



UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA  
FACULTAD DE CIENCIAS  
POSTGRADO EN CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN

# FORMULACIÓN TENSORIAL DE LAS DIFERENCIAS FINITAS MIMÉTICAS Y APLICACIONES A PROBLEMAS ELÍPTICOS

**Autor:** Msc. Jaime Blanco.

**Tutor:** Dr. Otilio Rojas.

Tesis Doctoral presentada ante la  
ilustre Universidad Central de Vene-  
zuela para optar al título de Doctor  
en Ciencias de la Computación.

Caracas, Venezuela

Diciembre 2017





UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA  
FACULTAD DE CIENCIAS  
COMISIÓN DE ESTUDIOS DE POSTGRADO



Comisión de Estudios de  
Postgrado

VEREDICTO

Quienes suscriben, miembros del jurado designado por el Consejo de la Facultad de Ciencias y el Consejo de Estudios de Postgrado de la Universidad Central de Venezuela, para examinar la **Tesis Doctoral** presentada por: **Jaime Blanco López**, cédula de identidad N° **14.746.381**, bajo el título "**Formulación tensorial de las Diferencias Finitas Miméticas y aplicaciones a problemas elípticos**", a fin de cumplir con el requisito legal para optar al grado académico de DOCTOR EN CIENCIAS, MENCIÓN CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN, dejan constancia de lo siguiente:

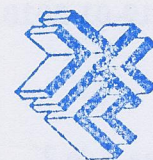
1.- Leído como fue dicho trabajo por cada uno de los miembros del jurado, se fijó el día 19 de Enero de 2018 a las 09:00 AM, para que el autor lo defendiera en forma pública, lo que éste hizo en el **Centro de Computación de la Facultad de Ciencias de la UCV**, mediante un resumen oral de su contenido, luego de lo cual respondió satisfactoriamente a las preguntas que le fueron formuladas por el jurado, todo ello conforme con lo dispuesto en el Reglamento de Estudios de Postgrado.

2.- Finalizada la defensa del trabajo, el jurado decidió aprobarlo, por considerar, sin hacerse solidario con la ideas expuestas por el autor, que se ajusta a lo dispuesto y exigido en el Reglamento de Estudios de Postgrado.

Para dar este veredicto, el jurado estimó que el trabajo examinado representa una contribución a la formulación y el análisis de métodos conservativos de tipo mimético en diferencias finitas. A nivel computacional, esta formulación es sistemática y permite la implementación de métodos numéricos de segundo o cuarto orden de precisión en mallas rectangulares con un refinamiento local opcional. A nivel formal, los análisis de consistencia y estabilidad emplean las propiedades de las diferencias miméticas, lo cual los hace novedosos en el caso de ecuaciones diferenciales elípticas de segundo orden. Los operadores en diferencia presentados y la metodología de estudio son aplicables a otro tipo de problemas de frontera.

En fe de lo cual se levanta la presente ACTA, a los 19 días del mes de Enero del año 2018, conforme a lo dispuesto en el Reglamento de Estudios de Postgrado, actuó como Coordinador del jurado el **Dr. Otilio J. Rojas U.**

*Handwritten signatures and initials in blue ink, including 'AB', 'CF', 'mi', 'jurad', 'Rojas', and 'A'.*





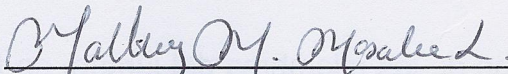
El presente trabajo fue realizado bajo la dirección del doctor **Otilio J. Rojas U. (UCV)**.



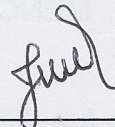
Dr. Jhonnathan Arteaga / C.I. 11.821.510  
Universidad Simon Bolivar  
Jurado designado por el Consejo  
de la Facultad



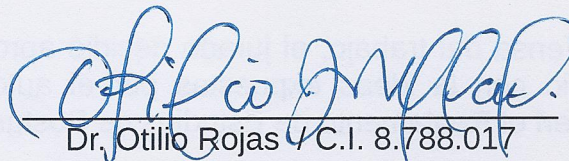
Dr. Luis M. Hernández / C.I. 6.766.769  
Universidad Central de Venezuela  
Jurado designado por el Consejo  
de la Facultad



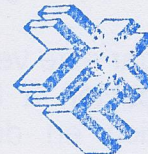
Dra. Marlliny Monsalve / C.I. 13.478.499  
Universidad Central de Venezuela  
Jurado designado por el Consejo  
de Estudios de Postgrado



Dr. Oswaldo Jiménez / C.I. 6.044.417  
Universidad Simon Bolivar  
Jurado designado por el Consejo  
de Estudios de Postgrado



Dr. Otilio Rojas / C.I. 8.788.017  
Universidad Central de Venezuela  
Tutor



POSTGRADO EN CIENCIAS  
DE LA COMPUTACION  
Facultad de Ciencias  
Universidad Central de Venezuela

OR 19-01-2018.

