

Universitat de València
Facultat de Matemàtiques
Departament Matemàtica Aplicada i Astronomia

**Elementos Espectrales
Modificados
para el tratamiento numérico
de la ecuación de
convección-difusión**

Memoria presentada por
Fernando Olmos Maldonado
para optar al grado de Doctor
en Ciencias Matemáticas
Valencia, 1991



UMI Number: U607797

All rights reserved

INFORMATION TO ALL USERS

The quality of this reproduction is dependent upon the quality of the copy submitted.

In the unlikely event that the author did not send a complete manuscript and there are missing pages, these will be noted. Also, if material had to be removed, a note will indicate the deletion.



UMI U607797

Published by ProQuest LLC 2014. Copyright in the Dissertation held by the Author.
Microform Edition © ProQuest LLC.

All rights reserved. This work is protected against
unauthorized copying under Title 17, United States Code.



ProQuest LLC
789 East Eisenhower Parkway
P.O. Box 1346
Ann Arbor, MI 48106-1346

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA
BIBLIOTECA CIÈNCIES

Nº Registre 1432

DATA 10.6.92

SIGNATURA T.D.

124

Nº LIBIS: BIBLIOTECA

30 cms.

i18957882

b16767159

D. VICENTE HERNADEZ GARCÍA, Catedrático de Universidad del Departamento de Sistemas Informáticos y Computación, de la Universidad Politécnica de Valencia, y
D. ANTONIO HOSPITALER PÉREZ, Profesor Titular de Universidad del Departamento de Ingeniería de la Construcción, de la Universidad Politécnica de Valencia

CERTIFICAN:

que la presente memoria: **“Elementos Espectrales Modificados para el tratamiento numérico de la ecuación de convección-difusión”**, ha sido realizada bajo su dirección por **Fernando Olmos Maldonado**, y constituye su tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias Matemáticas.

Lo que se hace constar en cumplimiento de la legislación vigente en Valencia, a 15 de Octubre de 1991.



Vicente Hernández García



Antonio Hospitaler Pérez.

Quiero agradecer el apoyo recibido de mis directores, Vicente Hernández y Antonio Hospitaler, quienes han sabido orientar el trabajo realizado.

Así mismo, agradezco (por orden de aparición) a Francisco Chinesta, Rafael Torres, Trinidad Casasús y Emilio Checa, el trabajo desarrollado durante estos últimos meses lo cual nos ha permitido comenzar a consolidar un pequeño grupo interdisciplinar de trabajo en torno a las ideas presentadas en la memoria.

Finalmente, debo reconocer de mi maestro en métodos numéricos, Francisco Chinesta, la paciencia con la que me ha soportado y el tesón que ha puesto en el trabajo, lo que ha permitido que en esta memoria hayan ideas originales.

Por orden de edad, a mis padres y a Concha

Índice

1	Introducción	4
1.1	Presentación del problema	4
1.2	Modelización	8
2	Resultados sobre existencia y regularidad de la solución.	11
2.1	Existencia y regularidad de la solución distribucional.	12
2.2	Existencia y unicidad de solución débil	15
2.3	Acerca de la función de Green del problema	17
3	Estudio físico-matemático de la ecuación	20
3.1	Comportamiento de la solución a contracorriente	22
3.2	Comportamiento de la solución en la zona postfuga	24
3.2.1	Sobre la línea de trayectoria	24
3.2.2	En las direcciones perpendiculares a la trayectoria	27
3.3	Conclusiones globales	30
4	Revista de métodos espectrales	32
4.1	Esquemas espectrales	32
4.2	Método de los elementos espectrales	36
4.2.1	Ecuación de difusión	37
4.3	Elementos espectrales no conformes. Espacios mortar	44



5	Aplicación de los métodos espectrales a la ecuación de convección-difusión	48
5.1	Ecuación de convección-difusión unidimensional	49
5.1.1	Método de colocación	49
5.1.2	Elementos espectrales	52
5.2	Ecuación de convección-difusión bidimensional	55
5.2.1	Método de colocación	56
5.2.2	Elementos espectrales	57
5.2.3	Alternativas	59
6	Elementos espectrales modificados	62
6.1	Elementos fuga y trayectoria, conformidad y funciones de forma	63
6.1.1	Elemento trayectoria	63
6.1.2	Elemento de fuga	64
6.1.3	Estudio de la conformidad entre elementos	65
6.1.4	Obtención de las funciones de forma	66
6.2	Fórmulas de cuadratura	67
6.3	Acoplamiento con elementos estandar	72
6.3.1	Coupling elementos trayectoria-elementos estandar	72
6.3.2	Coupling elementos fuga-elementos estandar	75
6.4	Aplicación del algoritmo al caso general	76
7	Implementación y evaluación del algoritmo	79
7.1	Acerca de la evaluación del algoritmo	79
7.2	Ejemplo de aplicación	82
7.3	Conclusiones	91
7.4	Perspectivas	92

Lista de Figuras

3.1	Esquema de zonas pre y post-fuga	21
3.2	Carácter exponencial a contracorriente	25
3.3	Esquema del comportamiento de la solución en las zonas paralelas a la trayectoria	26
3.4	Esquema del comportamiento de la solución en las zonas perpendiculares a la trayectoria	28
3.5	Carácter exponencial en la zona postfuga	29
3.6	Carácter exponencial en la zona postfuga	30
5.1	Comparación Green-Colocación	52
5.2	Comparación Green-Métodos espectrales	55
5.3	Método de colocación bidimensional	57
7.1	Elementos modificados con dos exponenciales	83
7.2	Elementos modificados con dos exponenciales	83
7.3	Elementos modificados con tres exponenciales	84
7.4	Elementos modificados con tres exponenciales	85
7.5	Distribución del error para dos exponenciales	86
7.6	Distribución del error para tres exponenciales	86
7.7	Solución de elementos finitos	87
7.8	Solución de elementos finitos	88
7.9	Solución de Petrov-Galerkin	88
7.10	Solución de Petrov-Galerkin	89

Capítulo 1

Introducción

1.1 Presentación del problema

En los últimos años se ha producido una intensa actividad en el desarrollo de los métodos espectrales debido a sus propiedades de convergencia rápida, lo cual es un atractivo muy grande en la aproximación de soluciones suaves. Esta actividad ha desembocado en la formulación del método de los elementos espectrales [P 84,R 88] que es una técnica de residuos ponderados que combina la flexibilidad del método de los elementos finitos (FEM) [SF 73,TD 81] (versión h), con las propiedades de convergencia rápida de los métodos espectrales.

Este nuevo método ha sido testeado para una clase de problemas con solución suave en el marco de la mecánica de fluidos [R 88] y en otros campos [0ChT 90,OC 91], demostrándose que el método es óptimo en el sentido de que el error que se comete es a lo sumo, una constante multiplicativa de la mejor aproximación en el subespacio polinomial de discretización. [MP 88] Muy recientemente y con vistas a una mayor flexibilidad del método, ha sido formulada una versión no conforme, en la que a diferencia del FEM, se trata de no conformidades de tipo geométrico, lo cual permite el tratamiento de singularidades puntuales debidas a geometría y/o condiciones de contorno [BMP 90,BMMP 89,MMP 88,Ma 89].



La situación cambia para ecuaciones diferenciales de convección-difusión con fuertes gradientes en la solución. Se trata de ecuaciones del tipo

$$-D\Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi = f(x,y,z) \quad (1.1)$$

donde $f(x,y,z)$ es el término fuente, que para el caso de una fuente puntual se modeliza por medio de una delta de Dirac. Esta ecuación gobierna numerosos fenómenos de la física y de la ingeniería, como por ejemplo, la dispersión de un gas en un medio en movimiento, siendo para este caso \bar{v} , el campo de velocidades en el medio en el que tiene lugar el proceso difusivo.

Las ecuaciones que ocuparán nuestro estudio han sido tratadas desde distintos puntos de vista y mediante métodos diversos, lo que da una idea, a la vez de sus muchas aplicaciones y sus no pocas dificultades. En esta introducción, sin realizar un seguimiento exhaustivo, sí queremos comentar algunas ideas sobre el estudio y desarrollo de algoritmos y métodos que se han ocupado del tratamiento de ecuaciones del tipo convección-difusión.

Sobre soluciones analíticas se han realizado pocos avances en las ecuaciones anteriores, debido principalmente a la dificultad en obtenerlas aún en los casos más sencillos, en los que se hace uso de un complejo y potente aparato matemático. Las dificultades se agravan si el segundo término de la ecuación es una delta de Dirac, como es el caso que nos ocupa.

Hace ya años que se viene realizando este estudio analítico aunque las dificultades comentadas han conducido a la aplicación de métodos numéricos que dieran aproximaciones fiables a la solución, como el de diferencias finitas, en cuya aplicación surgieron problemas debido al carácter no autoadjunto del operador. Para paliar lo anterior, se crearon los métodos "upwind" (contra-corriente) cuyas ideas y desarrollo está realizado de forma extensa en el libro clásico de Roache [Ro 72]. Problemas relacionados con esquemas en diferencias aplicados a estas ecuaciones, tanto en el caso estacionario como en el transitorio, pueden consultarse en [Li 85,Bh 85,N 90].

Otro método numérico aplicado a la ecuación, es el método de los elemen-

tos finitos. Es conocido, que al aplicarlo en su formulación Galerkin, aparecen problemas de oscilaciones en la solución a partir de un determinado número de Péclet, debido a la presencia de fuertes gradientes en la solución de la ecuación [KNZH 80,Sa 90,WM 85,HE 90,HE 80,COCE 90]. Este fenómeno no es insalvable y puede ser evitado tomando un mallado muy fino en las zonas de fuerte gradiente. Esto supone la necesidad de aproximar la solución con un gran número de grados de libertad, o sea, resolver problemas discretos de tamaño considerable.

En el campo de los elementos finitos, una técnica que se ha desarrollado para obviar este problema, es la que se basa en una formulación de Petrov-Galerkin, conocida como la formulación SUPG. Esta consiste en la modificación de las funciones de peso, dirigida a la mejor representación de las singularidades y fuertes gradientes. Con esta formulación, se reduce considerablemente el tamaño de los problemas discretos, obteniéndose una buena solución numérica no oscilatoria [HE 90,HE 80,HB 82,HMM 86]

Pasando al campo de las formulaciones espectrales, si utilizamos esquemas pseudoespectrales de colocación, el fenómeno de las oscilaciones vuelve a presentarse. La utilización del método de los elementos espectrales mejora esta situación, y pueden conseguirse soluciones no oscilatorias, pero el precio que hay que pagar es de nuevo la resolución de problemas de tamaño grande, que apenas pueden reducirse utilizando mallas adaptadas al problema con elementos de alto orden, acoplados en una malla con no conformidades geométricas.

Es en este marco, en el que hemos buscado una adaptación del método de los elementos espectrales para las ecuaciones del tipo convección-difusión, *que suministre soluciones no oscilatorias, de alta precisión, obtenidas a partir de problemas de reducido tamaño. La técnica consiste en producir una malla acoplada de elementos espectrales estandar y elementos espectrales modificados, capaces éstos de reproducir la solución en las zonas de fuerte gradiente, mientras que el resto de elementos aproximan la solución en las*

zonas de variación suave .

Con vistas al desarrollo de la técnica indicada, se procede de la forma siguiente:

- En el segundo capítulo, se presentan los resultados teóricos acerca de la existencia y regularidad de la solución;
- En el tercer capítulo, se realiza un análisis físico-matemático de la ecuación en la que fundamentar la adaptación del método;
- En el cuarto capítulo, se procede a una breve presentación del método de los elementos espectrales, en el contexto de las técnicas espectrales; también se presentan las formulaciones no conformes (elementos mortar);
- En el quinto capítulo, se procede a la aplicación de los métodos espectrales a la ecuación, estudiando sus limitaciones prácticas;
- En el sexto, se formula el algoritmo para un problema simplificado, presentando los nuevos elementos espectrales, las funciones de forma, y las fórmulas de cuadratura; así mismo, se presenta el acople de los elementos modificados y de los estándar. Dentro del mismo capítulo, se presenta la extensión del algoritmo para el tratamiento de la ecuación completa, con velocidad función del punto, en una geometría arbitraria.
- Por último, en el séptimo capítulo se presenta la implementación y evaluación del algoritmo.

1.2 Modelización

El objetivo de este apartado es establecer la ecuación diferencial asociada a la conservación de una magnitud física escalar A , definida sobre un medio continuo ($dA = \rho dV$ donde ρ es una función escalar con dominio en R^4), en el que tienen lugar procesos de convección y difusión de forma simultánea.

Sea un volumen arbitrario V fijo en el espacio, de contorno $S = \partial V$. Sea ρ , la densidad de la magnitud A en el instante t . La cantidad total de la magnitud A en el volumen V y en el instante t será:

$$A_V = \int_V \rho dV \quad (1.2)$$

siendo $\rho = \rho(x, y, z, t)$ una función que se supone $C^2(V)$.

La variación en el tiempo de A_V vendrá dada por:

$$\frac{\partial A_V}{\partial t} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV \quad (1.3)$$

Por otra parte, la variación de A_V puede ser debida a una variación en el balance convectivo, una variación en el balance difusivo y/o la existencia de un término fuente (o sumidero) en el dominio. Así

$$\frac{\partial A_V}{\partial t} = F_V + Co + Dif \quad (1.4)$$

donde F_V representa el término fuente, Co el término convectivo y Dif el término difusivo.

Calculando cada uno de ellos, tendremos:

$$F_V = \int_V F(x, y, z, t) dV \quad (1.5)$$

positiva en el caso de fuente y negativa en el caso de sumidero, siendo F una función escalar con dominio en R^4

El flujo convectivo viene dado por

$$J_{Co} = \rho \bar{v} \quad (1.6)$$

donde \bar{v} representa el campo de velocidades. Entonces

$$Co = \int_S (-\rho v_n) ds = \int_S -\rho \bar{v} \bar{n} ds = - \int_V \nabla(\rho \bar{v}) dV \quad (1.7)$$

Se supone un flujo difusivo proporcional al gradiente de la densidad de la magnitud A .

$$J_{dif} = -D \frac{\partial \rho}{\partial n} \quad (1.8)$$

Entonces:

$$Dif = \int_S D \frac{\partial \rho}{\partial n} ds = \int_S D \nabla \rho \bar{n} ds = \int_V \nabla(D \nabla \rho) dV \quad (1.9)$$

Resultando

$$\int_V F(x, y, z, t) dV - \int_V \nabla(\rho \bar{v}) dV + \int_V \nabla(D \nabla \rho) dV = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV \quad (1.10)$$

Dado que esta igualdad debe de ser válida para cualquier volumen V , se sigue

$$F = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{v}) - \nabla(D \nabla \rho) \quad (1.11)$$

Si se supone que la magnitud A representa "masa de gas", entonces la ecuación anterior modeliza la dispersión de un gas en un medio en movimiento. En este caso, ρ es la concentración de gas, que se representa por Φ .

Si se considera además :

- Régimen estacionario
- D , coeficiente de difusión constante
- Campo de velocidades solenoidal
- Término fuente puntual, es decir, una delta de Dirac.

Con lo cual, la ecuación queda:

$$-D\Delta\Phi + \bar{v}\nabla\Phi = K\delta(P - P_0) \quad (1.12)$$

donde $P = (x, y, z)$ y $P_0 = (x_0, y_0, z_0)$

En cuanto a las condiciones de contorno, se consideran de Dirichlet en parte del contorno, y de Newman en el resto de la frontera.[ChT 90, ChTO 90,CChChOT 91]

Capítulo 2

Resultados sobre existencia y regularidad de la solución.

En este capítulo se abordan los resultados básicos de existencia de solución para la ecuación planteada, en caso de que el término independiente sea una Delta de Dirac [Sch 67]. Se prueba la existencia de solución distribucional para cualquier distribución temperada en R^n y en particular para la δ de Dirac. Esta solución se puede utilizar con vistas a establecer la solución de la ecuación en dominios no acotados, por el método de las imágenes electrostáticas [DL 84].

Para el caso de dominios acotados, con condiciones de contorno mixtas, la existencia de solución débil del problema, se establece vía el método de transposición [LM 68].

Finalmente se establece la relación entre la solución débil relativa a $W^{1,p}$ para un dato inicial de L^2 y la función de Green del problema.

2.1 Existencia y regularidad de la solución distribucional.

Teorema 1 *Consideramos el operador L definido por*

$$L(\phi) = -D\Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi \quad (2.1)$$

siendo D y \bar{v} constantes y $\bar{v} = (u_1, \dots, u_n)$

Se considera

$$L(\phi) = f \quad \text{con } f \in D'(R^n) \quad (2.2)$$

Entonces se tiene que para cada distribución temperada f sobre R^n existe una distribución temperada ϕ solución distribucional de 2.2.

En particular, existe una única distribución temperada E sobre R^n tal que

$$L(E) = \delta \quad \text{en } D'(R^n) \quad (2.3)$$

siendo δ la distribución de Dirac en el origen.

Demostración:

Si se considera ϕ y $f \in S'(R^n)$ y se considera la transformada de Fourier de 2.2, dado que $\widehat{\Delta\phi} = |x|^2 \hat{\phi}$ y $\widehat{\nabla\phi} = i\bar{x}\hat{\phi}$ se obtiene

$$D|x|^2 \hat{\phi} + i\bar{x}\hat{\phi} = \hat{f} \quad (2.4)$$

y por tanto

$$\hat{\phi} = \frac{\hat{f}}{D|x|^2 + i\bar{x}}$$

Como $f \in S'(R^n)$ entonces

$$\frac{\hat{f}}{D|x|^2 + i\bar{x}} \in S'(R^n)$$

existe una única distribución temperada ϕ solución de 2.2 que es la transformada inversa de

$$\frac{\hat{f}}{D|x|^2 + i\bar{x}v}$$

En particular, si $f = \delta$, E es la transformada inversa de

$$\frac{1}{D|x|^2 + i\bar{x}v}$$

Se puede obtener más información acerca de la solución distribucional:

Si en $L(\phi) = \delta$ realizamos el cambio $\phi = \zeta e^{\bar{\mu}x}$ siendo $\bar{\mu} = (\frac{u_1}{D}, \dots, \frac{u_n}{D})$ y $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$ llegamos a la ecuación

$$M(\zeta) = -\Delta\zeta + k\zeta = \delta e^{-\bar{\mu}x} \quad (2.5)$$

con k función de $\bar{\mu}$ y $k > 0$.

En [DL 84] se demuestra que la ecuación

$$M(\zeta) = -\Delta\zeta + k\zeta = f \quad (2.6)$$

con $f \in S'(R^n)$ admite una única solución en $D'(R^n)$, y además que si f es positiva, entonces la solución ζ de 2.1 pertenece al espacio $W_{loc}^{1,p}(R^n)$ para todo p con $p < \frac{n}{n-1}$ y $\zeta > 0$ sobre R^n en el sentido que $\inf_{B(0,r)} \zeta > 0, \forall r > 0$.

Y utilizando el resultado anterior se demuestra:

Corolario 1 *La solución distribucional, ϕ de 2.2, pertenece al espacio $W_{loc}^{1,p}(R^n)$ para todo p con $p < \frac{n}{n-1}$.*

Demostración:

Como $\zeta \in W_{loc}^{1,p}(R^n)$ y $e^{\bar{\mu}x} \in W_{loc}^{1,p}(R^n)$ se trata de ver que $\phi \in W_{loc}^{1,p}(R^n)$.

