} \\
 &= \sum_{i=1}^M \frac{\partial p_i(t)}{\partial t} \int_{\Omega} \phi(\varphi_i \varphi_j) d\mathbf{x} \\
 &= \sum_{i=1}^M \frac{\partial p_i(t)}{\partial t} (\phi, \varphi_i) \varphi_j \\
 &= Mp'
 \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
 M &= (m_{ij}) & m_{ij} &= (\phi \varphi_i, \varphi_j) \\
 p' &= (p'_j(t)) & p'_j &= \frac{\partial p_i(t)}{\partial t}
 \end{aligned}$$

Luego, el esquema queda expresado en notación matricial de la forma siguiente:

$$Mp' + (K - H + D + E)p = f$$

donde:

$$\begin{aligned}
 M &= (m_{ij}), & M_{ij} &= (\phi \varphi_i, \varphi_j) \\
 K &= (k_{ij}), & k_{ij} &= (k, \nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) \\
 H &= (h_{ij}), & h_{ij} &= \int_{\Gamma} k \varphi_j (n_x \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + n_y \frac{\partial \varphi_i}{\partial y}) ds \\
 C &= (c_{ij}), & c_{ij} &= (b \cdot (\nabla \varphi_i), \varphi_j) \\
 E &= (e_{ij}), & e_{ij} &= (c \varphi_i, \varphi_j) \\
 f &= (f_j), & f_j &= (f, \varphi_j) \\
 p' &= (p'_j(t)), & p'_j &= \frac{\partial p_i(t)}{\partial t} \\
 p &= (p_j(t)),
 \end{aligned}$$

### 3.2. Esquemas completamente Discretizados

En esta sección se desarrollará el Método de Crank - Nicholson para el esquema hallado anteriormente en el caso parabólico.

El método de Crank-Nicholson para (3.3) se define como: hallar  $p_h^n \in V_h$  con  $n = 1, \dots, N$  tal que:

$$\left( \frac{p_h^n - p_h^{n-1}}{\Delta t^n}, v \right) + a \left( \frac{p_h^n + p_h^{n-1}}{2}, v \right) = \left( \frac{f^n + f^{n-1}}{2}, v \right) \quad \forall v \in V_h \quad (3.4)$$

$$(p_h^0, v) = (p_0, v) \quad \forall v \in V_h \quad (3.5)$$

donde, para nuestro caso  $(p_h^n - p_h^{n-1})/\Delta t^n$  reemplaza al promedio  $(\partial p(t^n)/\partial t + \partial p(t^{n-1})/\partial t)/2$ . La discretización en el tiempo tiene un error  $\mathcal{O}((\Delta t^n)^2)$ . Y así, substituyendo este método en el esquema matricial obtenido en el caso parabólico resulta:

$$M \left( \frac{p_h^n - p_h^{n-1}}{\Delta t^n} \right) + (K + C + E) \left( \frac{p_h^n + p_h^{n-1}}{2} \right) = \left( \frac{f^n + f^{n-1}}{2} \right)$$

$$\begin{aligned} \left( M + \frac{\Delta t^n}{2}(K + C + E) \right) p_h^n + \left( -M + \frac{\Delta t^n}{2}(K + C + E) \right) p_h^{n-1} &= \left( \frac{f^n + f^{n-1}}{2} \right) \Delta t^n \\ M p_0 &= p_0 \end{aligned}$$

Para  $n = 1, \dots, N$ . El resultante es un método implícito. Para el espacio de elementos finitos lineal  $V_h$ , para cada  $n$  el error  $p^n - p_h^n$  en la norma  $L^2$  es  $\mathcal{O}((\Delta t)^2 + h^2)$ . Para estudiar con más detalle otros métodos usados para discretizar totalmente los esquemas semi-discretos, tales como Euler hacia atrás o Euler hacia adelante, consultar [4].