## Resumen

Las aproximaciones miméticas de los operadores diferenciales continuos gradiente, divergencia y rotacional, satisfacen parte de las propiedades fundamentales del cálculo vectorial. En particular, los operadores miméticos en diferencias finitas gradiente y divergencia propuestos por Castillo y colaboradores cumplen con una versión discreta del teorema de integración por partes en mallas centro-distribuidas en 1D. En la aproximación de este principio integral, se introduce un operador de proyección de un campo vectorial en la frontera del dominio, y que también interviene en la discretización del Laplaciano en el interior de la malla. En este trabajo se presenta una formulación tensorial de estos tres operadores en mallas rectangulares en dos y tres dimensiones, y se prueba formalmente que estos nuevos operadores también satisfacen la versión mimética del teorema de la divergencia. A continuación, se procede a la discretización mimética de ecuaciones elípticas de segundo orden bajo condiciones de frontera de tipo Robin. Para el caso de segundo orden de precisión, se presenta un análisis formal de la consistencia de este esquema mimético, y se acotan los autovalores de la matriz asociada al sistema lineal correspondiente para garantizar su no singularidad, ante una amplia gama de parámetros del modelo elíptico. Así, se demuestra la convergencia de la discretización mimética propuesta. Adicionalmente, se formulan dos esquemas numéricos alternativos, uno con segundo orden de precisión en mallas con un refinamiento local e independiente en cada dirección coordenada, y el otro basado en operadores gradiente y divergencia con cuarto orden de precisión sobre un mallado uniforme. A nivel de experimentación numérica, se emplean estos tres esquemas en la resolución de problemas de capa límite, y cuya dificultad se ajusta gradualmente mediante un parámetro del problema. Gracias a un refinamiento de malla apropiado, el esquema de segundo orden no uniforme muestra tasas de convergencia óptimas y mayor precisión que su homólogo uniforme, en todos estos casos. Sin embargo, las soluciones calculadas por el esquema de cuarto orden uniforme resultan las más precisas en

los casos menos severos. En problemas de difusión definidos para un tensor de propiedades no diagonal, se aplica una interpolación lineal de las componentes del vector flujo para permitir su solución mediante los operadores miméticos propuestos. En estos últimos casos, todos los esquemas exhiben una convergencia cuadrática, y de nuevo el esquema no uniforme resulta el más preciso.

Palabras Clave: Diferencias finitas miméticas, productos tensoriales, mallas localmente refinadas, ecuaciones elípticas, error local de truncamiento, método mimético tridimensional de segundo orden.

## Dedicatoria

A mi compañera de vida y amiga de siempre Mary Rivero por su lealtad y fidelidad, a mi madre Emira López y a mis hijos Scarlet Blanco, Benjamín Blanco y Rebeca Blanco por nuestros nexos indestructibles.

## Agradecimiento

Le doy gracias primeramente a Dios por permitirme culminar este trabajo, por darme la salud, las fuerzas y los recursos para que esto fuese posible.

A mi madre Emira López que me apoya y colabora en el quehacer diario y a mis hermanos Carlos Blanco y Flor Blanco por su ayuda en el día a día.

Le agradezco grandemente a mi tutor y compañero Otilio Rojas por el esfuerzo, paciencia y dedicación en todo el desarrollo del trabajo; por todo el tiempo invertido, mucho de él en horas extras, incluso posponiendo algunas obligaciones para poder dedicarlas en la elaboración y corrección del trabajo.

Quiero agradecerle al profesor Juan Guevara por todo su tiempo invertido en el desarrollo de esta tesis para probar los métodos propuestos tanto de manera práctica como de manera teórica.

Agradezco al profesor José Castillo por sus aportes en el tema y por escucharme algunas ideas y proponer elementos en la implementación de los programas.

A la profesor Zenaida Castillo por el tiempo para reunirse conmigo, escuchar las presentaciones y encaminarme en los inicios de la redacción de este documento.

Al Banco Central de Venezuela, la APUCV y la Coordinación de Investigación de la Facultad de Ciencias por su apoyo económico en el viaje para la presentación de un artículo clave para la culminación de este trabajo.

Finalmente expreso mi profundo agradecimiento al profesor y amigo Eliezer Correa que de manera desinteresada me ayudó en muchas etapas y especialmente en la culminación de este trabajo.

## Índice general

Introducción	1
Capítulo 1. Operadores en diferencias finitas miméticas en mallas centro distribuidas	7
1.1. Operadores miméticos en mallas uniformes unidimensionales	8
1.2. Extensión a mallas no uniformes	13
Capítulo 2. Formulación tensorial de los operadores miméticos en mallas rectangulares	15
2.1. Gradiente y divergencia bidimensionales	15
2.2. Operador frontera bidimensional	19
2.3. Gradiente, divergencia y operador frontera tridimensionales	21
2.4. Extensión a mallas 3D con espaciamento no uniforme	26
Capítulo 3. Discretización de ecuaciones elípticas del tipo $\nabla \cdot (k\nabla f) + \omega f = F$	29
3.1. Un método mimético tridimensional	29
3.2. Análisis de consistencia: Error local de truncamiento	31
3.3. Estabilidad del método mimético: Autovalores y no singularidad	34
3.4. Un método mimético bidimensional para un tensor $k$ general	41
Capítulo 4. Experimentación numérica	44
4.1. Experimentación con mallas uniformes y no uniformes en 3D	44
4.2. Experimentación en mallas uniformes y no uniformes en 2D	52
Conclusiones y Recomendaciones	62
Bibliografía	64