Para ello, veamos primeramente que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i}(\zeta e^{\bar{\mu}x}) = \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} e^{\bar{\mu}x} + \zeta \mu_i e^{\bar{\mu}x} \\ \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i}(\zeta e^{\bar{\mu}x}), \Psi \right\rangle &= (-1) \left\langle \zeta e^{\bar{\mu}x}, \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right\rangle \\ \left\langle \frac{\partial \zeta}{\partial x_i}(e^{\bar{\mu}x}) + \zeta \mu_i e^{\bar{\mu}x}, \Psi \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial \zeta}{\partial x_i}(e^{\bar{\mu}x}), \Psi \right\rangle + \left\langle \zeta \mu_i e^{\bar{\mu}x}, \Psi \right\rangle = \\ &= \left\langle \frac{\partial \zeta}{\partial x_i}, (e^{\bar{\mu}x}) \Psi \right\rangle + \left\langle \zeta, \mu_i (e^{\bar{\mu}x}) \Psi \right\rangle = \\ &= (-1) \left\langle \zeta, \frac{\partial}{\partial x_i}(e^{\bar{\mu}x}) \Psi \right\rangle + \left\langle \zeta, \mu_i (e^{\bar{\mu}x}) \Psi \right\rangle = \\ &= (-1) \left\langle \zeta, (e^{\bar{\mu}x}) \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right\rangle = (-1) \left\langle \zeta(e^{\bar{\mu}x}), \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right\rangle \end{aligned}$$

Por tanto, si K es un compacto, entonces

$$\int_K |\phi|^p = \int_K |\zeta(e^{\bar{\mu}x})|^p \leq M^p \int_K |\zeta|^p < \infty$$

siendo M el máximo de $|e^{\bar{\mu}x}|$

Por otra parte

$$\begin{aligned} \int_K \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|^p &= \int_K \left| \frac{\partial \zeta}{\partial x_i}(e^{\bar{\mu}x}) + \zeta \mu_i (e^{\bar{\mu}x}) \right|^p \leq \\ &\leq 2^p \left\{ M^p \int_K \left| \frac{\partial \zeta}{\partial x_i} \right|^p + M^p |\mu_i| \int_K |\zeta|^p \right\} < \infty \end{aligned}$$

Por lo que ϕ pertenece a $W_{loc}^{1,p}$.

2.2 Existencia y unicidad de solución débil

Consideremos el problema

$$\begin{cases} -\Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi = \delta_b & \text{en } \Omega \\ \phi = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.7)$$

siendo Ω un abierto, cuya frontera es la unión de Γ_0 , y Γ_1 y la intersección de Γ_0 y Γ_1 vacía.

Con estos supuestos, se tiene:

Teorema 2 *Existe una única solución débil de 2.7 en $L^2(\Omega)$.*

Demostración:

Dado el problema

$$\begin{cases} -\Delta\varphi - \bar{v}\nabla\varphi = \Psi & \text{en } \Omega \\ \varphi = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial\varphi}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.8)$$

Para $\Psi \in L^2(\Omega)$, consideramos $\varphi \in H^2(\Omega)$, solución de 2.8. Multiplicando la ecuación 2.7 formalmente por φ e integrando, obtenemos:

$$\int_{\Omega} (-\Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi)\varphi = \int_{\Omega} \delta_b\varphi$$

Al integrar por partes y considerando las condiciones de contorno, queda:

$$\int_{\Omega} (-\Delta\varphi - \bar{v}\nabla\varphi)\phi = \varphi(b) \quad (2.9)$$

Estudiar si existe solución de 2.9, es equivalente al estudio de la existencia de solución de

$$\int_{\Omega} \phi\Psi = \varphi(b) \quad (2.10)$$

donde $\Psi \in L^2(\Omega)$

Definimos el operador L con dominio en $L^2(\Omega)$ en R , de forma que a cada Ψ le hace corresponder φ_b

Por 2.9 y 2.10 el operador está bien definido, es lineal y continuo, por lo que por el teorema de representación [B 87], existe una única $\phi \in L^2(\Omega)$, tal que

$$\int_{\Omega} \phi \Psi = \varphi(b) \quad (2.11)$$

NOTA

Con vistas al tratamiento numérico de la ecuación, es necesario hacer la siguiente precisión:

Los métodos variacionales - en particular, el método de los elementos espectrales es uno de ellos - parten de la formulación integral de la ecuación

$$\int_{\Omega} (-D\Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi)\varphi = \int_{\Omega} \delta(x - x_0)\varphi \quad (2.12)$$

en la que después de integrar por partes y considerar las condiciones de contorno del problema queda

$$\int_{\Omega} (D\nabla\phi \nabla\varphi + \bar{v}\nabla\phi\varphi) = \varphi(x_0) \quad (2.13)$$

Según el resultado anterior, existe una única solución débil del problema

$$\int_{\Omega} (-\Delta\varphi + \bar{v}\nabla\varphi)\phi = \varphi(x_0) \quad (2.14)$$

con $\phi \in L^2(\Omega)$, y $\varphi \in H^2(\Omega)$.

Si suponemos que $\frac{\partial\phi}{\partial x_i} \in L^2(\Omega)$ entonces la solución débil cumple 2.13, y se puede debilitar la exigencia de que $\varphi \in H^2(\Omega)$, pidiendo que $\varphi \in H^1(\Omega)$.

En los capítulos siguientes utilizaremos la formulación 2.13

2.3 Acerca de la función de Green del problema

Sea Ω un abierto de R^n , con borde lipschitziano, L un operador diferencial de orden dos en forma divergencial con coeficientes en $L^\infty(\Omega)$ y estrictamente elíptico sobre Ω , y Γ_0 una parte cerrada de Γ , siendo Γ , la frontera de Ω .

Consideramos el problema mixto:

$$\begin{cases} Lu = f & \text{en } \Omega \\ u = \phi & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \varphi & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.15)$$

Denotamos $N(L, \Gamma_0)$, como el conjunto de las soluciones débiles relativas a $W^{1,2}(\Omega)$ correspondientes a $f = 0$, $\phi = 0$, $\varphi = 0$. En [DL 84] se demuestra que $N(L, \Gamma_0)$ es un espacio de dimensión finita, además de la misma dimensión que $N(L_*, \Gamma_0)$, donde L_* es el adjunto formal de L . Suponiendo $\phi = 0$ y $\varphi = 0$ según [DL 84], si $f \in L^2(\Omega)$ el problema admite una solución sii

$$\int_{\Omega} f v dx = 0 \quad \forall v \in N(L_*, \Gamma_0) \quad (2.16)$$

es decir sii $f \in N(L_*, \Gamma_0)^\perp$ subespacio ortogonal en $L^2(\Omega)$ de $N(L_*, \Gamma_0)$

En [DL 84] se enuncia el siguiente resultado

Teorema 3 *Bajo las hipótesis y notaciones que preceden, existe una única función G definida y continua sobre $\{(x, y) \in \Omega \times \Omega, x \neq y\}$ con $G \in L^1(\Omega \times \Omega)$ verificando:*

(i) *para toda $f \in N(L_*, \Gamma_0)^\perp \cap L^\infty(\Omega)$, la única solución en $N(L_*, \Gamma_0)^\perp$ del problema correspondiente a $\phi = 0$, $\varphi = 0$ está dada por*

$$u(x) = \int_{\Omega} G(x,y)f(y)dy \quad \text{c.p.p. } x \in \Omega \quad (2.17)$$

(ii) para toda $v \in N(L_*, \Gamma_0)$

$$\int_{\Omega} G(x,y)v(y)dy = 0 \quad \text{c.p.p. } x \in \Omega \quad (2.18)$$

Además para toda $y \in \Omega$, la función $G(\bullet, y)$ es solución débil relativa a $W^{1,r}(\Omega)$ para todo $r < \frac{n}{n-1}$ del problema

$$\begin{cases} Lu = f_y & \text{en } \Omega \\ u = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.19)$$

donde f_y es la única medida acotada en Ω tal que

$$\begin{cases} f_y - \delta_y \in N(L_*, \Gamma_0) \\ \int_{\Omega} v(x)df_y(x) = v(y) \quad \forall v \in N(L_*, \Gamma_0) \end{cases} \quad (2.20)$$

Las consecuencias que se pueden extraer para el operador

$$L(\phi) = \Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi \quad (2.21)$$

se deducen del teorema anterior y de la unicidad de la solución débil del problema

$$\begin{cases} L\phi = 0 & \text{en } \Omega \\ \phi = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.22)$$

que es consecuencia de la coercividad del operador

$$M(v) = -\Delta v + kv \quad (2.23)$$

relacionado con L , por medio del cambio anteriormente indicado $\phi = ve^{\bar{\mu}x}$ siendo $\bar{\mu} = (\frac{u_1}{D}, \dots, \frac{u_n}{D})$ y $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$, y se resumen en el siguiente corolario:

Corolario 2 (i) $N(L, \Gamma_0) = 0 = N(L_*, \Gamma_0)$

(ii) Si $f \in L^2(\Omega)$ existe una única solución del problema

$$\begin{cases} L\phi = f & \text{en } \Omega \\ \phi = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.24)$$

(iii) Para toda $f \in L^2(\Omega) \cap L^\infty(\Omega)$ existe una única solución de 2.24, siendo

$$u(x) = \int_{\Omega} G(x, y) f(y) dy \quad \text{c.p.p. } x \in \Omega \quad (2.25)$$

siendo G definida y continua sobre $\{(x, y) \in \Omega \times \Omega, x \neq y\}$ con

$$G \in L^1(\Omega \times \Omega)$$

(iv) Además, para toda $y \in \Omega$, la función $G(\bullet, y)$ es solución débil relativa a $W^{1,r}(\Omega)$ para todo $r < \frac{n}{n-1}$ del problema

$$\begin{cases} Lu = \delta_y & \text{en } \Omega \\ u = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (2.26)$$

Capítulo 3

Estudio físico-matemático de la ecuación

Los algoritmos que presentamos en el trabajo, hacen uso de la información cualitativa que se obtiene del estudio físico-matemático de la ecuación.

Se considera el problema base siguiente, con D y v constantes:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -D\Delta\phi + v\frac{\partial\phi}{\partial x} = \delta(x - x_0)(y - y_0) & \text{en } (0,1) \times (0,1) \\ \phi = 0 & \text{en } x = 0, y = 1, y = 0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } x = 1 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Se toman los ejes según se muestran en la figura y la velocidad en la dirección del eje x . Igualmente distinguiremos las zonas que se indican en la figura 3.1.

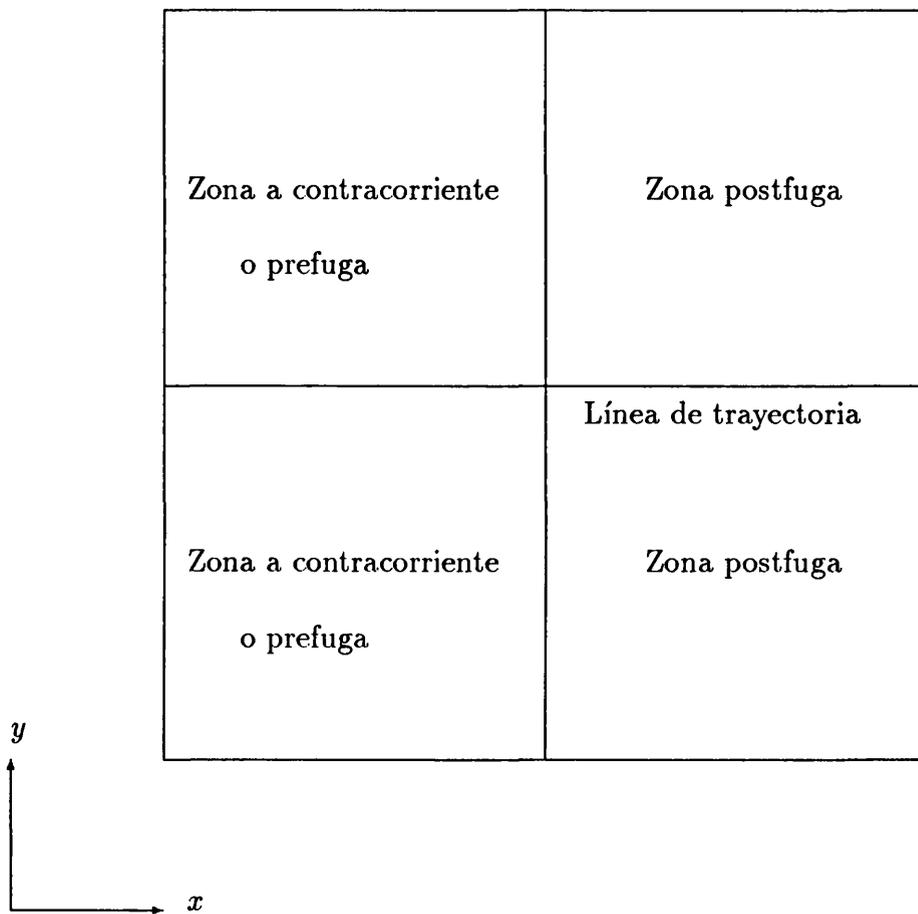


Figura 3.1: Esquema de zonas pre y post-fuga

3.1 Comportamiento de la solución a contracorriente

Si se supone que en la zona a contracorriente, se puede despreciar el término de difusión en la dirección normal a la línea de contracorriente, entonces la ecuación 3.1 quedará reducida a una ecuación de convección-difusión unidimensional con condiciones de contorno Dirichlet

$$\begin{cases} -D \frac{d^2 \phi}{dx^2} + v \frac{d\phi}{dx} = 0 & x \in]-1, 1[\\ \phi = 0 & x = -1 \\ \phi = \phi_f & x = 1 \end{cases} \quad (3.2)$$

siendo ϕ_f el valor (desconocido) de la concentración en las proximidades de la fuga

La solución de esta ecuación es

$$\phi \approx \phi_f e^{(x-1) \frac{v}{D}} \quad (3.3)$$

En este caso, la solución tiene carácter exponencial, resultando ser su orden, $\frac{v}{D}$.

Por tanto, si el término convectivo es preponderante sobre el difusivo la solución tiene carácter exponencial a contracorriente de la fuga puntual. Veamos si es posible precisar algo más sobre este carácter.

Sin despreciar el término difusivo en la dirección normal a la trayectoria, podemos obtener el carácter de la solución en esta zona, a través de la resolución del siguiente problema

$$\begin{cases} -D \Delta \phi + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 & \text{en } (0, 1) \times (0, 1) \\ \phi = 0 & \text{en } x = 0, y = 1, y = 0 \\ \phi = f(y) & \text{en } x = 1 \end{cases} \quad (3.4)$$

siendo $f(y)$ el valor (desconocido) de la ϕ , a lo largo de una línea perpendicular a la trayectoria que pasa por la fuga.

Aplicando el método de separación de variables se obtiene la siguiente solución

$$\phi(x, y) = 2e^{\frac{u}{2D}(x-1)} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_0^1 f(y) \sin m\pi y \right) \frac{\sinh \sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}}x}{\sinh \sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}}} \quad (3.5)$$

Llamamos $A_n(x, y)$ al término general de la serie anterior.

Haciendo uso de la siguiente acotación

$$\frac{\sinh nA_n y}{\sinh nA_n} \leq \frac{e^{-n(1-y)} A_n}{1 - e^{-2A_n}} \quad (3.6)$$

se prueba que

$$\begin{aligned} & 2e^{\frac{u}{2D}(x-1)} |A_n(x, y)| \leq \\ & \leq 2e^{\frac{u}{2D}(x-1)} \frac{e^{-\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}}} }{1 - e^{2\pi}} \int_0^1 |f(y)| dy \end{aligned}$$

Esta acotación permite concluir lo siguiente:

1. La serie converge uniformemente en cada compacto incluido en $[0, 1] \times [0, 1]$ de la forma $[0, 1] \times [0, 1 - \varepsilon]$.
2. Si el dato de contorno se cambia por $Q(y)$ de forma tal que $\max_{y \in [0, 1]} |f(y) - Q(y)| < \varepsilon$ con ε pequeño, puede deducirse que el cambio en la serie diferencia es pequeño, lo cual implica estabilidad respecto al dato de contorno.

Estudiamos el comportamiento numérico de la serie en la línea de la trayectoria para datos de contorno con significado físico, es decir, funciones positivas, simétricas respecto al eje $y = 0.5$, y decrecientes hacia los puntos extremos.

Se supone $D = 0.15e - 04$, y valores de u (velocidad), entre 40 y 500 veces el valor de D .

Para valores de $y = cte.$, se obtienen las siguientes conclusiones:

1. Se puede ajustar una exponencial a los valores obtenidos a lo largo de la línea de contracorriente y paralelas, con orden de correlación 1.
2. El orden de esta exponencial es independiente del dato de contorno, siendo éste aproximadamente $\frac{hu}{2D}$, respecto al elemento de referencia estandar $((-1, 1) \times (-1, 1))$, siendo el coeficiente de correlación de este nuevo ajuste del orden de 0.99999 y siendo h la longitud en x del elemento real $[a, b] \times [a, b]$.

En la figura 3.2 se muestra la representación del orden de la exponencial frente a la velocidad, para datos de contorno construidos por simetrización de las funciones $e^{(25x-0.5)}$, $e^{(5x-0.5)}$ y $x + x^2 + e^{(5x-0.5)} + e^{(25x-0.5)}$, en un recinto $[0, 1] \times [0, 1]$.

3.2 Comportamiento de la solución en la zona postfuga

3.2.1 Sobre la línea de trayectoria

Aislemos un elemento diferencial sobre la trayectoria, como se muestra en la figura 3.3, y evaluemos el comportamiento en un punto suficientemente alejado de la fuga puntual.

Si se supone $v \gg D$, se puede realizar un balance convectivo sobre dicho elemento obteniendo:

$$v_1 \phi_1 h = v_2 \phi_2 h$$

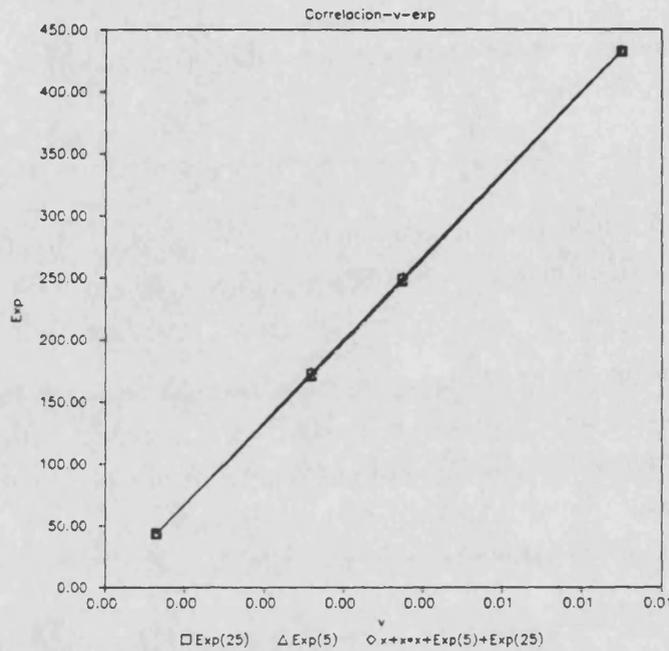


Figura 3.2: Carácter exponencial a contracorriente

$$\frac{v_1 - v_2}{\Delta x} = \frac{v_2 \phi_2 - \phi_1}{\phi_1 \Delta x}$$

Por tanto, si v tiene una variación suave, ϕ variará también de forma suave. De lo cual se deduce que sobre esta línea, y suficientemente alejados de la fuga no aparecen fuertes gradientes en la solución.