### 3.3. Matrices Jacobianas y Jacobianos de las transformaciones a los elementos de referencia

Una vez triangulado el dominio sobre el que resolveremos la ecuación diferencial, es necesario calcular las matrices de los esquemas encontrados anteriormente en cada uno de los elementos. Para ello definiremos una transformación lineal desde cada elemento (con coordenadas  $(x,y)$ ) hasta el elemento de referencia triangular: el triángulo de vértices  $(-1,1)$ ,  $(-1,-1)$  y  $(1,-1)$  en coordenadas  $(r,s)$ .

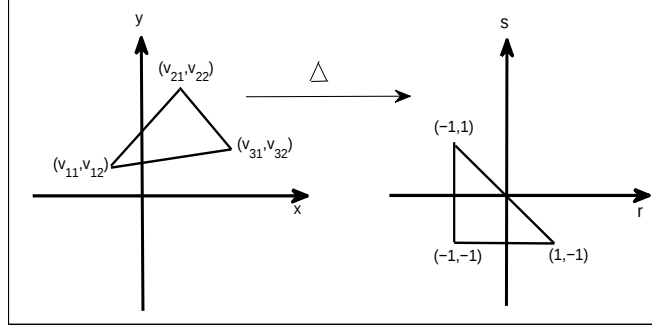


Figura 1: Cambio de coordenadas al elemento de referencia triangular

Así, si los vértices de un elemento triangular cualquiera son:  $(v_{11}, v_{12})$ ,  $(v_{21}, v_{22})$  y  $(v_{31}, v_{32})$  y si definimos:

$$\begin{aligned} x_r &= \frac{v_{21} - v_{11}}{2} \\ y_r &= \frac{v_{22} - v_{12}}{2} \\ x_s &= \frac{v_{31} - v_{11}}{2} \\ y_s &= \frac{v_{32} - v_{12}}{2} \end{aligned}$$

La Jacobiana de dicha transformación es:

$$J_{\Delta} = \begin{pmatrix} x_r & x_s \\ y_r & y_s \end{pmatrix}$$

Y su Jacobiano:

$$|J_{\Delta}| = x_r \cdot y_s - x_s \cdot y_r$$

Mientras que la Matriz Jacobiana y el Jacobiano de la transformación inversa son:

$$J_{\Delta}^{-1} = \frac{1}{|J_{\Delta}|} \begin{pmatrix} y_s & -x_s \\ -y_r & x_r \end{pmatrix}$$

$$|J_{\Delta}^{-1}| = r_x \cdot s_y - r_y \cdot s_x$$

Donde:

$$\begin{aligned} r_x &= \frac{x_r}{|J_{\Delta}|} \\ r_y &= \frac{y_r}{|J_{\Delta}|} \\ s_x &= \frac{x_s}{|J_{\Delta}|} \\ s_y &= \frac{y_s}{|J_{\Delta}|} \end{aligned}$$

Notemos que el Jacobiano  $|J_{\Delta}|$  es constante para cada elemento.

A continuación definiremos una nueva transformación desde el triángulo de referencia (en coordenadas  $(r,s)$ ) hasta el rectángulo de referencia (en coordenadas  $(u,v)$ ) con vértices en los puntos  $(-1, 1), (-1, -1), (1, -1), (1, 1)$ .

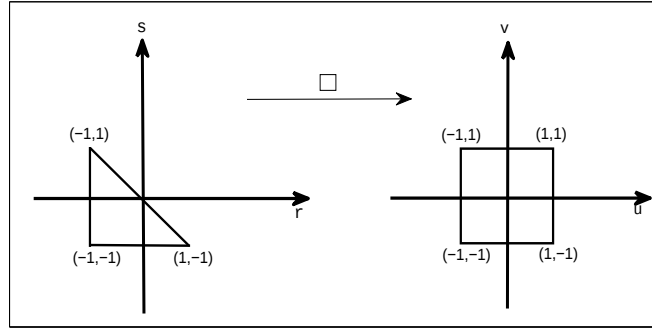


Figura 2: Cambio de coordenadas al elemento de referencia rectangular

Como nos interesa expresar  $r$  y  $s$  como funciones de  $u$  y  $v$  (a efectos de los cambios de variable al integrar) entonces trabajaremos con la transformación inversa.