## Introducción

El proceso de discretizar espacialmente un problema de valor de frontera (PVF) dado en forma diferencial usando Diferencias Finitas (DF), consiste en sustituir los operadores continuos gradiente, divergencia, rotacional y Laplaciano, por aproximaciones basadas en expansiones de Taylor truncadas, obteniendo una versión discreta de la ecuación original en cada nodo de una malla. Esta malla consiste de un conjunto finito de puntos o nodos que discretizan el dominio continuo de la solución exacta, y en donde se calcula un valor aproximado a dicha solución. En la práctica, esta discretización es un procedimiento rutinario en un nodo interior de la malla, donde el uso de fórmulas centradas en DF conduce a ecuaciones discretas bastante simétricas respecto a este nodo. Al contrario, la solución está sujeta a condiciones físicas adicionales en las fronteras del dominio, por lo que un tratamiento numérico especial y menos sistemático debe ser aplicado en los nodos de borde. Una implementación muy común consiste en extender la malla fuera de las fronteras físicas, mediante nodos exteriores llamados fantasmas, y que permiten la aplicación de la ecuación discreta interior en un nodo de borde, y su combinación con una aproximación en DF de la condición de frontera [61] [38]. Aunque esta estrategia permite calcular la solución aproximada en los bordes, puede resultar físicamente inconsistente, pues la ecuación diferencial está típicamente definida en el abierto del dominio de la solución [27], [10].

El proceso tradicional de discretización en DF anteriormente descrito presenta dos deficiencias fundamentales. En primer lugar, el tratamiento numérico de las condiciones de borde basado en nodos fantasmas u otro proceso ad hoc, no es sistemático ni riguroso, y en ciertas aplicaciones podría limitar el orden de precisión de las discretizaciones para garantizar la estabilidad numérica. Como ejemplos ampliamente usados se tienen las formulaciones de *vacío* y de *extrapolación de esfuerzos* (o *stress imaging* como es conocido en la literatura inglesa) para la simulación de superficies libres en medios elásticos o visco elásticos, para idealizar el contacto topográfico tierra-aire y su efecto en las ondas sísmicas. Ambas técnicas agregan varios niveles de nodos fantasmas por encima de la superficie, donde la densidad y demás

propiedades del material son cuidadosamente ajustados por promedios de sus valores típicos en los medios en contacto. Los campos de ondas discretos en los nodos fantasmas resultan de una extrapolación de sus imágenes en el sólido interior, o bien son calculados mediante una discretización de bajo orden de la ecuación de ondas, pues aproximaciones de cuarto orden o superior inducen inestabilidades numéricas. Una descripción de estas formulaciones de superficie libre junto a sus dificultades numéricas se resumen en [42, 22, 20, 48].

La segunda deficiencia del proceso tradicional de discretización en DF surge cuando cada operador diferencial presente en el modelo continuo se aproxima en forma aislada, y estas nuevas representaciones discretas no necesariamente satisfacen las propiedades de sus contrapartes continuas. Como ejemplos de estas propiedades se pueden listar: (i) el gradiente es nulo sólo para un campo escalar constante, (ii) la divergencia resulta cero sólo para el rotacional de un campo vectorial dado, (iii) el rotacional es nulo sólo para el gradiente de un campo escalar dado, y (iv) el gradiente debe ser el negativo adjunto de la divergencia, y viceversa, lo cual hace del Laplaciano un operador compuesto que resulta simétrico y negativo. Estas propiedades relacionadas con el espacio nulo (o kernel) y la adjunción negativa de los operadores continuos mencionados resultan fundamentales al establecer leyes de conservación, y su preservación en el discreto garantiza la estabilidad de las soluciones aproximadas. Al respecto, una concisa discusión puede ser encontrada en [39] [10].

En un esfuerzo por subsanar las deficiencias antes mencionadas, manteniendo la simplicidad y eficiencia computacional de las DF, nuevas familias de operadores discretos en diferencias denominados *conservativos* o *miméticos* han sido propuestos en los últimos 50 años, y aplicados a la resolución de PVF en múltiples áreas. La idea fundamental es construir operadores en DF para la divergencia ( $D$ ), el gradiente ( $G$ ) y el operador rotacional ( $C$ ) que preserven algunas identidades fundamentales del cálculo vectorial, como las referidas anteriormente, en conjunción con un principio integral del tipo Green-Gauss-Stokes o también llamado teorema de la divergencia. Este teorema interviene en la formulación de varias ecuaciones en derivadas parciales a partir de principios de conservación, como es ampliamente conocido [27, 2]. Para una revisión histórica de la evolución de estas técnicas miméticas el lector puede recurrir al texto [53] y a la monografía [23], y en la última se listan las contribuciones desarrolladas en las universidades venezolanas. Recientemente, se han publicado

los libros de texto [13],[34], y [10], los cuales proporcionan revisiones alternativas y actualizadas de las metodologías de construcción, áreas de aplicación y enfoques relacionados a los operadores miméticos. En este trabajo, se presta particular atención al tipo de malla de discretización del medio, y al orden de precisión de los operadores desarrollados.