Por un razonamiento similar, se llega a la misma conclusión sobre las líneas de corriente paralelas a la trayectoria.

Sin hacer las aproximaciones anteriores, y con vistas a obtener información acerca del carácter de la solución en esta zona, procedemos a resolver el siguiente problema

$$\begin{cases} -D\Delta\phi + u\frac{\partial\phi}{\partial x} = 0 & \text{en } (0,1) \times (0,1) \\ \phi = 0 & \text{en } y = 1, y = 0 \\ \phi = f(y) & \text{en } x = 0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } x = 1 \end{cases} \quad (3.7)$$



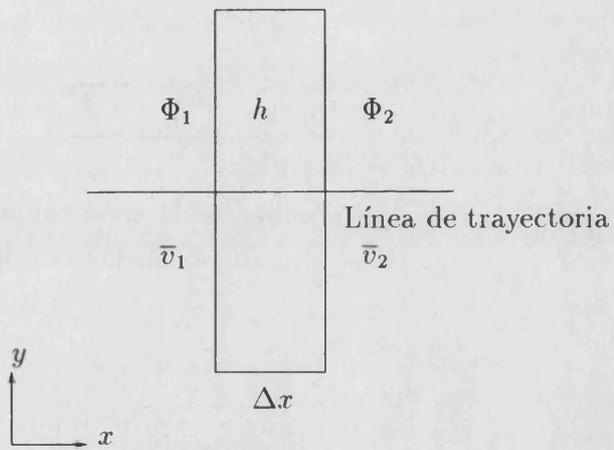


Figura 3.3: Esquema del comportamiento de la solución en las zonas paralelas a la trayectoria

siendo f una función con características análogas a la del apartado anterior.

Por el método de separación de variables se obtiene la siguiente solución:

$$\phi(x, y) = 2e^{\frac{u}{2D}x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\int_0^1 f(y) \sin n\pi y dy}{1 + c_n} F(n, x) \sin n\pi y \quad (3.8)$$

siendo

$$F(n, x) = e^{-\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}^2}x} + c_n e^{\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}^2}x} \quad (3.9)$$

$$c_n = \frac{2u^2 + 4(Dn\pi)^2 - 2u\sqrt{u^2 + 4(Dn\pi)^2}e^{-\sqrt{4n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}^2}}}{4(Dn\pi)^2} \quad (3.10)$$

Haciendo uso de la acotación de los términos de la serie como en el apartado anterior se llega a que éstos permanecen menores o iguales que

$$2e^{\frac{u}{2D}x} \int_0^1 |f(y)| dy \left(e^{-\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}^2}x} + 4e^{\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}^2}(x-1)} \right) \quad (3.11)$$

Se obtienen conclusiones análogas a las del apartado anterior.

Haciendo el análisis numérico de la serie para valores de $y = 0.5$, confirmamos el comportamiento suave de la solución en la línea de trayectoria y paralelas en puntos suficientemente alejados de la fuga.

3.2.2 En las direcciones perpendiculares a la trayectoria

Si se supone la difusión despreciable frente a la convección en la dirección de la trayectoria, consideraremos la ecuación

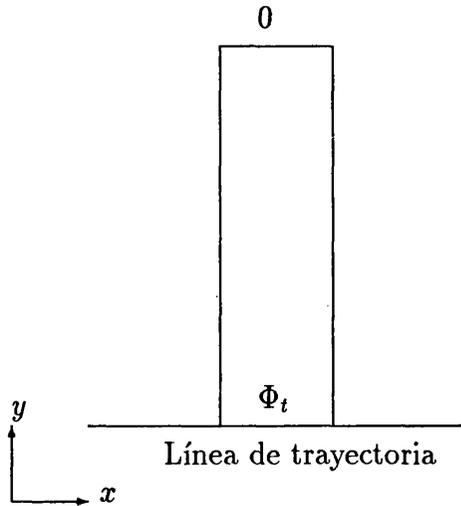


Figura 3.4: Esquema del comportamiento de la solución en las zonas perpendiculares a la trayectoria

$$-D \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + v \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (3.12)$$

Supondremos, en virtud del análisis hecho en el apartado anterior, que $\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx k$, en la rebanada diferencial mostrada en la figura 3.4, por lo que resolviendo la ecuación

$$\begin{cases} -D \frac{d^2 \phi}{dy^2} + vk = 0 & x \in]x_0, x_1[\\ \phi = 0 & x = x_0 \\ \phi = \phi_f & x = x_1 \end{cases} \quad (3.13)$$

se obtiene

$$\phi \approx \phi_f (e^{(y-x_0) \sqrt{\frac{vk}{D}}}) \quad (3.14)$$

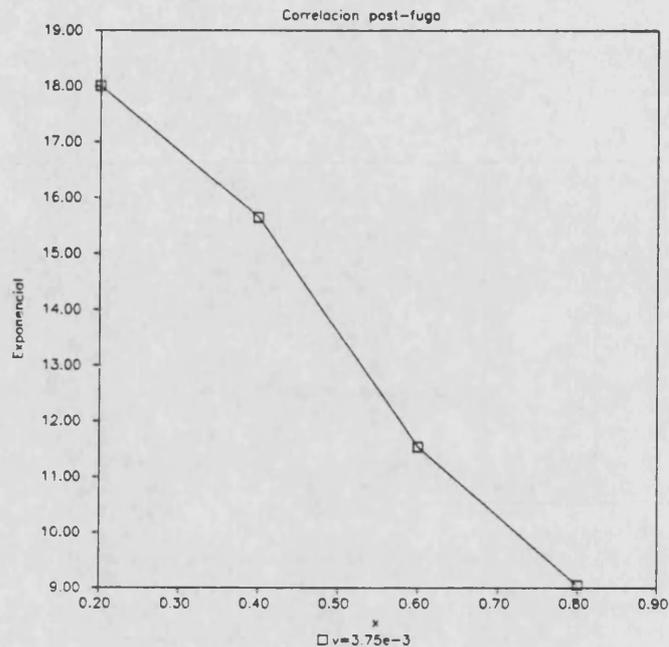


Figura 3.5: Carácter exponencial en la zona postfuga

Realizando el estudio numérico de la serie 3.8, no se pueden obtener conclusiones generales acerca del orden de la exponencial ajustada sobre el intervalo $0 \leq y \leq 0.5$, pues hay dependencia del dato de contorno, de la velocidad y de la distancia al contorno.

En las figuras 3.5 y 3.6, se observa el orden de las exponenciales referidas a un elemento $[-1, 1] \times [-1, 1]$, transformado a partir del dominio $[0, 1] \times [0, 1]$ utilizado para la obtención de la serie.

En caso de que el dominio de la ecuación 3.7 sea $(a, b) \times (a, b)$, el orden de la exponencial sobre el elemento de referencia $(-1, 1) \times (-1, 1)$, vendrá dado por $\frac{(b-a)m}{4}$, donde m representa el orden de la exponencial obtenida en 3.8.

A la vista de los resultados presentados en las figuras 3.5, y 3.6 se llega a las siguientes conclusiones:

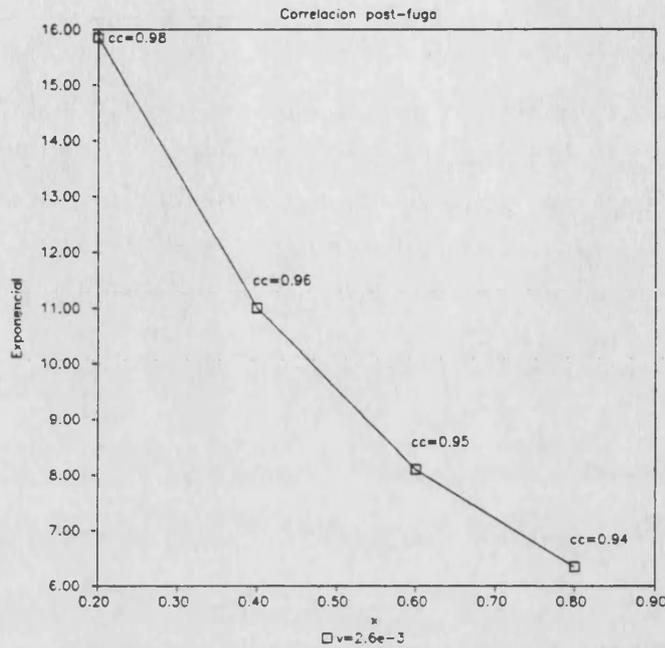


Figura 3.6: Carácter exponencial en la zona postfuga

1. Para $v = cte.$ y tomando valores entre $25D$ y $500D$ la solución puede ajustarse a una exponencial cuyo orden varía en función de x , disminuyendo al alejarnos del contorno en el sentido de la convección.
2. Conforme v aumenta, el intervalo de variación en x del exponente se reduce, aumentando para cada x el orden de la exponencial de ajuste.

3.3 Conclusiones globales

El estudio físico-matemático anterior, conduce a los siguientes resultados:

1. En la zona a contracorriente aparecen fuertes gradientes localizados en el punto fuente, pudiendo ajustarse una exponencial del

orden de $\frac{uh}{2D}$

2. En la zona postfuga, en la dirección de la trayectoria, la variación de la solución es suave, excepto en la fuente. En esta misma zona, en las direcciones perpendiculares a la trayectoria aparecen fuertes gradientes en la solución, pudiendo ajustarse a la misma, un rango de exponenciales que son función de la distancia al contorno, de la velocidad del medio y del dato de contorno.

Capítulo 4

Revista de métodos espectrales

4.1 Esquemas espectrales

Los métodos espectrales han sido definidos por Canuto, Hussaini, Quarteroni y Zang [CHQZ 88] como técnicas de residuos ponderados mono-dominio, en las que las funciones utilizadas en la aproximación de la solución son infinitamente diferenciables, (distinguiéndose de esta manera de las técnicas de elementos finitos o diferencias finitas) globales, y obtenidas en general a partir del producto tensorial de las autofunciones asociadas a problemas de Sturm-Liouville singulares (polinomios ortogonales) para la aproximación de funciones no periódicas o del producto tensorial de polinomios trigonométricos para el caso periódico.

La elección de las funciones de peso distinguen los tres esquemas espectrales más comunes: versión Galerkin, Tau, y Colocación.

En la versión Galerkin se toman las mismas funciones para aproximar la solución y para pesar el residuo, verificando cada una de ellas las condiciones de contorno. La ecuación diferencial es algebrizada exigiendo que la integral del residuo pesado con cada función de ponderación sea cero.

El método Tau es similar al Galerkin excepto en el hecho de que las funciones no deben satisfacer necesariamente las condiciones de contorno. La exigencia de estas condiciones genera un conjunto de ecuaciones a añadir a las ecuaciones resultantes de la discretización de la ecuación. En el método de colocación se toman como funciones de peso, deltas de Dirac sobre los puntos de colocación, lo cual es análogo a exigir en estos últimos la verificación de la ecuación diferencial.

De entre los tres métodos, ha sido el tercero el que más se ha desarrollado debido a su generalidad y fácil implementación. En [CQ 84] se puede encontrar más información acerca de los dos primeros. Vamos a hacer un pequeño resumen del tercero, dado que es el método que más tarde aplicaremos sobre la ecuación de convección-difusión. Consideramos en particular el método pseudoespectral de Chebyshev.

En este método, los puntos de interpolación están sobre el intervalo $[-1, 1]$ y se eligen en los puntos de anulación de la derivada del polinomio N -ésimo, para una aproximación de grado N . Al ser la derivada de grado $N - 1$, si añadimos los puntos -1 y 1 , se obtienen $N + 1$ puntos que dan una aproximación de grado N .

Elegimos pues, los puntos según:

$$x_j = \cos \frac{\pi j}{N} \quad (j = 0, \dots, N) \quad (4.1)$$

donde el polinomio de Chebyshev de grado N viene dado por la expresión

$$T_n(x) = \cos(n \cos^{-1} x) \quad (4.2)$$

Para contruir la interpolación de una función $f(x)$ se definen los interpolantes Lagrangianos

$$g_j(x) = \frac{(1-x^2)T'_N(x)(-1)^{j+1}}{\bar{c}_j N^2 (x-x_j)} \quad (4.3)$$

$$\begin{cases} j = 0, \dots, N \\ \bar{c}_0 = \bar{c}_N = 2 \\ \bar{c}_j = 1 \quad (1 \leq j \leq N-1) \end{cases}$$

verificándose

$$g_j(x_k) = \delta_{jk} \quad (4.4)$$

siendo δ_{jk} la delta de Kroneker. De esta manera se obtiene para una función f , que la interpolación polinomial de grado N es:

$$P_N f(x) = \sum_{j=0}^N f(x_j) g_j(x) \quad (4.5)$$

De igual manera se pueden aproximar las derivadas de $f(x)$ por:

$$\frac{d^p P_N f(x)}{dx^p} = \sum_{j=0}^N f(x_j) \frac{d^p}{dx^p} g_j(x) \quad (4.6)$$

y particularizando en los puntos de colocación

$$\frac{d^p P_N f(x_k)}{dx^p} = \sum_{j=0}^N f(x_j) \frac{d^p}{dx^p} g_j(x_k) \quad (4.7)$$

Llamando

$$(D_p)_{k,j} = \frac{d^p}{dx^p} g_j(x_k)$$

se obtiene

$$\left\{ (D_1)_{k,j} = \frac{\bar{c}_k (-1)^{j+k}}{\bar{c}_j (x_k - x_j)} \quad (D_1)_{j,j} = \frac{x_j}{2(1-x_j^2)} \quad (D_1)_{0,0} = \frac{2N^2+1}{6} \right\} \quad (4.8)$$

y

$$(D_p) = (D_1)^p \quad (4.9)$$

A partir de las fórmulas de interpolación de una función y sus derivadas, el método de colocación se construye de la manera siguiente:

Se considera un operador diferencial lineal L y la ecuación

$$L(u) = f \quad (4.10)$$

siendo f una función cuyo valor en los puntos de colocación es calculable. Fijado un orden de aproximación en cada dirección espacial (N_x, N_y) , se obtienen los puntos de colocación como los nodos de la rejilla construida a partir del producto cartesiano de los puntos de colocación en cada dirección.

Se considera la formulación variacional de la ecuación:

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (L(u) - f)\Psi = 0 \quad (4.11)$$

Aproximando u según el producto tensorial de las bases en cada dirección:

$$u^N = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} u(x_i, y_j) g_i(x) g_j(y) \quad (4.12)$$

y eligiendo

$$\{\Psi_{ij}\}_{i,j=0}^{N_x, N_y} = \delta(x - x_i) \delta(y - y_j) \quad (4.13)$$

se obtiene un sistema algebraico de ecuaciones

$$L_d(u^N)|_{(x_i, y_j)} = f(x_i, y_j) \quad (4.14)$$

$$i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 1, \dots, N_y - 1$$

siendo $L_d(u^N)$ la discretización del operador actuando sobre la aproximación u^N de u , que viene dada por las fórmulas anteriores.

4.2 Método de los elementos espectrales

El método de los elementos espectrales es una técnica de residuos ponderados de alto orden para EDP, que combina la flexibilidad geométrica de las técnicas de elementos finitos con el alto ratio de convergencia de los esquemas espectrales [MP 88,P 84,R 88].

En la discretización por elementos espectrales, el dominio se divide en macroelementos espectrales y las funciones se aproximan según el producto tensorial de bases polinomiales de grado N en cada subdominio. Para obtener las ecuaciones discretas, se usan operadores de proyección variacional y fórmulas de cuadratura Gaussiana.

La convergencia a la solución exacta se consigue incrementando el grado N de la aproximación polinomial, mientras mantenemos fijo el número e identidad de los macroelementos.

Este método se diferencia de las versiones no variacionales multidominio, en el grado de continuidad requerido entre elementos y en la vía por la cual esta continuidad es impuesta [O 80,Mo 84]. Por lo que respecta a la evaluación del método hay que señalar:

- En cuanto a la convergencia, el método es óptimo en el sentido de que el error que se produce es a lo sumo una constante multiplicativa del mayor error posible en la aproximación del espacio polinomial [MP 88]. Como el error en una aproximación polinomial depende de la suavidad de la solución, se concluye que el método de los elementos espectrales es muy apropiado cuando el problema tiene un alto grado de regularidad.
- En cuanto a la eficiencia, es decir el esfuerzo computacional necesario para alcanzar un nivel dado de convergencia, se tiene que el método es más eficiente que las h-técnicas en el caso de soluciones suaves [R 88,Ma 89,MP 88].

- En cuanto al campo de aplicación, la definición de los elementos "mortar" ha dado al método una gran flexibilidad, pudiendo combinarse la descomposición local del dominio y la utilización de alto orden en la interpolación [BMP 90, BMMP 89, BM 89, MMP 88, Ma 89].

Con vistas a la presentación del método se considera la ecuación de Poisson como un caso particular de la ecuación de convección-difusión sin término convectivo.

4.2.1 Ecuación de difusión

Sea la ecuación unidimensional

$$\begin{cases} \frac{d^2 u}{dx^2} = f(x) & \text{en } \Omega = (-1, 1) \\ u = 0 & \text{en } x = -1 \\ u = 0 & \text{en } x = 1 \end{cases} \quad (4.15)$$

Se utiliza la formulación variacional del problema para generar un esquema de aproximación:

Encontrar una $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que

$$\forall v \in H_0^1(\Omega) \quad \int_{\Omega} \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx = \int_{\Omega} f(x)v(x)dx \quad (4.16)$$

o en forma compacta:

Encontrar una $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que

$$\forall v \in H_0^1(\Omega), \quad a(u, v) = (f, v) \quad (4.17)$$

siendo $a(u, v) = \int_{\Omega} \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} dx$ una forma bilineal y continua.

Se procede a la discretización con elementos espectrales, eligiendo un par de enteros positivos $h = (N, K)$, y dividiendo el dominio en subdominios (elementos espectrales)

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^K \Omega_k$$

donde el k -ésimo intervalo tiene como longitud l_k .

Se puede aproximar la solución u , en un subespacio X_h de $H_0^1(\Omega)$.

Para ello se define primeramente $P_N^K(\Omega)$

$$P_N^K(\Omega) = \{ \Phi \in L^2(\Omega), \Phi|_{\Omega_k} \in P_N(\Omega_k) \} \quad (4.18)$$

donde $P_N^K(\Omega)$ denota el espacio de todos los polinomios de grado menor o igual que N .

Definimos

$$X_h = H_0^1(\Omega) \cap P_N^K(\Omega) \quad (4.19)$$

El problema discreto consiste ahora en :

Encontrar una $u_h \in X_h$ tal que

$$\forall v_h \in X_h, a(u_h, v_h) = (f, v_h) \quad (4.20)$$

La discretización es Galerkin, y puede ser implementada utilizando una adecuada fórmula de cuadratura en combinación con una base del espacio de aproximación. En particular tomando una fórmula de tipo Gauss-Lobato para polinomios de Legendre.