Dicha transformación se define como:

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{2}[u - 1 - v(u + 1)] \\ s &= v \\ \alpha(r(u, v), s(u, v)) &= \left( \frac{1}{2}[u - 1 - v(u + 1)], v \right) \end{aligned}$$

Que con el fin de simplificar la notación llamaremos  $\alpha(u, v)$ .

La matriz Jacobiana de dicha transformación inversa es:

$$J_{\square_{ref}}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{2}{1-v} & \frac{2(1+v)}{(1-v)^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Y el Jacobiano de la transformación original:

$$|J_{\square}| = \frac{1-v}{2}$$

### 3.4. Cálculo de las matrices en el elemento de referencia triangular

Ahora encontraremos expresiones que nos permitan calcular numéricamente, y para el elemento de referencia triangular, las matrices halladas en el Caso Parabólico y en el Caso General (recordemos que las matrices del Caso Elíptico aparecen también en el Caso General). Dado que el procedimiento es similar para todas las matrices de cada caso, entonces sólo mostraremos cómo se obtienen las matrices de Rigidez y Convección. Para ello es necesario resolver numéricamente las integrales que intervienen en el elemento genérico de cada matriz y lo haremos usando cuadratura gaussiana con nodos en los puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto*.

#### 3.4.1. Resolución numérica de los elementos genéricos de las matrices del Caso Parabólico

**Matriz de Rigidez**  $K = (k_{ij})$ , con  $k_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j)$

Recordemos que el elemento genérico de la matriz de rigidez se define como:

$$k_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\Omega} (\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) d\mathbf{x}$$

donde  $\Omega$  es un dominio acotado, que en nuestro caso sería un elemento triangular de la discretización espacial. Para facilitar la representación de los dominios de integración denotaremos con  $\int_{\Delta}$  la integral sobre un elemento cualquiera de la discretización;  $\int_{\Delta_r}$  la integral sobre el triángulo de referencia ya descrito, y  $\int_{\square_r}$  la integral sobre el rectángulo de referencia.

$$\int_{\Delta} (\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) d\mathbf{x} = \int_{\Delta} \left( \begin{array}{cc} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \end{array} \right) \left( \begin{array}{c} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \end{array} \right) d\mathbf{x}$$

Al hacer un cambio de variable al triángulo de referencia con la transformación  $J_\Delta$  mencionada anteriormente y tomando  $d\mathbf{r} = drds$ , obtenemos:

$$\int_{\Delta} (\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) d\mathbf{x} = \frac{1}{|J_\Delta|^2} \int_{\Delta_r} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial r} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_s & -y_r \\ -x_s & x_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_s & -x_s \\ -y_r & x_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial s} \end{pmatrix} |J_\Delta| d\mathbf{r}$$

Llamando

$$A = \begin{pmatrix} y_s^2 + y_r^2 & -(y_s \cdot x_s + y_r \cdot x_r) \\ -(y_s \cdot x_s + y_r \cdot x_r) & x_s^2 + x_r^2 \end{pmatrix}$$

haciendo un cambio de variable al rectángulo de referencia (con  $d\mathbf{r} = drds$ ) y simplificando, tenemos:

$$\int_{\Delta} (\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) d\mathbf{x} = \frac{1}{|J_\Delta|} \int_{\square_r} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{1-v} & 0 \\ \frac{2(1+v)}{(1-v)^2} & 1 \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} \frac{2}{1-v} & \frac{2(1+v)}{(1-v)^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} \end{pmatrix} d\mathbf{r}$$

Si  $d\mathbf{u} = dudv$

$$\begin{aligned} \int_{\Delta} (\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) d\mathbf{x} &= \frac{1}{|J_\Delta|} \int_{\square_r} \frac{2}{1-v} \left[ \left( \frac{2a}{1-v} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} + \left( \frac{1}{1-v} \right) \left( \frac{2a(1+v)}{1-v} - b \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} \right. \\ &+ \left( \frac{2a(1+v)}{(1-v)^2} - b \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} + \left( \frac{2a(1+v)^2}{(1-v)^3} - \frac{b(1+v)}{1-v} + \frac{c(1-v)}{2} \right. \\ &\left. \left. - \frac{b(1+v)}{1-v} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} \right] d\mathbf{u} \end{aligned}$$

Donde  $a = y_s^2 + y_r^2$ ,  $b = y_s \cdot x_s + y_r \cdot x_r$  y  $c = x_s^2 + x_r^2$ .