En mallas nodales, una familia importante de DF miméticas son los operadores de *suma por partes* (SPP), cuyo desarrollo y aplicaciones iniciales fueron enfocados en la discretización conservativa de problemas de propagación de onda [36] [44], [45], [60]. La discretización SPP bajo tratamiento conveniente de las condiciones de borde mimetiza las propiedades de disipación de energía del modelo de onda continuo, y en consecuencia los métodos numéricos son estables. Esta propiedad ha motivado a investigadores a aplicar SPP en otros problemas de propagación de onda más generales con geometrías complejas considerando mallas curvilíneas [3], [35], [17]. En su construcción, los operadores de discretización SPP son menos precisos en los nodos de la frontera que en los nodos interiores.

En mallas encajadas, encontramos a la vez dos familias de operadores miméticos de discretización. La primera familia está basada en los *operadores de soporte* (SO) de divergencia ( $D$ ), gradiente ( $G$ ) y el operador rotacional ( $C$ ). Estos operadores satisfacen identidades fundamentales del cálculo vectorial, incluyendo la propiedad de adjunción negativa entre  $D$  y  $G$ , y la correcta definición de los kernels de los tres operadores  $D$ ,  $G$  y  $C$ , referidas en el tercer párrafo de esta sección [30] [31] [39]. Esta familia ha sido ampliamente aplicada a problemas de difusión e hiperbólicos, incluso en mallas no rectangulares [52] [54] [11] [33], [32] [29],[7], [18], [26], [19]. Los operadores reformulados en [26], en mallas poligonales, proporcionan precisión de segundo orden en toda la red de discretización. Sin embargo, múltiples aplicaciones previas de estos métodos SO, realizan aproximaciones de primer orden al implementar las condiciones de frontera.

La segunda familia de operadores miméticos en mallas encajadas fueron propuestos más recientemente en [9], y luego Castillo y Grone [8] presentan una revisión de la construcción algebraica en [8], ambos en un dominio unidimensional. Estos autores se enfocan exclusivamente en los operadores divergencia  $D$  y gradiente  $G$ , los cuales satisfacen una versión discreta del principio de integración por partes, y donde las integrales de volumen se corresponden con dos productos internos pesados. Las matrices de peso  $P$  y  $Q$  pasan a ser nuevos operadores miméticos de integración numérica, y son fundamentales en la construcción de

esta nueva familia, y en su extensión a dominios multidimensionales, como se verá en el desarrollo de este trabajo. Una propiedad muy importante de los operadores presentados en [9], [8] y [11], es su precisión opcional entre segundo, cuarto y sexto orden, en base a fórmulas centradas en los nodos de malla interiores, y fórmulas laterales en los puntos de frontera. Esta última propiedad tiene el potencial de permitir la discretización de condiciones de frontera evitando puntos fantasmas, lo cual hace del tratamiento numérico en los bordes, un procedimiento más sistemático y consistente. En mallas estructuradas, los operadores en diferencias  $D$  y  $G$  han permitido resolver múltiples problemas en propagación de ondas con un tratamiento crucial de las condiciones de frontera [47, 49, 43, 14, 48, 55, 16], además de llevar a cabo aplicaciones a la ecuación de Poisson [1, 28]. Recientemente, la metodología original de construcción presentada en [9] y [8], ha sido reformulada en [50] haciendo uso de herramientas de programación lineal, con el objeto de garantizar la positividad de los pesos  $P$  y  $Q$ , al generar nuevos operadores miméticos con alta precisión de hasta orden doceavo.

Un aporte fundamental al desarrollo de la segunda familia de operadores miméticos es la introducción en [11] de un nuevo operador  $B$ , el cual aproxima el flujo de un campo vectorial en la frontera del dominio, con la misma precisión utilizada por los restantes operadores en los puntos interiores de la malla. La definición de este operador parte del principio discreto de integración por partes, resultando que  $B = QD + G^T P$ . Este operador permite un tratamiento numérico de las condiciones de borde tipo Neumann o Robin, y la solución discreta al PVF finalmente calculada satisface automáticamente la versión mimética de la identidad de Green. En consecuencia, se espera satisfaga las propiedades de conservación y simetría inherentes a la solución continua. De inmediato, este conjunto completo de operadores en diferencias finitas miméticas (DFM)  $D$ ,  $G$  y  $B$  fue usado en mallas 2D rectangulares, para la resolución de problemas de difusión [24, 25, 41, 21, 12] e hiperbólicos en modelos ondulatorios [56, 58, 46, 57]. A la fecha, sin embargo, la formulación de estos operadores DFM en mallas tridimensionales y su uso en la solución de PVF en 3D, sólo ha sido presentado en geometrías rectangulares en un trabajo previo a esta tesis, por el mismo autor [6]. El contenido de este trabajo, revisa y amplía las contribuciones en [6].