Si se define por L_n , el polinomio de Legendre de grado n , los puntos de colocación de la cuadratura de Gauss-Lobato vienen dados por ξ_i siendo

$$\xi_0 = -1 \quad \xi_N = 1 \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N-1\}, L'_N(\xi_i) = 0 \quad (4.21)$$

Los pesos ρ_i , $0 \leq i \leq N$, se toman de forma que se satisfaga:

$$\forall \Phi \in P_{2N-1}(\Omega), \quad \sum_{i=0}^N \Phi(\xi_i) \rho_i = \int_{\Omega} \Phi(r) dr \quad (4.22)$$

Utilizando ahora una transformación afín, para llevar cada elemento espectral $x \in \Omega_k$ a $r \in \Omega$ siendo Ω el elemento de referencia. De forma global definimos $\Omega_k = [a_k, a_{k+1}]$; los puntos globales de integración $\xi_{i,k}$ con $0 \leq i \leq N$ y $1 \leq k \leq K$ vienen definidos de la forma siguiente:

$$\forall i, \quad \forall k, \quad \xi_{i,k} = a_k + (\xi_i + 1) \frac{h_k}{2}, \quad \rho_{i,k} = \frac{\rho_i h_k}{2} \quad (4.23)$$

Utilizando la fórmula de Gauss-Lobato para efectuar las integrales que aparecen en la formulación variacional del problema se llega a:

Encontrar una $u_h \in X_h$ tal que

$$\forall v_h \in X_h, \quad \sum_{k=1}^K \sum_{i=0}^N \frac{du_h}{dx}(\xi_{i,k}) \frac{dv_h}{dx}(\xi_{i,k}) \rho_{i,k} = \sum_{k=1}^K \sum_{i=0}^N f(\xi_{i,k}) v_h(\xi_{i,k}) \rho_{i,k} \quad (4.24)$$

La base para efectuar la aproximación se toma de forma que se obtenga un buen condicionamiento del sistema algebraico. El candidato natural para la base de X_h son los interpolantes Lagrangianos:

$$w_h^k = \sum_{i=0}^N w_i^k h_i(r) \quad (4.25)$$

siendo

$$h_i \in P_N(\Omega), \quad h_i(\xi_j) = \delta_{ij}, \quad \forall i, j \in \{0, \dots, N\}^2, \quad w_i^k = w_h^k(\xi_{i,k}) \quad (4.26)$$

Se tiene que $w_N^k = w_0^{k+1}$ para todo $k \in \{1, \dots, K-1\}$ e imponemos $w_0^1 = w_N^K = 0$.

Eligiendo como interpolantes h_i los deducidos de los polinomios de Legendre, se obtiene

$$h_j = -\frac{1}{N(N+1)L_N(z_j)} \frac{(1-x^2)L'_N(z)}{x-x_j} \quad (4.27)$$

llegándose a

$$\sum_{k=1}^K \sum_{j=0}^N C_{ij}^k u_j^k = \sum_{k=1}^K \sum_{j=0}^N B_{ij}^k f_j^k \quad (4.28)$$

donde

$$\begin{aligned} C_{ij}^k &= \frac{4}{l_k^2} \sum_{q=0}^N D_{qi} D_{qj} \rho_{qk} \\ B_{ij}^k &= \rho_{ik} \delta_{ik} \\ D_{ij} &= \left. \frac{dh_j}{dz} \right|_{\xi_i} \\ f_j^k &= f(\xi_{jk}) \end{aligned} \quad (4.29)$$

De esta manera eligiendo interpolantes y cuadratura de Gauss-Lobato, las matrices de rigidez elementales son diagonales.

Otro punto de interés es la determinación de la magnitud del error cuando N tiende a infinito.

Por lo que respecta a la aproximación por polinomios de alto grado Canuto y Quarteroni [CQ 82] demuestran que, para el caso de un dominio simple, si asumimos que $u \in H^\sigma(\Omega)$ para $\sigma > 0$

$$\inf_{v_h \in P_{N,K}(\Omega)} \|u - v_h\| \leq CN^{-\sigma} \|u\|_\sigma \quad (4.30)$$

De igual manera, ha sido probado por Maday, Patera y Ronquist, que si suponemos u localmente regular, o sea, que para cada k , la restricción $u|_{\Omega_k}$ pertenece a $H^\sigma(\Omega_k)$, entonces

$$\inf_{v_h \in X_h(\Omega)} \|u - v_h\| \leq CN^{1-\sigma} \left\{ \|u\|_1 + \sum_{k=1}^K \|u\|_{H^\sigma(\Omega_k)} \right\} \quad (4.31)$$

Lo anterior está relacionado con el error de la mejor aproximación. Si consideramos el error debido a la interpolación de una función Φ por interpolantes en los nodos de Gauss-Lobato, se obtiene que si $\Phi \in H^\rho(\Omega)$, $\rho > 1/2$, entonces

$$\|\Phi - I_h \Phi\| \leq CN^{1/2-\rho} \|\Phi\|_\rho \quad (4.32)$$

Apoyándose en los resultados anteriores, Canuto y Quarteroni [CQ 84] prueban que la discretización por elementos espectrales es óptima en el sentido que el error de discretización está acotado por la mejor aproximación a u y f por elementos de $P_{N,K}(\Omega)$, es decir

$$\|u - u_h\|_1 \leq CN^{1-\sigma} \|u\|_\sigma + N^{1-\rho} \|f\|_\rho \quad (4.33)$$

Para el caso bidimensional, si consideramos la ecuación

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{en } \Omega \\ u = 0 & \text{en } \delta\Omega \end{cases} \quad (4.34)$$

la formulación variacional viene dada por:

Encontrar una $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que

$$\forall v \in H_0^1(\Omega), \int_{\Omega} \nabla u \nabla v = \int_{\Omega} f v \quad (4.35)$$

o en forma compacta:

Encontrar una $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que

$$\forall v \in H_0^1(\Omega), a(u, v) = (f, v) \quad (4.36)$$

La discretización por elementos espectrales procede a dividir el dominio Ω en elementos Ω_k .

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^K \Omega_k, \quad \Omega_k =]a_k, a'_k[\times]b_k, b'_k[\quad (4.37)$$

Definimos $P_N^K(\Omega)$ como

$$P_N^K(\Omega) = \left\{ \Phi \in L^2(\Omega), \Phi|_{\Omega_k} \in P_N(\Omega_k) \right\} \quad (4.38)$$

donde $P_N^K(\Omega)$ denota el espacio de todos los polinomios de grado menor o igual que N .

Definimos

$$X_h = H_0^1(\Omega) \cap P_N^K(\Omega) \quad (4.39)$$

El problema discreto consiste ahora en :

Encontrar una $u_h \in X_h$ tal que

$$\forall v_h \in X_h, \quad a(u_h, v_h) = (f, v_h) \quad (4.40)$$

Utilizando una transformación geométrica al elemento de referencia $] -1, 1[\times] -1, 1[$, y una doble cuadratura de Gauss-Lobato-Legendre se obtiene:

$$\begin{aligned} \forall v_h \in X_h, \\ \sum_{k=1}^K \sum_{p=0}^N \sum_{q=0}^N \nabla u_h(\xi_{p,k}^1, \xi_{q,k}^2) \nabla v_h(\xi_{p,k}^1, \xi_{q,k}^2) \rho_{p,k}^1 \rho_{q,k}^2 = \\ = \sum_{k=1}^K \sum_{p=0}^N \sum_{q=0}^N (f v_h)(\xi_{p,k}^1, \xi_{q,k}^2) \rho_{p,k}^1 \rho_{q,k}^2 \end{aligned} \quad (4.41)$$

donde $\xi_{p,k}^1$, $\xi_{q,k}^2$ son los puntos de Gauss-Lobato en el elemento de referencia

$$\forall i, \quad \forall k, \quad \xi_{i,k}^1 = a_k + \frac{(\xi_i+1)}{2}(a'_k - a_k) \quad (4.42)$$

$$\forall i, \quad \forall k, \quad \xi_{i,k}^2 = b_k + \frac{(\xi_i+1)}{2}(b'_k - b_k) \quad (4.43)$$

Utilizando interpolantes Gauss-Lobato-Lagrangianos obtenidos por producto tensorial de los interpolantes unidimensionales, se obtiene un sistema de ecuaciones lineal.

Es posible obtener estimadores de error del tipo

$$\|u - u_h\|_1 \leq C N^{1-\sigma} \|u\|_\sigma + N^{1-\rho} \|f\|_\rho \quad (4.44)$$

4.3 Elementos espectrales no conformes. Espacios mortar

Vamos a desarrollar no conformidades de tipo geométrico con vistas a la mayor flexibilidad del método. En la formulación conforme, se supone que los elementos espectrales se construyen satisfaciendo las condiciones:

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^K \Omega_k \quad (4.45)$$

y la intersección entre dos elementos adyacentes es un lado entero de ambos o un vértice.

Si eliminamos la segunda condición la aproximación dejará de ser conforme, teniendo una nueva fuente de error (error de consistencia). En este caso el espacio de aproximación X_h ya no es un subespacio del H_0^1 . En [Ma 89] se presenta una técnica no conforme en la cual los errores de consistencia son del mismo orden que los de aproximación.

Veamos la discretización geométrica, antes de introducir el espacio de aproximación X_h . El dominio se divide en K subdominios rectangulares, siendo sus lados paralelos a los ejes coordenados. Para cada k , los lados se denotan por

$$\Gamma^{k,l}, \quad l = 1, \dots, 4 \quad (4.46)$$

con

$$\partial\Omega^k = \bigcup_{l=1}^4 \Gamma^{k,l}$$

Introducimos ahora el conjunto de los "mortar" γ^p donde

$$\begin{aligned} \gamma^p &= \text{int}(\overline{\Omega^k} \cap \overline{\Omega^l}) \\ \gamma^p &= \text{int}(\overline{\Omega^k} \cap \partial\overline{\Omega}) \end{aligned} \quad (4.47)$$

La intersección de las clausuras de los mortar es el conjunto de vértices ϑ , compuesto por los elementos:

$$\vartheta^q = \overline{\gamma^m} \cap \overline{\gamma^n} \quad (4.48)$$

donde q es una numeración arbitraria de todos los pares (m, n) para los cuales $\overline{\gamma^m} \cap \overline{\gamma^n}$ es no vacía.

Se define el esqueleto del sistema mortar como

$$\mathcal{S} = \bigcup_{p=1}^M \overline{\gamma^p} = \bigcup_{k=1}^K \partial\overline{\Omega^k} \quad (4.49)$$

Para definir el espacio no conforme X_h se introduce espacio mortar

$$W_h = \left\{ \Phi \in C^0(\mathcal{S}) / (\Phi)|_{\gamma^p} \in P_N(\gamma^p) \text{ y } \Phi|_{\partial\Omega} = 0 \right\} \quad (4.50)$$

El espacio no-conforme X_h se toma como

$$X_h = \left\{ v \in L^2(\Omega) / v|_{\Omega^k} \in P_N(\Omega^k) \text{ y } \exists \Phi \in W_h \text{ que cumple } a^* \text{ y } b^* \right\} \quad (4.51)$$

siendo a^* (condición de vértice)

$$v|_{\Omega^k}(\vartheta^q) = \Phi(\vartheta^q), \quad \forall \vartheta^q \text{ de } \Omega^k \quad (4.52)$$

y siendo b^* (condición L^2)

$$\forall \Psi \in P_{N-2}(\Gamma^{k,l}), \quad \int_{\gamma^{k,l}} (v|_{\Omega^k} - \Phi)\Psi = 0 \quad (4.53)$$

donde h representa el parámetro de la discretización.

El esquema basado en la definición de X_h es óptimo en el sentido de que el error de consistencia se mantiene pequeño por la combinación de la condición L^2 y la condición de vértice. La condición L^2 asegura que

el salto entre funciones es pequeño en el interior de los contornos internos, mientras que la condición de vértice asegura la continuidad en los puntos en los que la derivada normal tiene más de un sentido.[BMP 90]

Los espacios W_h y X_h tienen bases simples que dan eficiencia a los algoritmos de descomposición del dominio.

Para el espacio W_h escribiremos:

$$\Phi|_{\gamma^p} = \sum_{j=0}^N \Phi_{\gamma^p}^j h_j^N(s) \quad (4.54)$$

$$\forall p \in \{1, \dots, M\}$$

Para el espacio X_h se tiene:

$$v|_{\Omega^k} = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N v_{ij}^k h_i^N(x) h_j^N(y) \quad (4.55)$$

$$\forall k \in \{1, \dots, K\}$$

La aproximación de Ψ es:

$$\Psi|_{\Gamma^{k,l}} = \sum_{q=1}^{N-1} \beta_q \eta_q^{N-2}(s) \quad (4.56)$$

donde

$$\forall q \in \{1, \dots, N-1\}, \quad \eta_q^{N-2}(z) = (-1)^{N-q} \frac{L_N^k(z)}{z_q - z} \quad z \in]-1, 1[\quad (4.57)$$

Para calcular la proyección se utiliza una cuadratura de Gauss-Lobato de $N+1$ puntos en los lados y en los segmentos mortar. Así tendremos:

$$\forall i, j \in \{1, \dots, N-1\}^2$$

$$\int_{\Gamma^{k,l}} v \Psi \rightarrow \overline{B_{ij}} = (-1)^{N-i} \frac{|\Gamma^{k,l}|}{2} (-L''_N(\zeta_i)) \rho_i \delta_{ij} \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma^{k,l}} \Phi \Psi &= \sum_p \int_{\gamma^p} \Phi|_{\gamma^p} \Psi \rightarrow \\ \rightarrow \overline{P_{ij}} &= \eta_i^{N-2} \frac{|\gamma^p|}{2} \left(2 \frac{s_0}{|\Gamma^{k,l}|} - 1 + (\zeta_j + 1) \frac{|\gamma^p|}{|\Gamma^{k,l}|} \right) \rho_j - \\ &- \begin{cases} \frac{|\gamma^p|}{2} \eta_i^{N-2} (-1) \rho_0 \delta_{0,j} & si \quad s_0 = 0 \\ \frac{|\gamma^p|}{2} \eta_i^{N-2} (1) \rho_N \delta_{N,j} & si \quad s_0 + |\gamma^p| = |\Gamma^{k,l}| \end{cases} \end{aligned} \quad (4.59)$$

Teniendo en cuenta las expresiones anteriores que evalúan la condición L^2 se llega a:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N-1} \overline{B_{ij}} v_j &= \sum_p \sum_{j=0}^N \overline{P_{ij}} \Phi_j \\ \forall i &\in \{1, \dots, N-1\} \end{aligned} \quad (4.60)$$

Denotamos por

$$\overline{Q} = \overline{B}^{-1} \overline{P} \quad (4.61)$$

con lo cual

$$\left\{ \begin{array}{l} v_{ij,interior}^k \quad \forall k \\ v_{ij,interfase}^k \quad \forall k \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} [I] \quad 0 \\ 0 \quad \overline{Q} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} v_{ij,interior}^k \quad \forall k, \forall q \\ \Phi(\vartheta^q), \Phi_j^p \quad \forall p, j = 1, \dots, N-1 \end{array} \right\} \quad (4.62)$$

$$v^{*k} = Q^k v^k \quad (4.63)$$

$$\forall p / \gamma^p \subset \text{interfase}$$

Capítulo 5

Aplicación de los métodos espectrales a la ecuación de convección-difusión

El objetivo de este apartado es doble:

- Por una parte, presentar la formulación de los métodos espectrales para la ecuación de convección-difusión (métodos de colocación y elementos espectrales);
- Por otra, estudiar qué limitaciones tienen en su aplicación, así como qué estrategias permiten la aceleración de la convergencia del método.

En lugar de abordar el problema general planteado en la modelización (ver capítulo 1), se parte de un problema más simple:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -D\Delta\phi + v\frac{\partial\phi}{\partial x} = \delta(x - x_0)(y - y_0) & \text{en } (0,1) \times (0,1) \\ \phi = 0 & \text{en } x = 0, y = 1, y = 0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } x = 1 \end{array} \right. \quad (5.1)$$

Consideraremos los ejes y la dirección de la velocidad según se muestran en la figura 3.1. Igualmente distinguiremos las zonas que se indican en la figura 3.1

Comenzamos con un estudio unidimensional del problema a partir del cual deducir estrategias de aceleración de la convergencia del método adecuadas al problema.

5.1 Ecuación de convección-difusión unidimensional

5.1.1 Método de colocación

Consideramos la ecuación

$$\begin{cases} -D \frac{d^2 \phi}{dx^2} + v \frac{d\phi}{dx} = f(x) & x \in]0, 1[\\ \phi = 0 & x = 0 \\ \frac{d\phi}{dx} = 0 & x = 1 \end{cases} \quad (5.2)$$

La discretización de la ecuación utilizando una técnica de colocación pseudoespectral conduce al sistema de ecuaciones

$$-D \sum_{n=0}^N \phi_i \left. \frac{d^2 h_i(x)}{dx^2} \right|_{x_j} + v \sum_0^N \phi_i \left. \frac{dh_i(x)}{dx} \right|_{x_j} = f(x_j) \quad (5.3)$$

$$1 \leq j \leq N - 1$$

que junto con las dos ecuaciones que provienen de la discretización de las condiciones de contorno, produce un sistema de $N+1$ ecuaciones con $N+1$ incógnitas, siendo $h_i(x)$ ($i = 0 \dots, N$) las funciones de forma asociadas a la discretización espectral.

Para el caso en que $f(x) = \delta(x - x_0)$, el término $\delta(x - x_0)|_{x_j}$, carece de sentido.

Para dar sentido al método, utilizaremos el hecho de que el método de colocación es equivalente a un método variacional en un sólo dominio, en el que se utilicen para la discretización fórmulas de cuadratura de Gauss-Lobato [BM 89].

Sea

$$\{h_i(x)\}_{i=0}^N$$

una base de funciones de interpolación sobre una rejilla de puntos

$$\{x_i\}_{i=0}^N$$

siendo éstos, los ceros de la derivada del polinomio de Chebyshev de grado N , a los que añadimos los extremos del intervalo $[-1, 1]$. Consideramos la ecuación

$$\begin{cases} -D \frac{d^2 \phi}{dx^2} + v \frac{d\phi}{dx} = \delta(x - x_0) & x \in I =]-1, 1[\\ \phi = 0 & x = -1 \\ \frac{d\phi}{dx} = 0 & x = 1 \end{cases} \quad (5.4)$$

Multiplicando por φ , e integrando:

$$\int_I \left(-D \frac{d^2 \phi}{dx^2} + v \frac{d\phi}{dx} \right) \varphi = \int_I \delta(x - x_0) \varphi \quad (5.5)$$

Eligiendo $\varphi = h_i(x)$, con $i = 1, \dots, N - 1$

obtenemos el sistema

$$\int_I \left(-D \frac{d^2 \phi}{dx^2} + v \frac{d\phi}{dx} \right) h_i = \int_I \delta(x - x_0) h_i \quad (5.6)$$

y utilizando fórmulas de cuadratura de Gauss-Lobato:

$$\begin{aligned} & -D \sum_{k=0}^N \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} h_i(x) \rho_k \Big|_{x_k} + v \sum_{k=0}^N \frac{d\phi(x)}{dx} h_i(x) \rho_k \Big|_{x_k} = \\ & = -D \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} \rho_i \Big|_{x_i} + v \frac{d\phi(x)}{dx} \rho_i \Big|_{x_i} = h_i(x_0) = \end{aligned}$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{si } x_0 \neq x_i \\ 1 & \text{si } x_0 = x_i \end{cases}$$

$$1 \leq i \leq N - 1$$

Resultados numéricos

Se considera la función de Green del problema $G(x, \zeta)$, que para el caso unidimensional es conocida y viene dada por:

$$\begin{cases} \frac{k}{v} \left(e^{\frac{v}{D}(x-\zeta_0)} - e^{-\frac{v}{D}\zeta_0} \right) & x \leq \zeta_0 \\ \frac{k}{v} \left(1 - e^{-\frac{v}{D}\zeta_0} \right) & x > \zeta_0 \end{cases} \quad (5.7)$$

donde ζ_0 es el punto donde se localiza la fuga, y k el valor de la misma. En la figura 5.1 comparamos la función de Green, con la solución obtenida de la resolución de la ecuación con las siguientes condiciones:

- $v = 2.6e - 3$
- $D = 0.15e - 4$
- $k = 2$ y la fuga localizada en $x = 0.5$
- El dominio es el intervalo $[0, 1]$
- Se trabaja con 100 puntos.