Y por último, usando cuadratura gaussiana con pesos  $\omega_i$  e  $i \in 1, \dots, n$  se obtiene

$$\begin{aligned} \int_{\Delta} (\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j) d\mathbf{x} &= \frac{1}{|J_\Delta|} \sum_{l=1}^n \sum_{k=1}^n \omega_l \omega_k \frac{2}{(1-v_l)^4} \left[ 2a(1-v_l)^2 \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial u} \right. \\ &+ [2a(1+v_l) - b(1-v_l)](1-v_l) \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial v} \\ &+ [2a(1+v_l) - b(1-v_l)^2](1-v_l) \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial u} \\ &+ \frac{1}{2} \left[ 4a(1+v_l)^2 + 2b(1-v_l)^2(1+v_l) + c(1-v_l)^4 \right. \\ &\left. \left. - 2b(1+v_l)(1-v_l)^2 \right] \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial v} \right] \end{aligned}$$

**Matriz de Convección**  $C = (c_{ij})$ , con  $c_{ij} = (b \cdot (\nabla \varphi_i), \varphi_j)$

Recordemos que el elemento genérico de la matriz de rigidez se define como:

$$c_{ij} = (b \cdot (\nabla \varphi_i), \varphi_j) = \int_{\Omega} (b \cdot (\nabla \varphi_i) \varphi_j) d\mathbf{x}$$

donde  $\Omega$  es un dominio acotado, que en nuestro caso sería un elemento triangular de la discretización espacial. Así,

$$\int_{\Delta} (b \cdot (\nabla \varphi_i) \varphi_j) d\mathbf{x} = \int_{\Delta_{ref}} \begin{pmatrix} b_1(r, s) & b_2(r, s) \end{pmatrix} J_{\Delta}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial r} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial s} \end{pmatrix} \varphi_j(r, s) |J_{\Delta}| d\mathbf{r}$$

y haciendo un cambio de variable para integrar sobre el rectángulo de referencia, resulta:

$$\begin{aligned} \int_{\Delta} (b \cdot (\nabla \varphi_i) \varphi_j) d\mathbf{x} &= \int_{\square_{ref}} \begin{pmatrix} b_1(\alpha(u, v)) & b_2(\alpha(u, v)) \end{pmatrix} \\ &\quad \begin{pmatrix} y_s & -x_s \\ -y_r & x_r \end{pmatrix} J_{\square}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \end{pmatrix} \varphi_j(u, v) |J_{\square}| d\mathbf{u} \end{aligned}$$

de manera análoga al caso anterior, usando cuadratura gaussiana con  $n$  nodos, finalmente obtenemos:

$$\int_{\Delta} (b \cdot (\nabla \varphi_i) \varphi_j) d\mathbf{x} = \sum_{l=1}^n \sum_{k=1}^n Q \frac{1-v_l}{2} \varphi_j(u_k, v_l) \omega_l \omega_k$$

donde,

$$\begin{aligned} Q &= \left[ \frac{2}{1-v_l} \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial u} \left( y_s \cdot b_1(\alpha(u_k, v_l)) - y_r \cdot b_2(\alpha(u_k, v_l)) \right) \right. \\ &+ \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial v} \left( b_1(\alpha(u_k, v_l)) \left( \frac{2y_s(1+v_l)}{(1-v_l)^2} - x_s \right) \right. \\ &+ \left. \left. b_2(\alpha(u_k, v_l)) \left( x_r - \frac{2y_r(1-v_l)}{(1-v_l)^2} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

### 3.4.2. Resolución numérica de los elementos genéricos de las matrices del Caso General

**Matriz de Rigidez**  $K = (k_{ij})$ , con  $k_{ij} = (k \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j)$

Esta matriz es muy parecida a la matriz de masa del Caso Parabólico a diferencia de que aparece una función  $k(x, y)$ . Así, el elemento genérico de la matriz de rigidez esta vez se define como:

$$k_{ij} = (k \nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j) = \int_{\Omega} (k(\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j)) d\mathbf{x}$$

donde  $\Omega$  es un dominio acotado, que en nuestro caso sería un elemento triangular de la discretización espacial.