Extensiones de operadores 1D en DF a mallas estructuradas en dos y tres dimensiones espaciales, empleando productos tensoriales, es una técnica bien conocida [15, 59]. En un contexto bidimensional, todas las aplicaciones citadas en el párrafo anterior corresponden a



esquemas miméticos de segundo orden, desarrollados a partir de los operadores DFM en 1D, pero ninguno utiliza una construcción tensorial de los mismos a nivel de la formulación e implementación computacional. En su lugar, la formulación de estos esquemas se instancia en cada nodo de la malla, siendo este proceso intrincado en los nodos vecinos a las fronteras de la malla dada la contribución del operador  $B$  al cálculo del Laplaciano (ver [11, 6, 57]). Por esta misma razón, la generalización de estos operadores a tres dimensiones es una tarea para nada sencilla. Es importante hacer notar que los operadores DFM en 3D han sido expresados en una notación tensorial en [58] y usados en la discretización de la ecuación de onda acústica, pero las implementaciones numéricas presentadas se reducen a mallas 2D cartesianas. Recientemente, una formulación tensorial de los operadores  $D$  y  $G$  fue usada en [49] al resolver las ecuaciones transitorias de Maxwell bajo condiciones de borde Dirichlet, y posteriormente empleadas en [51] como una base para el proyecto MTK, la cual es una librería orientada a objetos de operadores miméticos en desarrollo, y con aplicaciones actuales a la ecuación de Poisson. Estos últimos trabajos ([49] y [51]) son limitados a mallas rectangulares 2D y 1D, respectivamente, y omiten el operador de frontera  $B$ . A la fecha, no es de nuestro conocimiento la existencia de una formulación tensorial 3D de los operadores DFM  $D$ ,  $G$  y  $B$ , acompañada de pruebas numéricas satisfactorias, en la literatura técnica.

El objetivo principal de este trabajo es formular, implementar y probar los operadores DFM  $D$ ,  $G$  y  $B$  en dos y tres dimensiones, a partir de una extensión tensorial de los operadores 1D con segundo y cuarto orden de precisión dados en [9], [11] y [24] a mallas rectangulares uniformes y no uniformes. En función de lograr esta meta principal se han trazado los siguientes objetivos específicos:

1. Diseñar e implementar una formulación tensorial de los operadores DFM  $D$ ,  $G$  y  $B$  en mallas rectangulares 2D y 3D, con espaciamiento uniforme y no uniforme.
2. Probar que los nuevos operadores DFM tensoriales, junto a la generalización de los operadores de integración  $P$  y  $Q$ , satisfacen la versión discreta del teorema de la divergencia en el caso multidimensional.
3. Formular un nuevo método mimético de resolución de cierta clase de problemas elípticos, y analizar su consistencia, así como la invertibilidad del sistema de ecuaciones asociado.
4. Aplicar este nuevo método mimético, y sus posibles generalizaciones, a problemas elípticos con diferentes grados de dificultad atendiendo a las siguientes características:

- La presencia de fuertes gradientes de la solución exacta en la vecindad de las fronteras del dominio.
  - En el caso de problemas de difusión, la representación de la propiedad de difusividad del medio como un tensor completo.
5. Presentar conclusiones referentes a la precisión, convergencia, y robustez de los métodos miméticos desarrollados en este trabajo.

## Operadores en diferencias finitas miméticas en mallas centro distribuidas

En forma breve, este capítulo revisa la formulación de los operadores en diferencias finitas miméticas (DFM) introducidos y analizados en [9], [8], y [11], en mallas centro distribuidas. Estos operadores discretos aproximan a los operadores diferenciales continuos gradiente y divergencia, y junto a productos internos compatibles, también satisfacen una identidad discreta análoga al teorema de la divergencia de Gauss. En cuanto a la precisión de la diferenciación numérica, los operadores en DFM de gradiente y divergencia son formulados en [9] y [8] con segundo, cuarto, e incluso sexto orden en todas las ubicaciones de la malla centro distribuida, incluyendo los bordes. Los productos internos que permiten aproximar las integrales de volumen en la identidad mimética de Gauss son pesados, y estos pesos corresponden a matrices diagonales con los coeficientes de cuadraturas numéricas de igual precisión a la diferenciación. En [11], se estudia un nuevo operador mimético que permite proyectar un campo vectorial en la frontera del dominio, por lo que pasa a contribuir en la aproximación de la integral de superficie también presente en el principio discreto de Gauss. Estos conceptos son la esencia de la siguiente revisión, así como su extensión al caso de mallas unidimensionales no uniformes propuesta posteriormente en [5].

Considere un dominio  $\Omega$  tridimensional con frontera continua y suave  $\partial\Omega$ . El teorema de la divergencia de Gauss y la regla del producto nos permiten escribir para un campo vectorial  $\mathbf{v}$  y un campo escalar  $f$ , la siguiente identidad

$$(1.1) \quad \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} f dV + \int_{\Omega} \nabla f \cdot \mathbf{v} dV = \int_{\partial\Omega} f(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) dS.$$

En [9], [8] y [11] se propone una identidad discreta análoga a la ley de conservación (1.1) usando productos internos pesados  $\langle, \rangle_Q$  y  $\langle, \rangle_P$  junto con aproximaciones de la divergencia  $D \approx \nabla \cdot$ , del gradiente  $G \approx \nabla$ , y del operador especial de proyección en la frontera  $B \approx \partial/\partial\hat{\mathbf{n}}$ .