Conclusiones

El método de colocación produce soluciones numéricas oscilatorias en un entorno de la fuga. La razón de este comportamiento oscilatorio hay que buscarla en el fenómeno de Gibbs [GO 77,CHQZ 88].

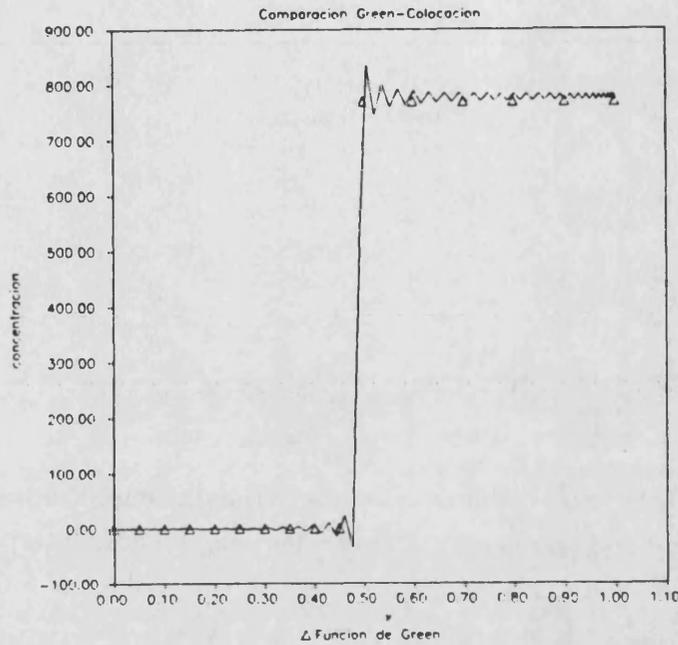


Figura 5.1: Comparación Green-Colocación

Es posible reducir el intervalo de oscilación de la solución, pero a costa de aumentar el grado del polinomio interpolador, ocurriendo esto, para grados de polinomio superiores a 150.

5.1.2 Elementos espectrales

Partiendo de la formulación variacional (para el caso unidimensional) que hemos indicado en 2.13. Tomamos V_h como espacio de aproximación, siendo

$$V_h = \left\{ \phi_h \in C^0(\Omega) / (\phi_h)|_{\Omega^k} \in P_N(\Omega^k) \text{ y } \phi(0) = 0, \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=1} = 0 \text{ y } v|_{\Omega^k} = v|_{\Omega^l} \right\} \quad (5.8)$$

siendo

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^{nelem} \Omega^k$$

un mallado de elementos espectrales.

Por tanto el problema es encontrar una $\phi_h \in V_h$ tal que para toda $\varphi_h \in V_h$ se cumpla:

$$\sum_{\Omega_k} \int_{\Omega} -D \frac{d\phi_h}{dx} \frac{d\varphi_h}{dx} + \frac{d\phi_h}{dx} \varphi_h = \sum_{\Omega_k} \int_I A \delta(x - x_0) \varphi_h \quad (5.9)$$

Trabajando sobre una malla regular, vuelven a darse soluciones oscilatorias, teniendo que aumentar el grado del polinomio de interpolación sobre cada elemento de manera considerable, para obtener soluciones precisas y no oscilatorias.

Es posible desarrollar una estrategia de adaptación de la malla y del grado de interpolación que acelere la convergencia del método.

El procedimiento, consiste en la localización del fuerte gradiente de la solución para realizar una partición no uniforme del dominio, recogiendo en un elemento espectral de alto orden, la fuerte variación de la función.

Para este fin, se procede a eliminar el término fuente de la ecuación e imponer una condición de tipo Dirichlet en el punto donde se localiza la fuga puntual.

Se considera la ecuación

$$\begin{cases} -D \frac{d^2\phi}{dx^2} + v \frac{d\phi}{dx} = 0 & x \in]0, \zeta_0[\\ \phi = 0 & x = 0 \\ \phi = \phi_f & x = \zeta_0 \end{cases} \quad (5.10)$$

siendo ζ_0 el punto donde se encuentra la fuga, y ϕ_f el valor desconocido de la concentración en ese punto.

Resolviendo la ecuación 5.10 se tiene

$$\phi = \frac{\phi_f}{e^{\frac{v}{D}\zeta_0} - 1} (e^{\frac{v}{D}x} - 1) \quad (5.11)$$

Encontraremos el intervalo de fuerte variación de la función, calculando el x en el que $\phi = \varepsilon \phi_f$, siendo ε una constante suficientemente pequeña. Operando en 5.11 obtenemos la longitud de este intervalo:

$$h = \frac{D}{v} |\ln \varepsilon| \quad (5.12)$$

De esta manera, un modo conveniente de particionar el dominio sería, en tres elementos:

$$[0, \zeta_0 - h]; [\zeta_0 - h, \zeta_0]; [\zeta_0, 1]$$

En el primer y tercer elemento, la solución no sufre variaciones apreciables por lo que podemos aproximar la solución con un elemento espectral de bajo orden, mientras que en el segundo se utilizará una aproximación de alto orden (microelemento de alto orden).

Resultados numéricos

En la figura 5.2 se establece la comparación entre la función de Green y la solución por elementos espectrales, con las condiciones señaladas anteriormente y con partición del dominio en tres elementos, siendo $\zeta_0 = 0.5$, $h = 0.05$ utilizando grado polinomial 5 en el primer y tercer elemento y grado 20 en el microelemento de fuga de alto orden.

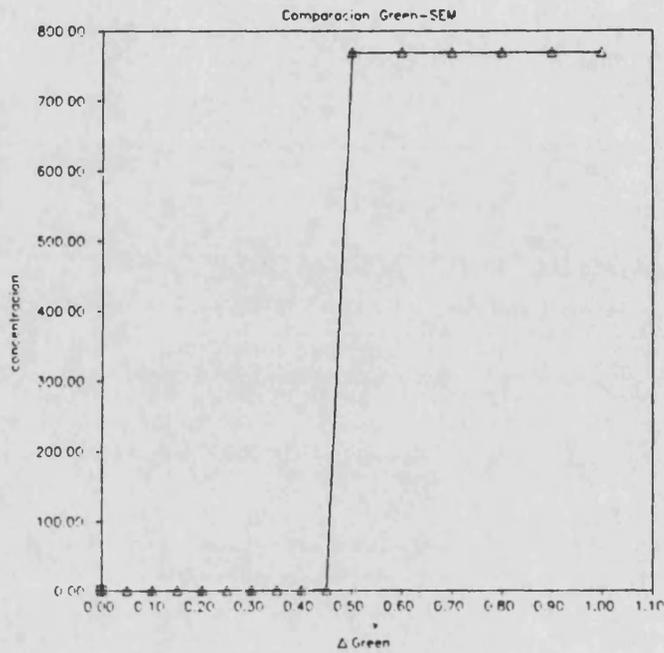


Figura 5.2: Comparación Green-Métodos espectrales

Conclusiones

El método de los elementos espectrales suministra soluciones no oscilatorias sobre mallas regulares con tamaños de problema discreto relativamente grandes.

Para acelerar la convergencia, es preciso desarrollar una estrategia de adaptación de la malla y del orden de interpolación sobre cada elemento, como se ha indicado anteriormente.

5.2 Ecuación de convección-difusión bi-dimensional

Sea la ecuación considerada al principio:

$$\left\{ \begin{array}{ll} -D\Delta\phi + u\frac{\partial\phi}{\partial x} = \delta(x - x_0)(y - y_0) & \text{en } (0, 1) \times (0, 1) \\ \phi = 0 & \text{en } x = 0, y = 1, y = 0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } x = 1 \end{array} \right. \quad (5.13)$$

Cuando el término convectivo es preponderante frente al difusivo, se producen fuertes gradientes alrededor de toda la línea de corriente que pasa por la fuga, a diferencia del caso unidimensional, donde la singularidad se localizaba en un sólo punto.

5.2.1 Método de colocación

La formulación del método, siguiendo el caso unidimensional, será:

$$\begin{aligned} -D\Delta\phi(x_i, y_j)\rho_{ij} + u\frac{\partial\phi}{\partial x}(x_i, y_j)\rho_{ij} &= h_{ij}(x_0, y_0) = \\ &= \begin{cases} 0 & \text{si } (x_0, y_0) \neq (x_i, y_i) \\ 1 & \text{si } (x_0, y_0) = (x_i, y_i) \end{cases} \end{aligned}$$

$$1 \leq i \leq N - 1 \quad 1 \leq j \leq M - 1$$

siendo ρ_{ij} los pesos de la cuadratura de Gauss-Lobato.

Si para el caso unidimensional, un método de colocación pseudoespectral tiene las limitaciones ya señaladas (soluciones oscilatorias), en el caso bidimensional, éstas vuelven a presentarse (ver figura 5.3). Las condiciones de la resolución mostrada en la figura 5.3, son:

- Dominio $[0, 2] \times [0, 2]$
- $v = 3.75e - 3$

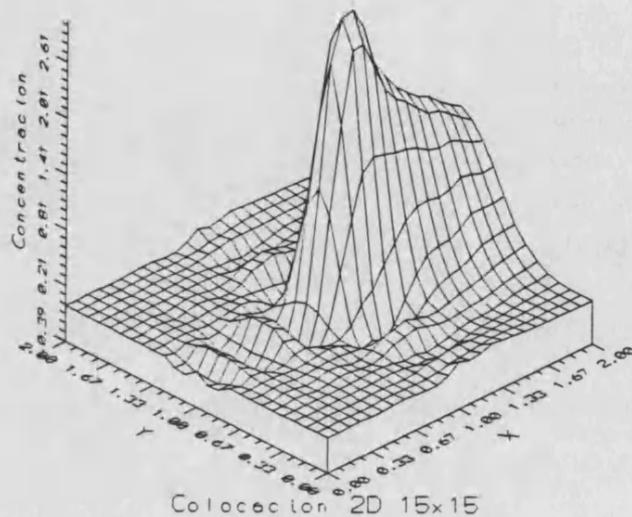


Figura 5.3: Método de colocación bidimensional

- Malla de 15×15
- Fuga localizada en el punto (1,1)
- Caudal de escape $8.33e - 6$

5.2.2 Elementos espectrales

La formulación es una generalización inmediata del caso unidimensional. En caso de que se trabaje con mallas regulares es necesario resolver problemas de tamaño considerable para obtener soluciones precisas. Por tanto interesa saber si es posible generalizar la estrategia de mallas irregulares y distinto orden de interpolación, que se ha utilizado para el caso unidimensional

Del estudio físico-matemático de la ecuación, se deduce que una generalización de la estrategia anterior, pasaría por:

1. Trabajar con, al menos 4 microelementos espectrales de alto orden en las dos direcciones, alrededor de la fuga, a lo que hay que añadir, al menos, dos elementos de alto orden en una dirección (la perpendicular a la trayectoria).
2. El resto de la malla, puede ser conforme o no conforme, con vistas a reducir el tamaño de los problemas los elementos de ésta, y deben ser de bajo orden.

Esta estrategia, tiene dos limitaciones:

1. En el caso unidimensional se comprueba, que la bondad de la solución sobre mallas irregulares, depende de la determinación del tamaño del microelemento. Para el caso que nos ocupa no es fácil determinar este tamaño.
2. El hecho de que haya que trabajar con cuatro elementos de alto orden en las dos direcciones, impide una reducción drástica del número de grados de libertad (hay que tener en cuenta que el orden de las exponenciales a aproximar en los microelementos de fuga es $\frac{u}{D}$).

NOTA

Cuando el término difusivo es del mismo orden que el convectivo, la estrategia indicada acelera la convergencia del método, pues en ese caso, al estar los fuertes gradientes únicamente localizados en torno a la fuga, y ser la solución más suave, es posible obviar los problemas indicados. De igual manera, una estrategia de mallas irregulares (conformes o no conformes) es muy adecuada para casos como el descrito por Wait

[WM 85], en el que la presencia de fuertes gradientes en la solución de la ecuación es debida a las condiciones de contorno y no el término fuente. (Ver [BMP 90] donde se trata un problema de Laplace con singularidades debidas a condiciones de contorno a partir de una malla de elementos con no conformidades de tipo geométrico).

Conclusiones

En el caso más general, con término fuente una delta de Dirac y preponderancia del término convectivo sobre el difusivo, la estrategia señalada tiene serias limitaciones, en cuanto a la aceleración de la convergencia del método.

5.2.3 Alternativas

Simetrización del operador

Una primera alternativa, se basa en la modificación de las funciones de peso del problema discreto, de manera que el operador resulte autoadjunto. [Sa 90]

Si en la formulación débil

$$\int_{\Omega} D \nabla \phi \nabla \varphi + \int_{\Omega} \bar{v} \nabla \phi \varphi = \int_{\Omega} g \varphi \quad (5.14)$$

hacemos $\varphi = f \varphi_1$, operando queda:

$$\int_{\Omega} (D \nabla \phi \nabla \varphi_1 f + D \nabla \phi \nabla f \varphi_1 + \bar{v} \nabla \phi f \varphi_1) = \int_{\Omega} g \varphi_1 f \quad (5.15)$$

Se tiene:

$$\int_{\Omega} \nabla \phi \{D\nabla f + \bar{v}f\} \varphi_1 + \int_{\Omega} D\nabla \phi \nabla \varphi_1 f = \int_{\Omega} g\varphi_1 f \quad (5.16)$$

Elijamos f de manera que

$$\{D\nabla f + \bar{v}f\} = 0 \quad (5.17)$$

Para el caso unidimensional, al resolver la ecuación diferencial se obtiene $f = Ke^{-\frac{v}{D}x}$.

Así, eligiendo f de la manera indicada y como funciones de peso $\varphi = \varphi_1 f$ donde φ_1 son las funciones de interpolación, conseguimos simetrizar el operador, quedando:

$$\int_{\Omega} D\nabla \phi \nabla \varphi_1 f = \int_{\Omega} g\varphi_1 f \quad (5.18)$$

Para el caso bidimensional se elige $f = Ke^{-\frac{v}{D}x - \frac{v}{D}y}$. En [Sa 90], se deduce la formulación SUPG de elementos finitos para la ecuación de convección-difusión. Esta formulación es funcionalmente no conforme, y es equivalente a una formulación conforme en la que a la ecuación se ha incorporado el término de error de la discretización [HE 90, HE 80, HB 82, HMM 86].

Es posible aplicar para la formulación de elementos espectrales la técnica de simetrización del operador descrita, pero es necesario estudiar una aproximación eficaz de las funciones de peso, similar a la formulación SUPG. Esto es una cuestión a desarrollar en el futuro.

Modificación de los elementos espectrales

Una segunda alternativa consiste en producir una malla acoplada y conforme de elementos espectrales estandar y elementos espectrales modificados, capaces éstos de reproducir la solución en las zonas de fuerte

gradiente, mientras que el resto de elementos reproducen la solución en las zonas de variación suave de la misma.

Esta es la estrategia que se ha adoptado y que se desarrolla en el siguiente capítulo.

Capítulo 6

Elementos espectrales modificados

El algoritmo que desarrollamos a continuación tiene como objetivo resolver el problema

$$\left\{ \begin{array}{ll} -D\Delta\phi + u\frac{\partial\phi}{\partial x} = \delta(x - x_0)(y - y_0) & \text{en } (0, 1) \times (0, 1) \\ \phi = 0 & \text{en } x = 0, y = 1, y = 0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } x = 1 \end{array} \right. \quad (6.1)$$

con u constante.

Para la resolución de la ecuación completa, en una geometría arbitraria, y con velocidad función de punto, es necesario hacer una serie de adaptaciones que desarrollaremos posteriormente.

Con este fin:

1. Comenzamos con la formulación de los elementos espectrales modificados y estudiamos las funciones de forma y la conformidad entre elementos.

2. Se sigue con las técnicas de cuadratura numérica adaptadas al problema.
3. Continuamos con la formulación de una malla acoplada y conforme con elementos estandar.
4. Se finaliza con la extensión del algoritmo al caso general.

6.1 Elementos fuga y trayectoria, conformidad y funciones de forma

6.1.1 Elemento trayectoria

Del estudio físico-matemático se conoce, que en la zona postfuga hay una variación suave en la dirección de la trayectoria y paralelas, mientras que en la dirección perpendicular a la trayectoria se producen fuertes gradientes que se pueden representar por exponenciales, que tienen un rango de variación en función de la velocidad y de la distancia a la fuga.

Llamamos dirección x , a la dirección de la trayectoria, y dirección y , a la perpendicular a la misma.

Sea

$$\{L_i(z)\}_{i=0}^N \quad (6.2)$$

una base de polinomios ortogonales.

Sea

$$\{e^{i(z-1)}\}_{i \in I} \quad (6.3)$$

una familia de exponenciales, siendo I un conjunto finito de índices, subconjunto de R .

Se toma en la dirección y la siguiente base:

$$\{e^{i(y-1)}\}_{i \in I} \cup \{L_i(y)\}_{i=0}^N \quad (6.4)$$

con $y \in [-1, 1]$.

Se toma en la dirección x la siguiente base:

$$\{L_i(x)\}_{i=0}^N \quad (6.5)$$

con $x \in [-1, 1]$.

Se construye el elemento trayectoria inferior, como un elemento cuadrado que tiene como funciones de interpolación el producto tensorial de las bases en ambas direcciones, y que tiene como nodos de interpolación los resultantes del producto cartesiano de los nodos en cada dirección.

El elemento de trayectoria superior se construye de idéntica manera, cambiando $\{e^{i(y-1)}\}_{i \in I}$, por $\{e^{i(-y-1)}\}_{i \in I}$

Por construcción, este elemento es capaz de representar exponenciales en la dirección y .

La elección del número de exponenciales, así como del orden de las mismas, se realiza a partir del estudio numérico de las series que hemos desarrollado en el capítulo dedicado al estudio físico-matemático de la ecuación, y será detallado en el capítulo de implementación del método.

6.1.2 Elemento de fuga

Del estudio físico-matemático se deduce que en la zona a contracorriente la solución se puede ajustar por una exponencial, de orden $\frac{uh}{2D}$.

Consideramos las dos familias de exponenciales y polinomios ortogonales del apartado anterior.

Se toma en la dirección y la siguiente base:

$$\{e^{i(y-1)}\}_{i \in I} \cup \{L_i(y)\}_{i=0}^N \quad (6.6)$$

con $y \in [-1, 1]$.

Se toma en la dirección x la siguiente base:

$$\{L_i(x)\}_{i=0}^N \cup \{e^{\frac{uh}{2D}(x-1)}\} \quad (6.7)$$

con $x \in [-1, 1]$.