$$\int_{\Delta} (k(x, y)(\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j)) d\mathbf{x} = \int_{\Delta} k(x, y) \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \end{pmatrix} d\mathbf{x}$$

Si llamamos

$$A = \begin{pmatrix} y_s & -y_r \\ -x_s & x_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_s & -x_s \\ -y_r & x_r \end{pmatrix}$$

Al hacer un cambio de variable al triángulo de referencia con la transformación  $J_{\Delta}$  mencionada anteriormente obtenemos:

$$\int_{\Delta} (k(\mathbf{x})(\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j)) d\mathbf{x} = \frac{1}{|J_{\Delta}|^2} \int_{\Delta_r} k(x(r, s), y(r, s)) \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial r} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial s} \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial r} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial s} \end{pmatrix} |J_{\Delta}| dr$$

y ahora llamando

$$B = \begin{pmatrix} \frac{2}{1-v} & 0 \\ \frac{2(1+v)}{(1-v)^2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_s^2 + y_r^2 & -(y_s \cdot x_s + y_r \cdot x_r) \\ -(y_s \cdot x_s + y_r \cdot x_r) & x_s^2 + x_r^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{1-v} & \frac{2(1+v)}{(1-v)^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

haciendo un cambio de variable al rectángulo de referencia y simplificando, tenemos:

$$\begin{aligned}
\int_{\Delta} (k(\mathbf{x})(\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j)) d\mathbf{x} &= \frac{1}{|J_{\Delta}|} \int_{\square_r} k(\alpha(u, v)) \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} & \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \end{pmatrix} B \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} \\ \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} \end{pmatrix} |J_{\square}| d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{|J_{\Delta}|} \int_{\square_r} k(\alpha(u, v)) \left[ \left( \frac{2a}{1-v} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} \right. \\
&\quad + \left( \frac{1}{1-v} \right) \left( \frac{2a(1+v)}{1-v} - b \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} + \left( \frac{2a(1+v)}{(1-v)^2} - b \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} \\
&\quad \left. + \left( \frac{2a(1+v)^2}{(1-v)^3} - \frac{b(1+v)}{1-v} + \frac{c(1-v)}{2} - \frac{b(1+v)}{1-v} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} \right] d\mathbf{u}
\end{aligned}$$

Y al simplificar y agrupar, resulta

$$\begin{aligned}
\int_{\Delta} (k(\mathbf{x})(\nabla \varphi_i \cdot \nabla \varphi_j)) d\mathbf{x} &= \frac{1}{|J_{\Delta}|} \int_{\square_r} k(\alpha(u, v)) \left[ \left( \frac{2a}{1-v} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} \right. \\
&\quad + \left( \frac{1}{1-v} \right) \left( \frac{2a(1+v)}{1-v} - b \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} + \left( \frac{2a(1+v)}{(1-v)^2} - b \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j}{\partial u} \\
&\quad \left. + \left( \frac{2a(1+v)^2}{(1-v)^3} - \frac{b(1+v)}{1-v} + \frac{c(1-v)}{2} - \frac{b(1+v)}{1-v} \right) \frac{\partial \varphi_i}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j}{\partial v} \right] d\mathbf{u}
\end{aligned}$$

Donde:  $a = y_s^2 + y_r^2$ ,  $b = y_s x_s + y_r x_r$  y  $c = x_s^2 + x_r^2$ .