Esta identidad discreta se especifica a continuación

$$(1.2) \quad \langle D\vec{v}, \vec{f} \rangle_Q + \langle G\vec{f}, \vec{v} \rangle_P = \langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle .$$

Los operadores matriciales  $D$ ,  $G$  y  $B$  son construidos de acuerdo a las evaluaciones vectoriales  $\vec{v}$  y  $\vec{f}$  de los campos continuos  $v$  y  $f$  respectivamente, sobre una malla definida en  $\Omega$ . El operador  $B$  incorpora la proyección de  $\vec{v}$  sobre el vector normal exterior  $\hat{n}$  en la frontera y debe satisfacer adicionalmente que

$$(1.3) \quad B = QD + G^T P.$$

La identidad (1.3) se deriva del principio discreto (1.2) en una forma muy sencilla.

### 1.1. Operadores miméticos en mallas uniformes unidimensionales

En particular, los autores en [9] y [8] introducen una malla de celdas igualmente espaciadas  $[x_i, x_{i+1}]$  y nodos  $x_i = i * h$ , para  $h = 1/N$  y  $0 \leq i \leq N - 1$ . Estos nodos representan las componentes del vector  $\vec{X}_n = (x_0, x_1, \dots, x_N)$ . Esta malla se convierte en encajada o centro distribuida después de incluir todos los puntos centrales o centros de celda (encajados entre nodos)  $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_i+x_{i+1}}{2}$ , y que se agrupan en el vector  $\vec{X}_c = (x_{\frac{1}{2}}, x_{\frac{3}{2}}, \dots, x_{N-\frac{1}{2}})$ . Adicionalmente, se define el vector  $\vec{X}_b = (x_0, x_N)$  sólo a partir de los nodos de frontera, como también el vector  $\vec{X}_{cb} = (x_0, x_{\frac{1}{2}}, x_{\frac{3}{2}}, \dots, x_{N-\frac{1}{2}}, x_N)$ , que incluye tanto los centros de celda como los puntos de borde.

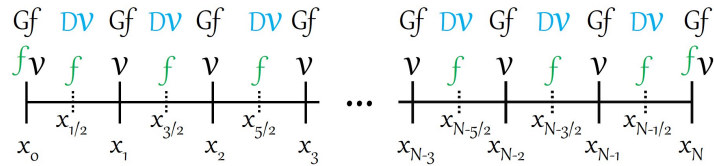


FIGURA 1.1. Malla encajada o centro distribuida en un dominio 1D

A continuación, se definen los vectores  $\vec{v}$ ,  $\vec{f}$  a partir de las evaluaciones de la función  $v$  en el vector  $\vec{X}_n$  y de la función  $f$  en el vector  $\vec{X}_{cb}$

$$(1.4) \quad \vec{v} = v(\vec{X}_n)$$







Para mayor claridad, a continuación se muestra el conjunto de estenciles para el Laplaciano discreto junto con los errores locales de truncamiento asociados

(1.11)

$$(BG+\bar{D}G)\vec{f} = \begin{pmatrix} \frac{8}{3h} & -\frac{3}{h} & \frac{1}{3h} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h} & \frac{1}{2h} - \frac{4}{h^2} & \frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \frac{1}{3h} & \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h} & \frac{1}{6h} - \frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \cdots & & & & 0 & \frac{1}{h^2} & \frac{1}{6h} - \frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h} & \frac{1}{3h} \\ \cdots & & & & 0 & 0 & \frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h} & \frac{1}{2h} - \frac{4}{h^2} & \frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h} \\ \cdots & & & & 0 & 0 & \frac{1}{3h} & -\frac{3}{h} & \frac{8}{3h} \end{pmatrix} \vec{f}$$

$$(1.12) \quad = \begin{pmatrix} f'(x_0) + O(h^2) \\ f''(x_{\frac{1}{2}}) + h\left(\frac{f'''(x_{\frac{1}{2}})}{6} - \frac{f''(x_{\frac{1}{2}})}{8}\right) + O(h^2) \\ f''(x_{\frac{3}{2}}) + h\frac{f''(x_{\frac{3}{2}})}{8} + O(h^2) \\ f''(x_{\frac{5}{2}}) + h^2\frac{f^{iv}(x_{\frac{5}{2}})}{12} + O(h^4) \\ \vdots \\ f''(x_{N-\frac{3}{2}}) + h\frac{f''(x_{N-\frac{3}{2}})}{8} + O(h^2) \\ f''(x_{N-\frac{1}{2}}) + h\left(\frac{f'''(x_{N-\frac{1}{2}})}{6} - \frac{f''(x_{N-\frac{1}{2}})}{8}\right) + O(h^2) \\ f'(x_N) + O(h^2) \end{pmatrix}$$

Las aproximaciones laterales a  $f'(x_0)$  y  $f'(x_N)$  y el estencil central para  $f''_{\frac{i}{2}}$  con  $i = 5, 7, \dots, N - \frac{5}{2}$  corresponden a las fórmulas estándar de Taylor de segundo orden. Por otro lado, los estenciles laterales para  $f''(x_{\frac{1}{2}})$ ,  $f''(x_{\frac{3}{2}})$ ,  $f''(x_{N-\frac{3}{2}})$ , y  $f''(x_{N-\frac{1}{2}})$  resultan al añadir la contribución de los elementos interiores no nulos de  $BG\vec{f}$ , a la aproximación laplaciana estándar  $DG$  en esos centros de malla. Este proceso reduce la precisión a primer orden, pero es necesario para imponer la propiedad de conservación (1.2) a las soluciones discretas de las ecuaciones diferenciales de segundo orden, bajo discretización mimética. Esta deficiencia de precisión nominal en la discretización de problemas de valores de frontera, se ha discutido en algunos antecedentes a este trabajo (por ejemplo, [11], [24]), pero al mismo tiempo se ha mostrado

una convergencia coherente de segundo orden en las pruebas numéricas. Los errores locales de truncamiento de primer orden sólo están presentes en unos pocos puntos de malla cercanos del borde, y esto no degrada la convergencia global.