Se construye el elemento fuga inferior, como el elemento cuadrado que tiene como funciones de interpolación el producto tensorial de las bases en ambas direcciones, y que tiene como nodos de interpolación los resultantes del producto cartesiano de los nodos en cada dirección.

El elemento de fuga superior se construye de idéntica manera, cambiando $\{e^{i(y-1)}\}_{i \in I}$, por $\{e^{i(-y-1)}\}_{i \in I}$.

6.1.3 Estudio de la conformidad entre elementos

A partir de transformaciones geométricas lineales, se define una malla de elementos reales alrededor de la fuga, partiendo de los elementos de fuga y trayectoria de referencia definidos anteriormente.

Veamos la continuidad C^0 entre elementos de fuga y trayectoria:

Supongamos los elementos del tipo fuga y trayectoria que son contiguos (ver figura 3.1). Supongamos que en la base se utiliza una exponencial, lo cual no resta generalidad a la prueba.

Sean $(\zeta, \eta) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$, las coordenadas en el elemento de referencia, y (x, y) , las coordenadas en el elemento real.

Sean Φ^I y Φ^{II} una combinación lineal cualquiera de funciones de la base del elemento I y II respectivamente. Sobre el elemento de referencia

(ζ, η) consideramos las restricciones de Φ^I y de Φ^{II} a su frontera común; entonces tendremos:

$$\Phi^I \Big|_{\zeta=1} (\eta) = P_N(\eta) + A_0 e^{a(\eta-1)} \quad (6.8)$$

$$\Phi^{II} \Big|_{\zeta=-1} (\eta) = Q_N(\eta) + B_0 e^{a(\eta-1)} \quad (6.9)$$

Supongamos que, sobre los nodos de la frontera común, la restricción de Φ^I coincide con la restricción de Φ^{II} (condición de compatibilidad entre elementos contiguos). Entonces tendremos

$$\Phi^{II} \Big|_{\zeta=-1} (\eta_k) - \Phi^I \Big|_{\zeta=1} (\eta_k) = 0 \quad (6.10)$$

donde η_k representa los nodos de la frontera común, con $k = 0, 1, 2, \dots, N+1$.

Esta condición conduce a un sistema homogéneo de ecuaciones lineales cuyo determinante es distinto de cero, por lo que $P_N = Q_N$ y $A_0 = B_0$

Supongamos ahora dos elementos de trayectoria contiguos.

Las restricciones de las funciones a la frontera común son polinomios de grado N , e imponiendo que coincidan en los $N + 1$ puntos de la frontera se llega, a que deben coincidir en toda ella.

Con lo cual se tiene la conformidad entre elementos trayectoria.

Procediendo de manera análoga se prueba la conformidad entre elementos fuga contiguos.

6.1.4 Obtención de las funciones de forma

Con vistas a efectuar una aproximación nodal, se debe obtener la expresión de las funciones de forma de los distintos elementos de referencia.

Se considera la aproximación no nodal:

$$\Phi(\zeta, \eta) = \sum_{i=1}^{n \text{ elem}} a_i \phi(\zeta, \eta) \quad (6.11)$$

y la aproximación nodal

$$\Phi(\zeta, \eta) = \sum_{i=1}^{n \text{ elem}} \Phi(\zeta, \eta)_i N_i(\zeta, \eta) \quad (6.12)$$

siendo a_i los coeficientes de la aproximación, $\phi(\zeta, \eta)$ las funciones resultantes del producto tensorial de las bases en las dos direcciones, y $N_i(\zeta, \eta)$ las funciones de forma de la aproximación. Teniendo en cuenta que la expresión de $\Phi(\zeta, \eta)$ es única, se obtiene:

$$[N_i(\zeta, \eta)]^T = [\phi_i(\zeta, \eta)]^T [\phi_i(\zeta, \eta)_j]^{-1} \quad (6.13)$$

6.2 Fórmulas de cuadratura

Al discretizar la ecuación, se obtiene que la entrada (i, j) de la matriz de cada elemento Ω^e es de la forma:

$$-D \int_{\Omega^e} \frac{\partial H_k}{\partial x} \frac{\partial H_l}{\partial x} + \frac{\partial H_k}{\partial y} \frac{\partial H_l}{\partial y} + u \int_{\Omega^e} \frac{\partial H_k}{\partial x} H_k \quad (6.14)$$

siendo H_i las funciones de forma, que se obtienen como hemos indicado anteriormente, o también como producto tensorial de las funciones de forma asociadas a las bases en cada dirección.

Pongamos

$$H_k(\zeta, \eta) = N_i(\zeta) M_j(\eta) \quad (6.15)$$

donde $N_i(\zeta)$ y $M_j(\eta)$ indican las funciones de forma en cada dirección.

Si expresamos

$$N_i(\zeta) = [a_i]^T[\phi_i] \quad (6.16)$$

$$M_j(\eta) = [b_j]^T[\varphi_j] \quad (6.17)$$

y se supone que utilizamos transformaciones lineales de geometría, la integral 6.14 únicamente se ve afectada por una constante al trabajar en el elemento de referencia (ζ, η) .

Así pues

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^e} \frac{\partial H_k}{\partial x} \frac{\partial H_l}{\partial x} &= \quad (6.18) \\ &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 [a_i]^T \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] [b_j]^T [\varphi_j] [a_i^*]^T \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] [b_j^*]^T [\varphi_j] = \\ &= \int_{-1}^1 [b_j]^T [\varphi_j] [b_j^*]^T [\varphi_j] \int_{-1}^1 [a_i]^T \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] [a_i^*]^T \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right] \end{aligned}$$

Fórmulas análogas se deducen para el resto de los términos de la integral, de lo que se deduce que es necesario construir fórmulas de cuadratura para las funciones resultantes de los productos de las funciones de las bases unidimensionales, del estilo de $\varphi_j \varphi_k$.

Para el elemento de trayectoria, en la dirección x hemos elegido como base

$$\{L_i(x)\}_{i=0}^N \quad (6.19)$$

con $x \in [-1, 1]$, por tanto utilizaremos fórmulas de Gauss-Lobato para polinomios [DR 85, TD 81].

Puesto que en la dirección y utilizamos una base mixta de polinomios y exponenciales, al igual que para el elemento de fuga, la posibilidad de

utilizar fórmulas de cuadratura de Gauss para polinomios no es viable, ya que el error asociado a la integración de exponenciales se multiplica por un factor del orden de $\frac{a^{n+1}}{(n+1)!}$, siendo a el orden de la exponencial a aproximar y n el orden de la aproximación polinomial, por lo que es necesario un excesivo número de puntos de integración.

Veamos qué estrategias pueden ser adecuadas para integrar funciones obtenidas como productos de bases del tipo

$$\{e^{i(y-1)}\}_{i \in I} \cup \{L_i(y)\}_{i=0}^N \quad (6.20)$$

Vamos a considerar básicamente dos:

1. Sea p el número de funciones a integrar. Planteemos el problema del cálculo de los pesos asociados a una fórmula de Gauss:

Se considera una combinación lineal arbitraria de las p funciones $f_i(z)$: Sea

$$f(z) = \sum_{i=1}^p a_i f_i(z) \quad (6.21)$$

Entonces, si suponemos elegidos p puntos de cuadratura, utilizando la igualdad,

$$\int_{-1}^1 f(z) = \sum_{r=1}^p w_r f(z_r) \quad (6.22)$$

operando e identificando coeficientes, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones lineal, con p ecuaciones y p incógnitas

$$\int_{-1}^1 f_i(z) = \sum_{r=1}^p w_r f_i(z_r) \quad (6.23)$$

con $i = 1, 2, \dots, p$

En cambio, si se dejan los puntos libres, al igual que los pesos, y se supone p par, se obtiene un sistema no lineal con p incógnitas y p ecuaciones.

$$\int_{-1}^1 f_i(z) = \sum_{r=1}^{p/2} w_r f_i(z_r) \quad (6.24)$$

con $i = 1, 2, \dots, p$

Se tiene pues, que se necesitan p pesos para integrar p funciones, en caso de que los puntos hayan sido elegidos de antemano, y $p/2$ pesos más $p/2$ puntos para el caso no lineal.

En los casos prácticos, el tipo de sistema no lineal que aparece es de difícil resolución, incluso en los casos más sencillos, por lo que normalmente es preferible trabajar con los resultados del caso lineal, en los que se elige una malla de puntos que suministre sistemas no singulares computacionalmente.

2. La segunda estrategia consiste en particionar el dominio de integración $[-1, 1]$ en varios subdominios, de forma que en cada uno de ellos podamos aplicar fórmulas de cuadratura para polinomios. Para ello debemos tener un control sobre el error introducido en la integración de la aproximación polinomial a las exponenciales. Supongamos una función $f(\zeta)$ definida sobre $[-1, 1]$. Particione-mos el dominio en subdominios de igual longitud h . El subintervalo i -ésimo vendrá dado por

$$[-1 + ih, -1 + (i + 1)h] \quad (6.25)$$

Transformemos este subintervalo a $[-1, 1]$

$$\zeta \in [-1 + ih, -1 + (i + 1)h] \longrightarrow x \in [-1, 1] \quad (6.26)$$

siendo

$$x = -1 + \frac{2}{h}(\zeta + 1 - ih) \quad (6.27)$$

así

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 f(\zeta) d\zeta &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{-1+ih}^{-1+(i+1)h} f(\zeta) d\zeta = \\
&\sum_{i=0}^{n-1} \int_{-1}^1 f\left(\frac{(x+1)h}{2} + ih - 1\right) \frac{h}{2} dx = \\
&\sum_{i=0}^{n-1} \left\{ \frac{h}{2} \sum_{G=1}^{n_G} f\left(\frac{(x_G+1)h}{2} + ih - 1\right) w_G \right\} \quad (6.28)
\end{aligned}$$

donde n_G representa el número de puntos de Gauss. Veamos como se puede elegir n_G , en función de h y del máximo orden de las exponenciales para mantener el error acotado.

Si se supone que el orden de la exponencial a integrar en el intervalo dado por 6.25 es b , al realizar el cambio a $[-1, 1]$, éste se reduce a $b\frac{h}{2}$.

Desarrollando por Taylor la exponencial, se obtiene como cota del residuo

$$|R_{n+1}| \leq \frac{b^{n+1} h^{n+1}}{(n+1)!} \quad (6.29)$$

de manera que fijados h , R_{n+1} y b_{max} obtendremos n y con éste, n_G .

Este algoritmo puede mejorarse tomando un particionamiento en subintervalos de distinta longitud. Para ello se toma la exponencial a integrar $e^{b_k(x-1)}$ y se calcula el intervalo de fuerte crecimiento h_k . Tomamos ϵ_k , un número suficientemente pequeño. Tomando logaritmos, se llega a determinar el valor de x para el cual la exponencial es menor o igual al valor ϵ_k ,

$$x_k = \frac{\ln \epsilon_k}{b_k} + 1 \quad (6.30)$$

Particionando el dominio en intervalos de desigual amplitud, y procediendo de manera análoga al caso anterior en lo que concierne al cálculo de puntos de integración, se consigue reducir el número

total de éstos, de manera que si p es el número de funciones a integrar, entonces el número requerido se sitúa entre $\frac{p}{2}$ y p .

6.3 Acoplamiento con elementos estandar

Los elementos fuga y trayectoria descritos juegan un papel en las zonas de fuerte gradiente, pero en las zonas donde la solución es suave, es preferible trabajar con elementos espectrales estandar o con elementos finitos estandar, según convenga. Para ello es necesario acoplar unos elementos con otros.

6.3.1 Coupling elementos trayectoria-elementos estandar

1. Teniendo en cuenta que las combinaciones lineales de las funciones de forma de la base para el elemento de trayectoria, restringidas a la frontera superior con $N + 1$ puntos, son polinomios de grado N , es inmediato que el elemento trayectoria es conforme con el elemento espectral del mismo orden.
2. No siempre interesa mantener el orden del polinomio. Si consideramos una malla M_1 más gruesa sobre el elemento estandar que la existente sobre el elemento trayectoria, M_2 , e imponemos la condición

$$v_T|_\gamma(x) = v_S|_\gamma(x) \quad (6.31)$$

para todo $x \in M_2$, siendo $v_S|_\gamma(x)$ la solución sobre el elemento estandar restringida a la frontera común, y $v_T|_\gamma(x)$ la restricción

del elemento trayectoria, entonces la continuidad es inmediata, pues si

$$P_N(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_Nx^N$$

$$Q_M(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_Mx^M$$

con $M < N$, entonces al imponer $P_N(x) - Q_M(x) = 0$ sobre M_2 tendremos un sistema lineal homogéneo cuyo determinante es el determinante de Vandermonde

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^N \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \dots & x_N^N \end{vmatrix} \neq 0 \quad (6.32)$$

por lo que la única solución es la trivial y consecuentemente $a_i = b_i$, $1 \leq i \leq M$ y $a_{M+1} = a_{M+2} = \dots = a_N = 0$

Así el elemento trayectoria es conforme con el elemento espectral o finito de menor orden, siempre que se imponga la igualdad entre las funciones en la frontera común, sobre la rejilla más fina.

En caso de que las condiciones en la frontera se impongan sobre la rejilla más gruesa, se pierde conformidad, siendo conveniente en este caso formular las condiciones de acoplamiento de tipo integral, es decir, si llamamos γ^{TS} la interface entre el elemento de trayectoria y el estandar, N_T y N_S son los grados de los polinomios en trayectoria y estandar respectivamente, y $P(\gamma^{TS})$ representa el conjunto de los polinomios de grado menor o igual que $N_S - 2$ sobre γ^{TS} , entonces la condición de acoplamiento integral consiste en imponer las dos siguientes condiciones:

(i)

$$\text{la solución } v \text{ coincide en los extremos de } \gamma^{TS} \quad (6.33)$$

(ii)

$$\int_{\gamma^{TS}} (v_T|_{\gamma} - v_S|_{\gamma}) \Phi = 0, \quad \forall \Phi \in P(\gamma^{TS}) \quad (6.34)$$

NOTA

En caso de que en la formulación integral $P(\gamma^{TS})$ represente el conjunto de los polinomios de grado menor o igual a $N_T - 2$, (o sea, se imponga la condición más restrictiva) se obtiene de nuevo una formulación conforme, ya que desarrollando se llega a que el valor de la función se determina según la rejilla de más puntos, por lo que estamos en el caso anterior.

3. Finalmente es posible establecer una no conformidad geométrica (o simultáneamente geométrica y de grado), utilizando la formulación integral junto con los elementos mortar.

La elección de una u otra formulación depende de factores como la suavidad de la solución, fuera de la zona de fuertes gradientes, la sencillez de la implementación de uno u otro procedimiento, o el tamaño del problema discreto.

Para las condiciones del problema planteado al inicio, la estrategia de utilizar mallas conformes con elementos espectrales o finitos de menor orden permite:

1. Una buena representación de la solución
2. Sencillez en la implementación
3. Tamaño reducido del problema.

6.3.2 Coupling elementos fuga-elementos estandar

1. Teniendo en cuenta que la restricción a la frontera superior del elemento fuga, es un polinomio de grado N más una exponencial, es posible hacer un acoplamiento conforme entre el elemento de fuga y un elemento estandar espectral o finito con las siguientes condiciones:

(i) el orden del elemento estandar debe de ser menor o igual que N (N representa el grado del polinomio del elemento de fuga en la frontera).

(ii) la función solución en la frontera queda determinada por su valor en los $N + 2$ puntos de la rejilla más fina, o sea, se debe de cumplir

$$v_F|_\gamma(x) = v_S|_\gamma(x) \quad (6.35)$$

para todo x de la rejilla de $N + 2$ puntos.

Si se imponen estas condiciones, sea $v_F|_\gamma(x) = P_N + e^{c(x-1)}$ y sea $v_S|_\gamma(x) = R_{N_1}$ con $N_1 \leq N$.

Si imponemos

$$P_N(x) + Ee^{c(x-1)}|_{x_i} = R_{N_1}|_{x_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N + 2) \quad (6.36)$$

donde x_i son los puntos de la rejilla más fina, se tendrá un sistema homogéneo de $N + 2$ ecuaciones con $N + 2$ incógnitas cuyo determinante

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^N & e^{c(x_1-1)} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^N & e^{c(x_2-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{N+2} & x_{N+2}^2 & \dots & x_{N+2}^N & e^{c(x_{N+2}-1)} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (6.37)$$



por lo que la solución será la trivial y por tanto $P_N(x) = R_{N_1}(x)$ y $E = 0$.

Con un argumento similar es posible acoplar el elemento de fuga con un elemento estandar sobre la frontera izquierda

2. La introducción de no conformidades geométricas o de grado no parece que sea lo más conveniente, pues en estos casos el carácter no polinómico de la base del elemento de fuga supone complicaciones teóricas y prácticas. En caso de querer trabajar con una malla no conforme, es conveniente rodear los elementos fuga de una malla conforme de elementos estandar, para proceder posteriormente a un coupling con una malla no conforme.

6.4 Aplicación del algoritmo al caso general

Vamos a considerar qué modificaciones son necesarias realizar cuando tenemos la ecuación completa en una geometría arbitraria y con velocidad función del punto, o sea:

$$\begin{cases} -D\Delta\phi + \bar{v}\nabla\phi = \delta(x - x_0)(y - y_0) & \text{en } \Omega \\ \phi = 0 & \text{en } \Gamma_0 \\ \frac{\partial\phi}{\partial n} = 0 & \text{en } \Gamma_1 \end{cases} \quad (6.38)$$

donde Ω es un abierto de R^2 , Γ_0 y Γ_1 forman la frontera de Ω , y \bar{v} representa un campo de velocidades conocido.

De cara a aplicar toda la herramienta anteriormente desarrollada es necesario realizar una discretización del dominio que haga intervenir a los elementos de fuga y trayectoria. Los elementos serán generados automáticamente, de forma que la discretización resultante quede adaptada a los requerimientos de los elementos anteriormente construidos.

Así, los elementos trayectoria deben tener una arista sobre la línea de trayectoria, y los de fuga un vértice sobre la fuente.

Una técnica de mallado consiste en tomar la rejilla generada a partir del trazado de las líneas de corriente y sus ortogonales, siendo necesario tomar la línea de trayectoria y la curva ortogonal a ésta, que pasa por la fuga, pues de esta forma quedan inmediatamente establecidos los elementos fuga y trayectoria.

La malla resultante contiene elementos cuyos contornos no son lineales, por lo que es necesario realizar una transformación geométrica cuyo Jacobiano no será constante. Esta transformación de elemento real a elemento de referencia, se realiza utilizando una base de polinomios de Legendre; para la interpolación geométrica se utilizan nodos que no coincidirán, en general, con los de la aproximación funcional, siendo su número función de la regularidad de los contornos de los elementos. Una ventaja del mallador expuesto, es que, al ser las líneas ortogonales, los elementos estarán bien condicionados, reduciéndose los errores asociados a las transformaciones geométricas.

Cuando la variación del campo de velocidades es suave, tras la transformación geométrica se obtiene que el término convectivo queda prácticamente reducido a la componente v_z , por lo que todo el estudio físico-matemático realizado en los capítulos anteriores, es válido.

Otro aspecto a considerar, es el que hace referencia a la integración numérica. Si el campo de velocidades no presenta fuertes gradientes, podemos suponer un comportamiento polinomial de bajo orden con lo cual habría que añadir puntos de integración para recoger las nuevas funciones que aparecen (debidas en parte a la transformación geométrica y en parte al campo de velocidades). En caso de que haya zonas de fuerte variación es más conveniente proceder con una técnica de particionamiento del intervalo de integración, de la manera que se ha descrito

anteriormente.