Y por último, usando cuadratura gaussiana con pesos  $\omega_i$  e  $i \in 1, \dots, n$  se obtiene

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{|J_{\Delta}|} \sum_{l=1}^n \sum_{k=1}^n \omega_l \omega_k k(\alpha(u_k, v_l)) \frac{1}{(1-v_l)^3} \left[ 2a(1-v_l)^2 \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial u} \right. \\
&\quad + [2a(1+v_l) - b(1-v_l)](1-v_l) \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial u} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial v} \\
&\quad + [2a(1+v_l) - b(1-v_l)^2](1-v_l) \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial u} \\
&\quad + \frac{1}{2} [4a(1+v_l)^2 + 2b(1-v_l)^2(1+v_l) + c(1-v_l)^4 \\
&\quad \left. - 2b(1+v_l)(1-v_l)^2 \right] \frac{\partial \varphi_i(u_k, v_l)}{\partial v} \frac{\partial \varphi_j(u_k, v_l)}{\partial v} \Big]
\end{aligned}$$

Que es la expresión análoga que se buscaba.

Finalmente, como la matriz de Convección tiene el mismo término genérico que en el caso general, no se desarrollará de nuevo.



## Capítulo 4

# ALGORITMOS DESARROLLADOS EN LA PASANTÍA

Ahora se mostrará una breve reseña de los algoritmos más importantes desarrollados en la pasantía. Dividiremos los algoritmos por grupos de la siguiente forma:

1. Generación de mallas. Se elaboraron rutinas en los lenguajes C y Matlab para elaborar mallas de dominios rectangulares y en L con elementos triangulares.

- (i) Malla rectangular.

principal\_malla.c: Se encarga de llamar al resto de las rutinas y de declarar las variables que se usarán. Recibe por pantalla las coordenadas de los extremos del dominio rectangular y la cantidad de nodos que se quieren horizontal y verticalmente. La salida es la matriz de coordenadas y de conectividades, escribiéndola en un archivo llamado conectividades.txt.

- (ii) Malla en L.

main.c: Recibe por pantalla las coordenadas de los extremos del dominio en L y la cantidad de nodos que se quieren horizontal y verticalmente. Genera un archivo, al igual que en la malla rectangular, llamado conectividades.c que contendrá el número de nodos, la matriz de coordenadas y la matriz de conectividades.

(iii) Gráfico de las mallas.

Los gráficos se realizan en matlab y hay un programa por tipo de malla, estos son `plot_mesh_L.m` y `plot_mesh_rectangle.m`. Se pide lo mismo que en los programas anteriores, triangulariza el dominio rectangular o en L y en cada nodo aparece número de nodo que le corresponde. El siguiente es un ejemplo de mallado triangular en un dominio en L:

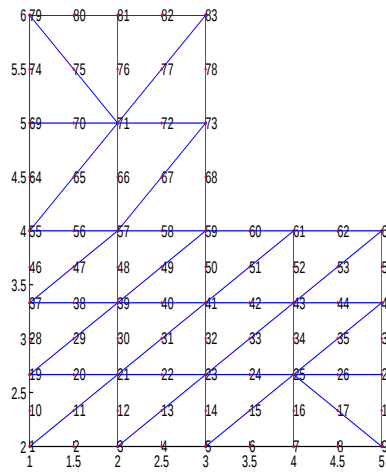


Figura 3: Ejemplo de mallado en dominio en L. Grado del polinomio de aproximación: 2

2. Puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto* y pesos de la cuadratura.

El programa `ptos_legendre_lobatto_pesos.c` tiene como entrada el grado de aproximación de la cuadratura y como salida dos vectores. El primero son los puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto* de -1 a 1 y el segundo son los pesos de la cuadratura por cada punto.

3. Matrices en el elemento de referencia triangular y rectangular.

(i) Declaración de funciones involucradas en la ecuación diferencial.

En los programas `func_c.c`, `func_f.c`, `func_partial_phi.c`, `func_phi.c` y

`phi_x_phi.c` se evalúan las funciones  $c(x, y)$ ,  $f(x, y)$ ,  $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x, y)$ ,  $\frac{\partial \varphi}{\partial y}(x, y)$ ,  $\varphi(x, y)$  y  $(\varphi_i(x, y))(\varphi_j(x, y))$ , respectivamente. Las primeras 2 rutinas reciben sólo los puntos  $(x, y)$  donde se evaluarán las funciones  $c(x, y)$  y  $f(x, y)$ , respectivamente. Los programas `func_partial_phi.c` y `func_phi.c`, reciben, tanto el índice  $i$  que indica la función  $\varphi_i$  a trabajar, como el punto  $(x, y)$  donde se evaluará dicha función o su derivada parcial. Por último, `phi_x_phi.c` recibe dos índices  $j$  e  $i$ , y el par  $(x, y)$ , debido a que se desea evaluar  $(\varphi_i(x, y)\varphi_j(x, y))(x, y)$ . Estos programas son los mismos en el caso de elementos de referencia triangulares o rectangulares.