En [9] y [8] se proponen una familia tri-paramétrica  $(\alpha, \beta, \gamma)$  de los operadores  $D$  y  $G$  con cuarto orden de precisión, además de pesos  $P$  y  $Q$  con igual orden de aproximación. En este trabajo sólo usamos aquellos operadores que exhiben un reducido ancho de banda, teniendo los valores particulares  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$  and  $\gamma = -\frac{1}{24}$  para la divergencia

$$(1.13) \quad D = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} -\frac{4751}{5192} & \frac{909}{1298} & \frac{6091}{15576} & -\frac{1165}{5192} & \frac{129}{2596} & -\frac{25}{15576} & 0 & \cdots \\ \frac{1}{24} & -\frac{9}{8} & \frac{9}{8} & -\frac{1}{24} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \cdots & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24} & -\frac{9}{8} & \frac{9}{8} & -\frac{1}{24} \\ \cdots & 0 & \frac{25}{15576} & -\frac{129}{2596} & \frac{1165}{5192} & -\frac{6091}{15576} & -\frac{909}{1298} & \frac{4751}{5192} \end{pmatrix}$$

y para el operador gradiente estos parámetros resultan ser  $\alpha = \frac{1}{24}$ ,  $\beta = 0$  y  $\gamma = -\frac{1}{24}$ , obteniendo

$$(1.14) \quad G = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} -\frac{1152}{407} & \frac{10063}{3256} & \frac{2483}{9768} & -\frac{3309}{3256} & \frac{2099}{3256} & -\frac{697}{4884} & 0 & \cdots \\ 0 & -\frac{11}{12} & \frac{17}{24} & \frac{3}{8} & -\frac{5}{24} & \frac{1}{24} & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{1}{24} & -\frac{9}{8} & \frac{9}{8} & -\frac{1}{24} & 0 & 0 & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \cdots & 0 & 0 & \frac{1}{24} & -\frac{9}{8} & \frac{9}{8} & -\frac{1}{24} & 0 \\ \cdots & 0 & -\frac{1}{24} & \frac{5}{24} & -\frac{3}{8} & -\frac{17}{24} & \frac{11}{12} & 0 \\ \cdots & 0 & \frac{697}{4884} & -\frac{2099}{3256} & \frac{3309}{3256} & -\frac{2483}{9768} & -\frac{10063}{3256} & \frac{1152}{407} \end{pmatrix}.$$

Los pesos  $P$  y  $Q$  para los productos internos en (1.2) corresponden a

$$(1.15) \quad P = h * \text{diag}\left(\frac{407}{1152}, \frac{473}{384}, \frac{343}{384}, \frac{1177}{1152}, 1, 1, \dots, 1, 1, \frac{1177}{1152}, \frac{343}{384}, \frac{473}{384}, \frac{407}{1152}\right) \in \mathbb{R}^{(N+1) \times (N+1)}$$

y

$$(1.16) \quad Q = h * \text{diag}\left(\frac{649}{576}, \frac{143}{192}, \frac{75}{64}, \frac{551}{576}, 1, 1, \dots, 1, 1, \frac{551}{576}, \frac{75}{64}, \frac{143}{192}, \frac{649}{576}\right) \in \mathbb{R}^{(N+2) \times (N+2)}.$$



La versión de alto orden del operador  $B$  se puede construir usando la ecuación (1.3) y los operadores de cuarto orden dados anteriormente. Sin embargo, este operador mimético  $B$  de cuarto orden no es realmente usado en este trabajo. En su lugar, se considera un operador de frontera  $B$  alternativo, que sólo incorpora el signo  $-1$  y  $+1$  del vector normal exterior en  $x = 0$  y  $x = 1$ , requerido para la implementación de condiciones de frontera tipo Newmann o Robin. En este caso,  $B$  coincide con la matriz nula con excepción de las componentes  $B(1,1) = -B(N+2, N+2) = -1$ , y nos referimos a un esquema en DF basado en el uso de esta  $B$  simplificada como DF tradicional (DFT), aun cuando el uso de nodos fantasmas extra fronteras es descartado. Este método DFT basado en el operador simplificado  $B$  es implementado en este trabajo, y sus resultados forman parte de un análisis de precisión comparativo de resultados experimentales para diversos casos de prueba. Los otros métodos numéricos que participan en estas comparaciones son esquemas miméticos de segundo orden que incluyen el operador  $B$  definido en (1.10).