Capítulo 7

Implementación y evaluación del algoritmo

7.1 Acerca de la evaluación del algoritmo

El algoritmo que hemos desarrollado pretende eliminar las limitaciones señaladas en la utilización de los métodos espectrales, sustituyendo los elementos espectrales de alto orden en una o dos direcciones, por elementos, en los que la introducción de las exponenciales adecuadas tenga los mismos efectos de aceleración de convergencia que las bases polinómicas de alto orden, pero sin pagar el precio de un aumento considerable de grados de libertad.

Con vistas a la evaluación del método en su aspecto clave (introducción de exponenciales), y en ausencia de soluciones analíticas, incluso para geometrías sencillas, se adoptan las dos siguientes estrategias:

– Sea Φ la solución del problema. Entonces

$$\Phi = \Phi_h + e_h \quad (7.1)$$

donde Φ_h es la solución numérica obtenida y e_h es el error exacto. Sustituyendo en la ecuación

$$\int_{\Omega} D\nabla\Phi\nabla\Psi + u \int_{\Omega} \frac{\partial\Phi}{\partial x}\Psi = \int_{\Omega} \delta(x-x_0)(y-y_0)\Psi \quad (7.2)$$

y operando, se obtiene

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} D\nabla e_h\nabla\Psi + u \int_{\Omega} \frac{\partial e_h}{\partial x}\Psi = \\ & = - \int_{\Omega} D\nabla\Phi_h\nabla\Psi - u \int_{\Omega} \frac{\partial\Phi_h}{\partial x}\Psi + \int_{\Omega} \delta(x-x_0)(y-y_0)\Psi \quad (7.3) \end{aligned}$$

Esta es una ecuación de convección-difusión en la que el término independiente depende de la solución numérica Φ_h obtenida. Interesa una resolución de la ecuación lo más exacta posible, para poder determinar una buena aproximación del error. Para ello, se resuelve dicha ecuación numéricamente, modificando la malla y el espacio de aproximación, evaluando el término independiente a partir del residuo de la resolución anterior.

Para ello, se trabaja:

- * Sobre una malla de elementos triangulares no uniforme, adaptada al problema a partir de la información obtenida de la distribución del residuo.
- * Utilizando una base de elementos finitos lineales.

Se toma el valor numérico de e_h como valor del error, y en particular se trabaja con la norma L^2 de e_h .

NOTA:

Una de las propiedades de la función de Green del problema es que tiene una discontinuidad de salto infinito localizado en la fuga

[TS 72]. Ni el método de los elementos finitos, ni el algoritmo que se ha desarrollado están adaptados para representar este hecho, por lo que experimentalmente se comprueba que el valor que asigna cada método a la solución en la fuga depende de las bases de los espacios de aproximación, siendo distinto en cada caso, aunque en el resto de la malla sean coincidentes. Por lo que para el cálculo numérico de e_h , si se elimina del dominio un pequeño entorno de la fuga, se evitan distorsiones en el estudio del error, debidas al fenómeno anterior. Por tanto, más que el cálculo del error debido al residuo de la ecuación en todo el dominio, lo que se calcula es el error debido al residuo en el dominio menos un entorno reducido de la fuga, comprobándose experimentalmente que el tamaño de éste, es del orden de la dimensión del elemento triangular que la contiene.

- La segunda estrategia consiste en comparar la solución aproximada, con soluciones numéricas suministradas por método de los elementos finitos en su versión Galerkin y en su versión SUPG(Streamline Upwind Petrov-Galerkin).

Más concretamente, se toma una malla irregular de triángulos; consideramos las soluciones numéricas de la ecuación sobre esa malla, para los métodos FEM-Galerkin y FEM-SUPG, a las que llamamos Φ_G y Φ_{PG} respectivamente. A la solución que suministra el algoritmo de elementos espectrales modificados sobre una malla adaptada al problema la llamamos Φ_{EEM} ; esta solución se interpola sobre los puntos de la malla triangular, con vistas a la comparación.

Calculamos los siguientes valores:

$$\|\Phi_G - \Phi_{EEM}\|_{L^2}, \quad \|\Phi_{PG} - \Phi_{EEM}\|_{L^2}, \quad \|\Phi_G - \Phi_{PG}\|_{L^2} \quad (7.4)$$

$$\frac{\|\Phi_G - \Phi_{EEM}\|_{L^2}}{\|\Phi_G\|_{L^2}}, \quad \frac{\|\Phi_{PG} - \Phi_{EEM}\|_{L^2}}{\|\Phi_{PG}\|_{L^2}}, \quad \frac{\|\Phi_{PG} - \Phi_G\|_{L^2}}{\|\Phi_G\|_{L^2}}, \quad \frac{\|\Phi_G - \Phi_{PG}\|_{L^2}}{\|\Phi_G\|_{L^2}} \quad (7.5)$$

que medirán el error absoluto y relativo acumulado, respectivamente, entre las soluciones que se comparan.

7.2 Ejemplo de aplicación

Los datos generales de la implementación son:

- Dominio $[0, 2] \times [0, 2]$
- $v = 3.75e - 3$
- Fuga localizada en el $(1, 1)$ y con caudal de escape $8.33e - 6$

En las figuras 7.1 y 7.2 mostramos una resolución del problema sobre una malla de ocho elementos cuyas bases a continuación se detallan:

- Elemento de fuga en dirección x : $L_0(x), L_1(x), e^{125(x-1)}$
- Elemento de fuga en dirección y : $L_0(y), L_1(y), L_2(y), e^{7(y-1)}, e^{20(y-1)}$
- Elemento de trayectoria en dirección x : $L_0(x), L_1(x), L_2(x)$
- Elemento de trayectoria en dirección y : $L_0(y), L_1(y), L_2(y), e^{7(y-1)}, e^{20(y-1)}$

El total de nodos de la malla es de 81.

En las figuras 7.3 y 7.4 se muestra una resolución del problema sobre una malla de ocho elementos cuyas bases a continuación se detallan:

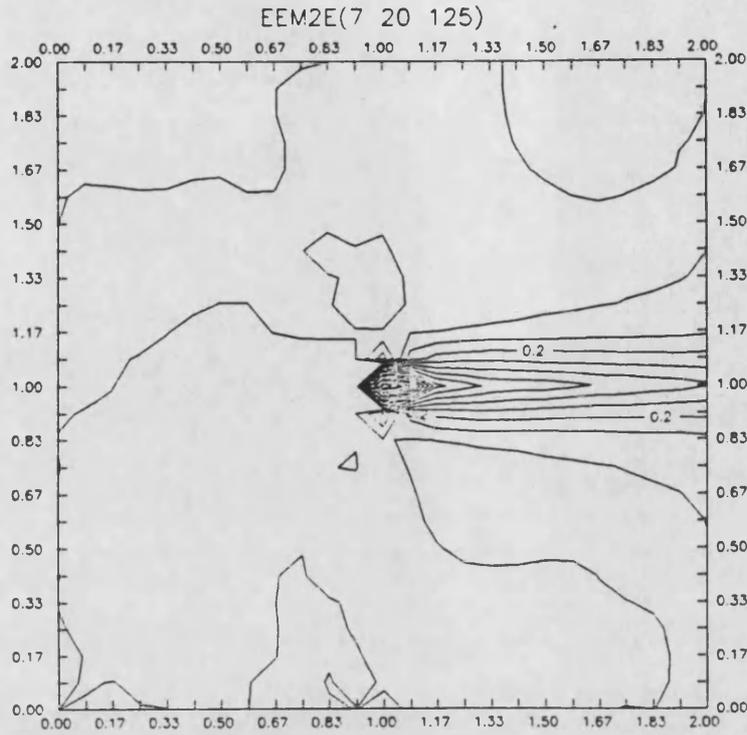


Figura 7.1: Elementos modificados con dos exponenciales

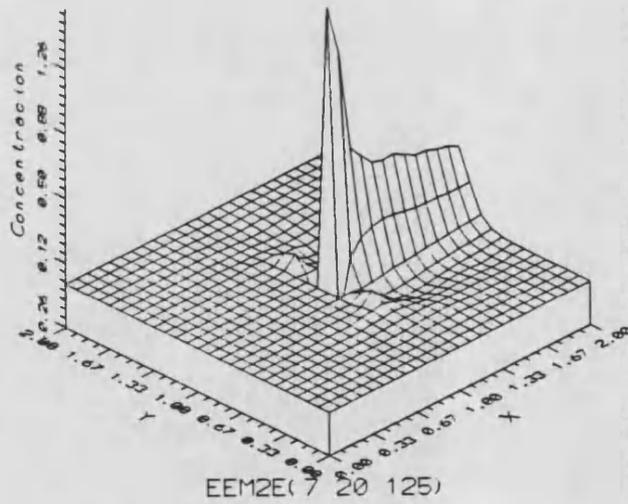


Figura 7.2: Elementos modificados con dos exponenciales

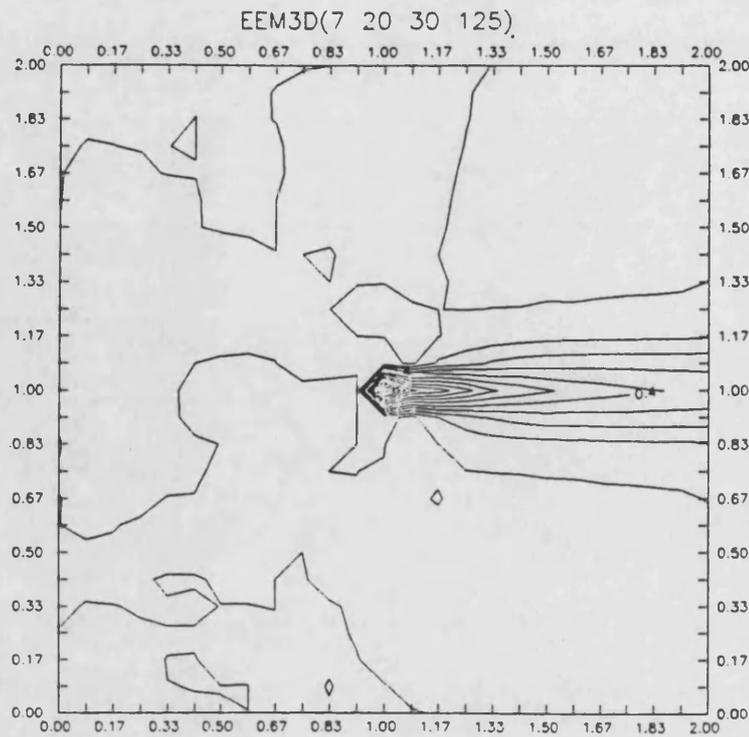


Figura 7.3: Elementos modificados con tres exponenciales

- Elemento de fuga en dirección x : $L_0(x), L_1(x), e^{125(x-1)}$
- Elemento de fuga en dirección y : $L_0(y), L_1(y), e^{7(y-1)}, e^{20(y-1)}, e^{30(y-1)}$
- Elemento de trayectoria en dirección x : $L_0(x), L_1(x), L_2(x)$
- Elemento de trayectoria en dirección y : $L_0(y), L_1(y), e^{7(y-1)}, e^{20(y-1)}, e^{30(y-1)}$

El total de nodos de la malla es de 81.

Un aspecto a considerar es el relativo a la elección del orden de las exponenciales. Ésta, se realiza de acuerdo con los resultados obtenidos en el capítulo del estudio físico-matemático de la ecuación 3.5.

Las oscilaciones que aparecen en las inmediaciones de la fuga que se observan en la figura 7.1, obedecen a que con la exponencial de 20, no se es capaz de ajustar el fuerte gradiente que aquí se tiene. Este hecho nos lleva a tomar la tercera exponencial de un orden superior, en concreto de 30, apreciándose en este caso, en la figura 7.3 la disminución

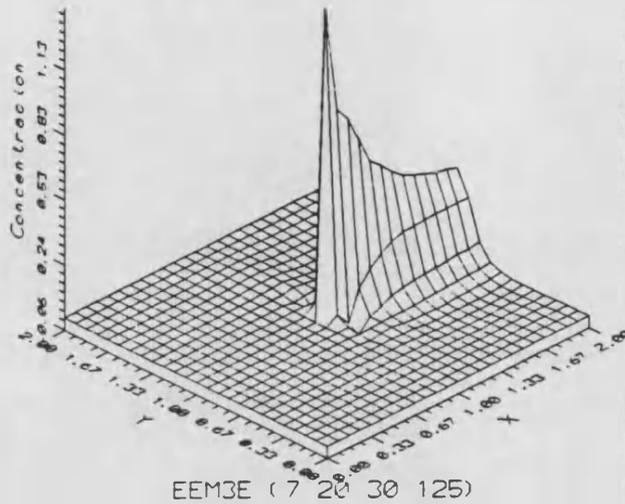


Figura 7.4: Elementos modificados con tres exponenciales

drástica de dichas oscilaciones.

Para las dos estrategias de evaluación del error indicadas procedamos al cálculo del mismo.

- Si se considera la norma del error L^2 para la resolución de la ecuación sobre una malla no uniforme adaptada al problema con 488 nodos (944 elementos triangulares lineales), en el dominio indicado, quitándo un recinto cuadrado de lado 0.1 centrado en la fuga se tiene:

- * El error L^2 es $1.5640e - 3$ para el caso de dos exponenciales
- * El error L^2 es $5.0963e - 4$ para el caso de tres exponenciales.

En las figuras 7.5 y 7.6 se muestra la distribución del error en ambos casos.

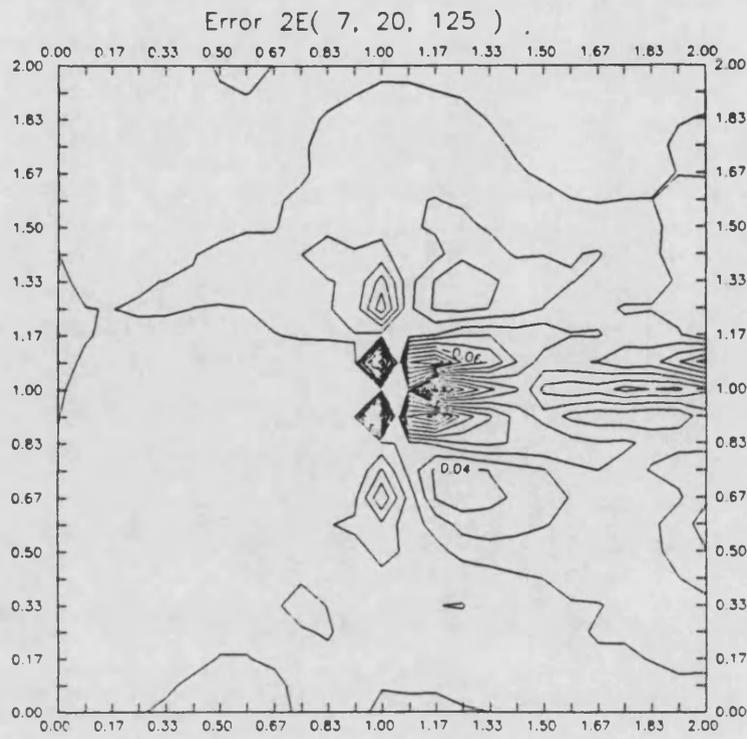


Figura 7.5: Distribución del error para dos exponenciales

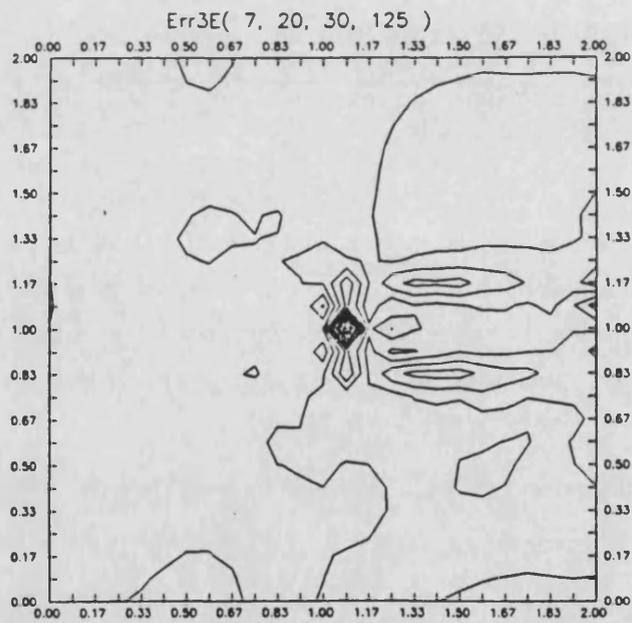


Figura 7.6: Distribución del error para tres exponenciales

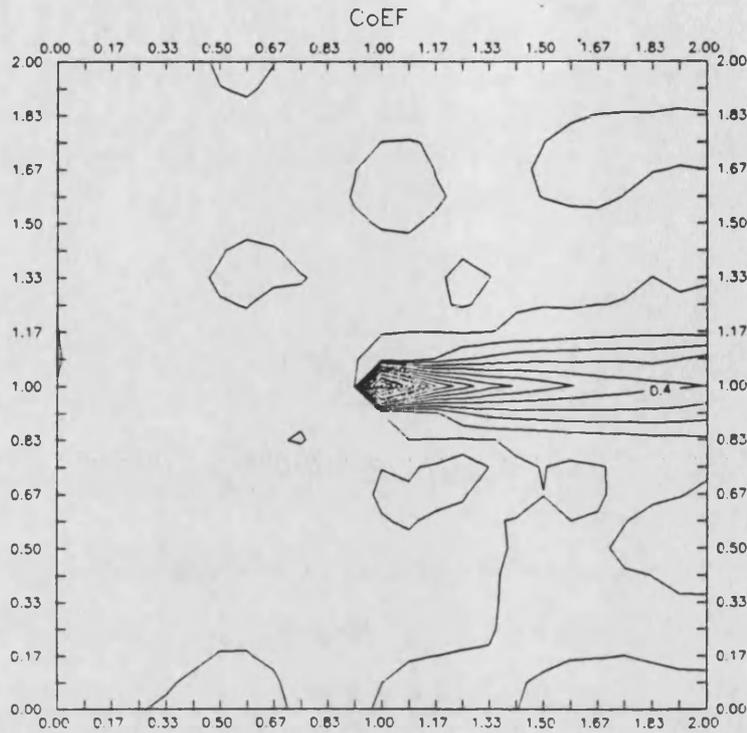


Figure 7.7: Solución de elementos finitos

- Para el caso de la segunda estrategia consideramos su comparación con las soluciones obtenidas vía una formulación Galerkin y Petrov-Galerkin sobre la malla anteriormente utilizada. La representación de ambas resoluciones se muestran en las figuras 7.7, 7.8, 7.9, 7.10, que recogen resultados, que se ha comprobado, son convergentes. Se ha procedido a la evaluación de las normas y de los cocientes de las mismas, indicados al comienzo del capítulo, trabajando sobre el dominio completo, sin eliminar el entorno alrededor de la fuga. El hecho más destacado es que en el caso de 2 únicas exponenciales (7 y 20) el error definido por

$$\frac{\|\Phi_{PG} - \Phi_{EEM}\|_{L^2}}{\|\Phi_{PG}\|_{L^2}} \quad (7.6)$$

es del 3.4% pudiéndose reducir éste en el caso de eliminar un entorno alrededor de la fuga, de la manera anteriormente descrita.