- (ii) Cálculo de las integrales. De acuerdo con los cálculos del capítulo anterior, cada matriz está determinada por una integral sobre un dominio triangular o rectangular, según sea el caso. Con este fin se elaboraron rutinas que resuelven dichas integrales utilizando cuadratura Gaussiana con los puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto* que mencionamos anteriormente. Si el elemento de referencia es triangular, se realiza un cambio de variable para integrar sobre el elemento de referencia triangular y luego otro cambio para integrar sobre el elemento de referencia rectangular, esto con el fin de simplificar la integración. Los programas que realizan dicha integración sobre elementos triangulares sólo toman en cuenta el Jacobiano de la transformación del triángulo de referencia al rectángulo de referencia, debido a que el mismo no es constante. Después de integrar, en el programa que genera las matrices, se toma en cuenta el Jacobiano restante.

En caso contrario, cuando los elementos son rectangulares, sólo se realiza un cambio de variable para integrar sobre el elemento de referencia rectangular. Se elaboró un programa por cada integral distinta a realizar, entre ellos se tienen los siguientes:

- a) `integral_c_phi_x_phi.c`: calcula la integral de la función  $c(x, y)\varphi_i(x, y)\varphi_j(x, y)$  en el elemento de referencia correspondiente.
- b) `integral_f_phi.c`: calcula la integral de la función  $f(x, y)\varphi_i(x, y)$  en el elemento de referencia correspondiente.

- c) `integral_grad_phi2.c`: calcula la integral de la función  $(\nabla\varphi_i) \cdot (\nabla\varphi_j)$  en el elemento de referencia correspondiente.
- d) `integral_phi_x_phi.c`: calcula la integral de la función  $(\varphi_i\varphi_j)(x, y)$  en el elemento de referencia correspondiente.
- e) `integral_Po_phi.c`: calcula la integral de la función  $P_0(x, y)\varphi_i(x, y)$  en el elemento de referencia correspondiente.

(iii) Cálculo de los Jacobianos.

Entre los programas correspondientes al elemento de referencia triangular, encontramos los algoritmos correspondientes al cálculo de los Jacobianos de las dos transformaciones involucradas en este caso. El primero, `jacobiano_triang.c`, corresponde a la transformación que lleva un triángulo cualquiera al triángulo de referencia; y el segundo, `jacobiano_rec.c`, corresponde a la transformación que manda al triángulo de referencia al rectángulo de referencia.

En el caso de que tengamos elementos rectangulares, el algoritmo `jacobiano_rec.c`, calcula el jacobiano de un elemento rectangular cualquiera al elemento de referencia rectangular.

(iv) Programas principales.

Para cada tipo de elemento tenemos 2 programas principales, uno con extensión `.c` y otro con extensión `.h`. El primero se encarga de llamar a todas las otras rutinas, tiene como entrada el grado de la cuadratura y el grado del polinomio de aproximación. En él, se declaran las matrices y otras variables usadas, se calculan los puntos de Legendre-Gauss-Lobatto y los pesos correspondientes, se obtiene la matriz de adyacencia y la de coordenadas del elemento de referencia, se calculan cada una de las entradas de las matrices involucradas en el esquema semidiscreto (se calculan las integrales correspondientes) y se escriben por pantalla. Entre las matrices mencionadas tenemos: la matriz de Masa (M), Rigidez (K), Convección (C), E, f y p, cuyos elementos genéricos podemos encontrar en [3.1.3](#).

En el segundo programa, `int_doble_triang.h`, se declaran todas las funciones y procedimientos que llama el programa principal.



# CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Al plantearnos la formulación débil de una ecuación diferencial cualquiera, se estudió el método de *Galerkin* y en especial el método de elemento finitos. Se estudiaron tres ecuaciones diferenciales que poseían términos de convección, reacción y difusión: una ecuación parabólica, una elíptica y un caso general. Para las tres se obtuvo el esquema semi-discreto correspondiente (en el caso de la ecuación elíptica, como sólo depende de las derivadas parciales de la función incógnita con respecto a las coordenadas espaciales, se obtuvo directamente el esquema completamente discretizado). En los otros dos casos se aplicó el método de *Crank-Nicolson* para discretizar por completo el esquema. Usando el método de elementos finitos se encontraron los elementos genéricos de las matrices involucradas en los esquemas para los tres casos, en especial las matrices de Rigidez, Convección y Masa.

Con el fin de implementar algorítmicamente dicho método, se estudiaron diversas formas de generar mallas en dominios rectangulares y tipo L, elaborándose rutinas en el lenguaje C con este fin. La generación de mallas incluye la discretización del dominio, ya sea en elementos triangulares o rectangulares, la numeración de los nodos, la obtención de la matriz de coordenadas y de adyacencia.

También se estudió la teoría de integración numérica sobre subconjuntos del plano. Entre los métodos que se estudiaron se encuentran los citados en [1], [2], [3], [12] y [13]. Se usó cuadratura Gaussiana con los puntos de *Legendre-Gauss-Lobatto* para resolver las integrales planteadas. Se elaboraron programas para obtener dichos puntos en el intervalo  $[-1, 1]$  y sus respectivos pesos. Estos programas fueron validados, comparando los resultados obtenidos al integrar una función con ellos y usando MAPLE.

Se elaboraron programas con el fin de obtener las matrices en el elemento de referencia, encontradas al aplicar el método de elementos finitos. Para ello, fue necesario estudiar transformaciones en el plano con la finalidad de facilitar y simplificar la integración. Todo esto para elementos rectangulares y triangulares.

Se recomienda continuar con el trabajo realizado en la pasantía calculando los elementos genéricos de las matrices de los elementos frontera, donde se involucran las condiciones de contorno; Una vez armado el sistema lineal correspondiente, elaborar un programa que permita su solución eficientemente y hacer las pruebas correspondientes al post-proceso.

Se pueden encontrar todos los algoritmos y gran parte del material bibliográfico usado en esta pasantía, junto con una copia digital de este informe, en un CD anexo a este tomo.

# Bibliografía

- [1] *Blyth, M. G. y Pozrikidis, C.* (2006), A Lobatto interpolation grid over the triangle, IMA Journal of Applied Mathematics. **71**, 153-169.
- [2] *Luo, H. y Pozrikidis, C.* (2006), A Lobatto interpolation grid in the tetrahedron, IMA Journal of Applied Mathematics. 1-16.
- [3] *Chen, Q. y Babuškab, I.* (1995), Approximate optimal points for polynomial interpolation of real functions in an interval and in a triangle, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 128, 405-417.
- [4] *Zhangxin, Chen.* Finite Element Methods and Their Applications: Springer(2005).
- [5] *Hesthaven, J. S. y Warburton, T.* Nodal Discontinuous Galerkin Methods: Springer(2008).
- [6] *Karniadakis, G. y Sherwin, S. J.* Spectral/hp Element Methods for CFD: Oxford University Press(2005).
- [7] *Johnson, C.* Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Elements Method: Dover Publications(año).
- [8] *Ciarlet, P. G.* The Finite Element Method for Elliptic Problems: SIAM(2002).
- [9] *Hughes, J. R.* The Finite Element Method, Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis: Dover(2000).
- [10] *Reddy, J. N.* An introduction to the Finite Element Method:Mc Graw Hill(1993).

## Bibliografía

---

- [11] *Li, B. Q.* Discontinuous Finite Elements in Fluid Dynamics and Heat Transfer: Springer(2006).
- [12] *Douglas, A.* A concise Introduction to Numerical Analysis: University of Minnesota(1999).
- [13] *Burden, R. y Faires J.* Numerical Analysis: ITP(1997).