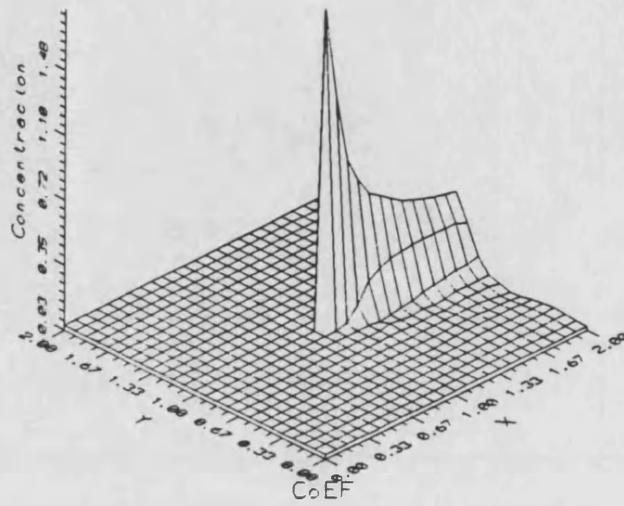


Figura 7.8: Solución de elementos finitos

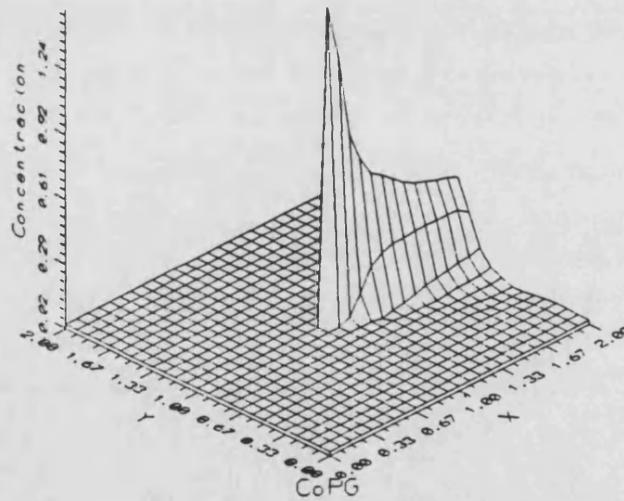


Figura 7.9: Solución de Petrov-Galerkin

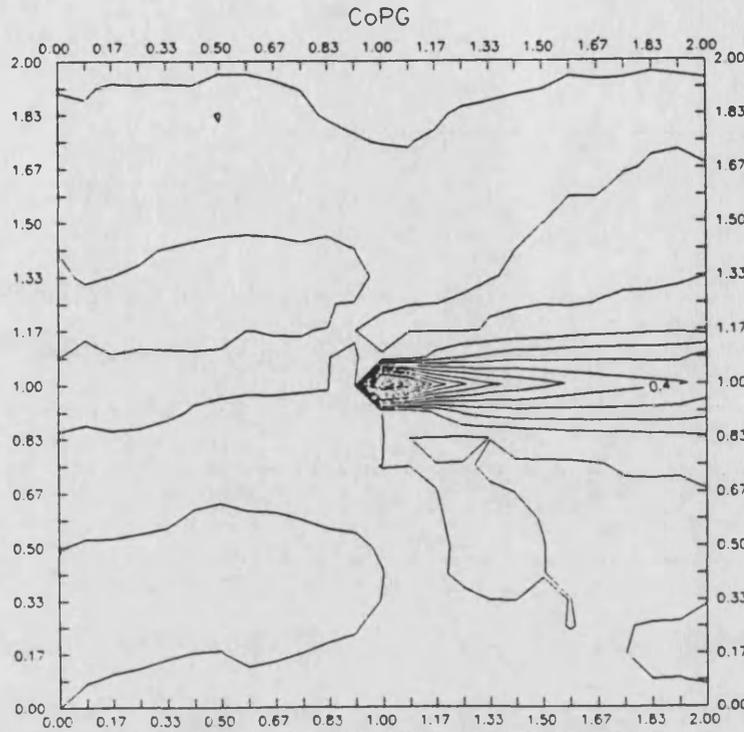


Figura 7.10: Solución de Petrov-Galerkin

En el caso de utilizar 3 exponenciales (7, 20 y 30) podemos observar que el error anteriormente definido, decae hasta un 1.3% sin eliminar ningún entorno de la fuga y a valores menores en el caso de hacerlo. De igual modo si definimos el error absoluto acumulado como

$$\|\Phi_{PG} - \Phi_{EEM}\|_{L^2} \quad (7.7)$$

se puede ver como éste decrece igualmente al pasar de dos a tres exponenciales. Los resultados completos para ambos casos se muestran a continuación:

* CALCULO DE LA NORMA L^2 PARA 2 EXPONENCIALES

- Exponenciales : 7, 20,
- Norma EEM 0.0523121210607842
- Norma PG 0.0531518325217073

- Norma G 0.0543980240137801
- Norma (EEM-PG) / Norma PG 0.034309263014138
- Norma (EEM-G) / Norma G 0.0349285817264169
- Norma (PG-G) / Norma G 0.00280232274699124
- Norma (PG-G) / Norma PG 0.00286802567010149
- Error absoluto acumulado $1.8e - 3$

* CALCULO DE LA NORMA L_2 PARA 3 EXPONENCIALES

- Exponenciales : 7, 20,30
- Norma EEM 0.0481781023781807
- Norma PG 0.0531518325217073
- Norma G 0.0543980240137801
- Norma (EEM-PG) / Norma PG 0.0171556674056386
- Norma (EEM-G) / Norma G 0.0187092346747842
- Norma (PG-G) / Norma G 0.00280232274699124
- Norma (PG-G) / Norma PG 0.00286802567010149
- Error absoluto acumulado $9.12e - 4$

La tendencia a la disminución del error cuando aumenta el número de exponenciales, se puede comprobar de igual manera, para la resolución de la ecuación simplificada, sin término fuente, con las condiciones estandar indicadas al principio, salvo la velocidad, que es $v = 2.6e - 3$ y las condiciones de contorno estandar, salvo el dato inicial en el contorno a contracorriente que se toma a partir de la simetrización de $f(y) = e^{25(y-0.5)}$.

Para este caso conocemos la solución analítica expresada como:

$$\phi(x, y) = 2e^{\frac{u}{2b}x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\int_0^1 f(y) \sin n\pi y dy}{1 + c_n} F(n, x) \sin n\pi y \quad (7.8)$$

siendo

$$F(n, x) = e^{-\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}}x} + c_n e^{\sqrt{n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}}x} \quad (7.9)$$

$$c_n = \frac{2u^2 + 4(Dn\pi)^2 - 2u\sqrt{u^2 + 4(Dn\pi)^2}e^{-\sqrt{4n^2 + \pi^2 + \frac{u}{2D}}}}{4(Dn\pi)^2} \quad (7.10)$$

Si se considera un único elemento de 15 nodos con las bases:

- * En la dirección x : L_0, L_1, L_2
- * En la dirección y : $L_0, L_1, L_2, e^{5.1(y-1)}, e^{10.13(y-1)}$

entonces el error en norma L^2 vale 6.7134522025e-6

Si se considera un único elemento de 18 nodos con las bases:

- * En la dirección x : L_0, L_1, L_2
- * En la dirección y : $L_0, L_1, L_2, e^{5.1(y-1)}, e^{10.13(y-1)}, e^{15.35(y-1)}$

entonces el error en norma L^2 vale 3.235907714e-6

Si se considera un único elemento de 21 nodos con las bases:

- * En la dirección x : L_0, L_1, L_2
- * En la dirección y : $L_0, L_1, L_2, e^{5.1(y-1)}, e^{7.5(y-1)}, e^{10.13(y-1)}, e^{15.35(y-1)}$

entonces el error en norma L^2 vale 2.848359693e-6

7.3 Conclusiones

Realizada la evaluación numérica del algoritmo presentado en el capítulo 6 desde el punto de vista del efecto que produce la utilización de exponenciales se puede concluir:

- * Para una adecuada elección de las exponenciales según las conclusiones del estudio físico-matemático, y mediante la resolución de problemas discretos de tamaño reducido (81 nodos), se obtienen resultados numéricos muy precisos (3.4% de error con 2 exponenciales), disminuyendo según se incrementa el número de exponenciales (1.8% de error para 3 exponenciales).
- * Por tanto, el objetivo de aceleración de la convergencia, manteniendo tamaño reducido de los problemas discretos, ha sido cubierto.

7.4 Perspectivas

- * Dentro de la línea desarrollada en el trabajo se plantea como temas de estudio los siguientes:
 1. Resolución de la ecuación para un término fuente arbitrario, vía la función de Green del problema.
 2. Generalización a R^3 .
 3. Utilización del algoritmo para la resolución de la ecuación parabólica.
 4. Estudio teórico del error del método a partir de estimadores de error a priori y control del error numérico utilizando estimadores a posteriori.
 5. Extensión a dominios no acotados.
- * En la línea de simetrización del operador esbozada en el capítulo 6, se trata de desarrollar un algoritmo computacionalmente eficiente basado en la modificación de las funciones de peso formuladas teóricamente en dicha sección.

Bibliography

- [B 87] Brezis, H. "Analyse Fonctionnelle." Masson. 1987
- [BMP 90] Bernardi, C., Maday, Y., Patera, A.T. "A new non-conforming approach to domain decomposition: the mortar element method." Publications du Laboratoire D'Analyse Numerique. Université Pierre et Marie Curie. CRNS.(1990):R89027
- [BMMP 89] Bernardi, C., Maday, Y., Mavriplis, C., Patera, A.T. "The Mortar Elements Methods Applied to Spectral Discretizations." Proceedings of Seventh International Conference of Finite Element Methods in Flow Problems, Huntsville (1989)
- [BM 89] Bernardi, C., Maday, Y. "Coupling Spectral and Finite Element Methods for the Poisson Equation: a Review." Proceedings of Seventh International Conference of Finite Element Methods in Flow Problems, Huntsville (1989)
- [BM 88] Bernardi, C., Maday, Y. "Spectral Methods for the Approximation of Fourth-Order problems: Applications to the Stokes and Navier-Stokes Equations." Computers and Structures, vol 14. 1988
- [Bh 85] Bhattacharya, M.C. "An Explicit Conditionally Stable Finite Difference for the Heat Conduction Pro-

- blems". Int. J. for Num. Met. Eng., 21 pp. 239-265 (1985)
- [CQ 82] Canuto, C., y Quarteroni, A. "Approximation Results for Orthogonal Polynomials in Sobolev Spaces." Math. of Comp.38 (1982) : 67
- [CQ 84] Canuto, C., y Quarteroni, A. "Variational Methods in the Theoretical Analysis of Spectral Approximations." In "Spectral Methods for Partial Differential Equations". SIAM. Philadelphia. 1984.
- [CChChOT 91] Casasús, T., Checa, E., Chinesta,F., Olmos, F., Torres, R. "Modified Spectral Element Method for the Convection-Diffusion Equation" Proceeding of Non Linear Engineering Computations. Swansea, 1991.
- [CHQZ 88] Canuto, C., Hussaini, M.Y., Quarteroni, A., Zang, T.A. "Spectral Methods in Fluid Dynamics." Springer-Verlag. Springer Series in Comp. Phys. (1988)
- [COCE 90] Codina, R. Oñate, E., Cervera, M., Eckstein, K. "Una formulación de petov-Galerkin para flujos convectivos". I Congreso Met. Num. en Ing. SEMNI (1990)
- [ChT 90] Chinesta,F., Torres, R. "Modelización de las condiciones de contorno para la evaluación por elementos finitos del proceso de convección-difusión de un gas en recintos cerrados" I Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería. Canarias 1990.
- [ChTO 90] Chinesta, F., Torres, R., Olmos, F. "Modelización matemática y tratamiento numérico del proceso de convección-difusión de un gas en un recinto cua-

- sicerrado." *Anales de Ing. Mec.*, Año 8, num. 2, pp 221-227 (1990)
- [CHE 87] Chen, H.T., Chen T.M., Chen, Ch.K. "Híbrido Laplace Transform Finite Element Method for One Dimensional Transient Heat Conduction Problems." *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 63 (1987) pp 83-95
- [ChOCTCh 91] Checa, E., Olmos, F., Casasús, T., Torres, R., Chinesta, F. "Estudio cualitativo y numérico de la ecuación de convección-difusión y aproximación de la solución en una base polinómico-exponencial." *Actas del XII CEDYA-II Congreso de Matemática Aplicada.* (pendiente de publicación).
- [CHU 86] Chung, T. J. *Finite Element Analysis in Fluid Dynamics.* McGraw-Hill. 1986
- [DB 74] Dahlquist, G., Björck. "Numerical Methods." Prentice Hall.(1974)
- [DL 84] Dautray, R., Lions, J.L. "Analyse Mathématique et calcul numérique pour les sciences et les techniques." Masson, París, 1984.
- [DR 85] Davis, P. J., Rabinowitz, P. "Methods for Numerical Integration." Academic Press, Orlando (1985).
- [D 85] Davis, G.B. "A Laplace Transform Technique for the Analytic Solution of a Diffusion-Convection Equation over a Finite Domain". *Appl. Math. Mod.*,9, 69-71 (1985).
- [GHO 84] Gottlieb, D., Hussaini, Y., Orszag, S. "Theory and Applications of Spectral Methods." In "Spectral Methods for Partial Differential Equations". SIAM.

Philadelphia/1984.

- [GO 77] Gottlieb, D., Orszag, S. "Numerical Analysis for Spectral Methods." SIAM.Philadelphia.(1977)
- [HE 90] Heinrich, J. C. "El Método de Petrov-Galerkin para Flujos Convectivos". I Congreso Mét. Num. en Ingeniería. SEMNI (1990)
- [HE 80] Heinrich, J. C. " On Quadratic Element in Finite Element Solutions of Steady-State Convection-Diffusion Equations". Int. J. Num. Meth. Eng.,15 pp. 1041-1052.
- [HB 82] Huges, T. J.R., Brooks, A.N. "A theoretical framework for Petrov-Galerkin method, with discontinuous weighting function: applications to the streamline upwind procedure", in Finite Elements in Fluids, Vol. IV,(Wiley, London, 1982), pp. 46-65.
- [HMM 86] Huges, T.J.R., Mallet, M., Mizukami, A. "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II. Beyond SUPG." Com. Met. App. Mech. Eng., Vol 54, pp 341-355.
- [KNZH 80] Kelly, D. W., Nakazawa, S., Zienkiewicz, O., Heinrich, J.C. "A Note on Upwinding and anisotropic balancing dissipation in finite element approximations to convective diffusion problems". Int. J. for Num. Meth. in Eng. 15, pp. 1705-1711. (1980)
- [Li 85] Lick, Wilbert. "Improved difference approximations to the heat equation" Int. J. for Num. Met. in Eng., 21 pp 1957-1969 (1985)
- [LM 68] Lions, J.L., Magenes, E. "Problemes aux limites non homogenes et applications." Dunod, Paris, 1968

- [MMP 88] Maday, Y., Mavriplis, C., Patera, A.T. Nonconforming Mortar Element Methods: Application to Spectral Discretizations. Publications du Laboratoire D'Analyse Numerique. Université Pierre et Marie Curie. CRNS.(1988) : R88048
- [MP 88] Maday, Y., Patera, A.T. Spectral Element Methods for the Navier-Stokes equation. In A.K. Noor, editor, "State of the art Surveys in Computational Mechanics", ASME, New York,(1988).
- [Ma 69] Malvern, L. "Introduction to the Mechanics of a continuous medium". Prentice-Hall. 1969
- [Ma 89] Mavriplis, C. "Nonconforming Discretizations and "a posteriori" Error Estimators for Adaptive Spectral Element Techniques." Tesis Doctoral por el Massachusetts Institute of Technology.(1989)
- [Me 88] Mercier, B. "An introduction to the Numerical Analysis of Spectral Methods." Springer-Verlag. Lecture Notes in Physics 318.(1988)
- [Mo 84] Morchoisne, Y. "Inhomogeneous Flow Calculations by Spectral methods: Monodomain and Multidomain Techniques." In "Spectral Methods for Partial Differential Equations". SIAM. Philadelphia. 1984.
- [N 90] Noye, B. J. "A New Third-order Finite-difference method for transient one dimensional advection-diffusion". Communications in Appl. Num. Meth.,6, pp. 279-288 (1990)
- [OChT 90] Olmos, F., Chinesta, F., Torres, R. "Un esquema Pseudoespectral para el tratamiento de placas delgadas." Anal. Ing. Mec. año 8, num 3, pp 111-119 (1990)

- [OC 91] Olmos, F., Casasús, T. "Un esquema pseudoespectral para problemas de Control Óptimo". Actas del XIX Congreso Nacional de Estadística, Investigación Operativa e Informática, pp 214-217. Segovia 1991
- [O 80] Orszag, S. "Spectral Methods for Problems in Complex Geometries." J. Comp. Physics 37 (1980), pp 37-70.
- [P 84] Patera, A. T. "A Spectral Element Method for the Fluid Dynamics: Laminar Flow in a Channel Expansion." J. Comput. Phys. 54.(1984),pp. 468-488.
- [RT 88] Raviart, P. A., Thomas, J. M. "Introduction a l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles". Masson 1988.
- [Ro 72] Roache, E. M. "Computational Fluid Dynamics". Hermose Publishers, Albuquerque. New México. (1972)
- [R 88] Ronquist, E. M. "Optimal Spectral Element Methods for the Unsteady Three-Dimensional Incompressible Navier-Stokes Equation." Tesis Doctoral por el Massachusetts Institute of Technology. (1988)
- [Sa 90] Sampaio, P.A.B. "A Petrov-Galerkin modified Operator Formulation for Convection-Diffusion Problems". Int. Journal for Num. Met. in Engin.30, pp. 331-347. (1990)
- [SF 73] Strang, G., Fix, J. "An Analysis of the Finite Element Method". Prentice-Hall 1973
- [SO 90] Strouboulis, T., Oden, J.T. "A Posteriori Error Estimation of Finite Element Approximations in Fluid Mechanics". Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 78 (1990).pp. 201-242.

- [Sz 88] Szimczak, W.G. "An Analysis of Viscous Splitting and Adaptivity for Steady-State Convection-Diffusion Problems". Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 78 (1988).pp. 311-354.
- [Sch 67] Schwartz. "Théorie des distributions". Hermann. Paris. 1967.
- [TD 81] Touzot, G., Dhatt, G. "Une présentation de la méthode des éléments finis". Maloine. 1984
- [TS 72] Tijonov, A., Samarsky, A. "Ecuaciones de la física matemática". MIR. 1972
- [We 88] Weinberger. "Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales." E.Reverté(1988).
- [WM 85] Wait, R., Mitchell, A.R. "Finite Element Analysis and Applications." John Wiley and Sons, 1985
- [ZGW 76] Zienkiewicz, O. C., Gallagher R. H. y Wood P. "Newtonian and Non-Newtonian Viscous Incompressible Flow Finite Element Solution". II Conference on the Mathematics of Finite Elements and Applications. Academic Press. London (1976)



Reunido el Tribunal que suscriba, en el día de la fecha, acordó otorgar, por unanimidad, a este Tes. doctoral de

D. Ernando Olmos Maldonado

la calificación de Apto Cum Laude

Valencia, a 22 de Noviembre de 1991

El Secretario,

Presidente

[Signature]

[Signature]