## 1.2. Extensión a mallas no uniformes

En esta sección se discute brevemente la adaptación de los operadores miméticos  $G$ ,  $D$  y  $B$  a una malla no uniforme en una dimensión presentada en [5]. En dicho trabajo se emplea una transformación  $\tau(x)$  entre la malla encajada uniformemente espaciada e ilustrada en la figura 1.1, y una malla no uniforme. El primer paso es aproximar la evaluación del jacobiano de  $\tau(x)$  en los nodos  $\vec{X}_n$  y en el vector  $\vec{X}_{cb}$  que agrupa los centros de celda y puntos frontera. Estas aproximaciones se calculan en la forma siguiente

$$(1.17) \quad J_D = \text{diag}(\bar{D} * v(\tau(\vec{X}_n))), \quad J_G = \text{diag}(G * f(\tau(\vec{X}_{cb}))).$$

Luego, estas matrices diagonales son usadas para extender los operadores miméticos a la malla irregular unidimensional, de la siguiente manera

$$(1.18) \quad \tilde{D} = (J_D^{-1}) * \bar{D}; \quad \tilde{G} = (J_G^{-1}) * G; \quad \tilde{P} = J_G * P; \quad \tilde{Q} = J_D * Q.$$

Al reemplazar los operadores uniformes en (1.3) por sus correspondientes no uniformes dados en (1.18), el operador  $B$  permanece invariante bajo transformaciones en 1D, tal como se deduce a continuación

$$\tilde{B} = \tilde{Q} * \tilde{D} + \tilde{G}^T * \tilde{P}$$

$$= J_D * Q * (J_D^{-1}) * \bar{D} + ((J_G^{-1}) * G)^T * J_G * P$$

y dado que  $Q$  y  $J_D$  son diagonales

$$\begin{aligned} &= Q * J_D * (J_D^{-1}) * \bar{D} + G^T * (J_G^{-1}) * J_G * P \\ &= Q * \bar{D} + G^T * P = B. \end{aligned}$$

Esto es consistente con el hecho que los vectores exteriores normales en la frontera también permanecen invariantes. Además, las contribuciones del operador  $B\tilde{G}$  al Laplaciano en los puntos vecinos a la frontera, ya cuentan con el efecto de la transformación  $\tau(x)$  en los estenciles que conforman  $\tilde{G}$ .

## Formulación tensorial de los operadores miméticos en mallas rectangulares

La aplicación de los operadores miméticos en DF gradiente, divergencia, y aproximante del flujo en la frontera a mallas rectangulares y encajadas en dos y tres dimensiones, se puede lograr mediante el uso sucesivo de los operadores unidimensionales a lo largo de cada una de las líneas coordenadas de la malla. Este proceso de diferenciación resulta sistemático, si se aplica siguiendo un ordenamiento por ejes coordenados. Intuitivamente, dicho proceso conduce a una formulación sencilla de los operadores miméticos 2D y 3D como el producto tensorial de sus homólogos 1D. Este capítulo presenta una formulación de estos operadores basada en el producto Kronecker, donde se sigue el ordenamiento natural al aplicar la diferenciación unidimensional a lo largo del eje  $x$ , seguida de la diferenciación en  $y$ , y finalmente en  $z$ . Cabe mencionar que formulaciones tensoriales para el gradiente y divergencia miméticos en mallas rectangulares en dos y más dimensiones han sido presentadas en [49], [10] y [58]. Sin embargo, una fórmula similar para el operador frontera no ha sido propuesta en la literatura técnica a la fecha. La principal contribución de este capítulo es una expresión tensorial y compacta para el operador frontera, así como la justificación formal de que este operador también satisface la identidad discreta y mimética de Gauss.

### 2.1. Gradiente y divergencia bidimensionales

Sin pérdida de generalidad, se considera el cuadrado  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  como el dominio de discretización. En la dirección  $x$ , se definen  $N$  celdas de igual tamaño, y vectores  $\vec{X}_n$ ,  $\vec{X}_c$ ,  $\vec{X}_b$  y  $\vec{X}_{cb}$  con los puntos resultantes de la discretización 1D presentada previamente en la sección 1.1. Los operadores  $G_x^{1D}$  y  $\bar{D}_x^{1D}$  representan al gradiente y divergencia discretos en 1D que realizan diferenciación mimética a lo largo del eje  $x$ . Así,  $G_x^{1D}$  representa un operador lineal que transforma los valores de la función  $f$  evaluados en el vector  $\vec{X}_{cb}$  para aproximar a  $\partial f / \partial x$  en  $\vec{X}_n$ . Del mismo modo,  $\bar{D}_x^{1D}$  proyecta linealmente evaluaciones de una función  $v$  en

$\vec{X}_n$  sobre aproximaciones a  $\partial v/\partial x$  en  $\vec{X}_c$ . La diferenciación mimética en la malla encajada de  $\Omega$ , se completa al aplicar la misma discretización presentada a lo largo de  $x$ , a una partición de  $M$  celdas uniformes definidas en la dirección  $y$ , obteniendo los vectores  $\vec{Y}_n, \vec{Y}_c, \vec{Y}_b, \vec{Y}_{cb}$ , y que sirven de dominio y rango para los operadores 1D de gradiente y divergencia  $G_y^{1D}, \bar{D}_y^{1D}$ .

En la tabla 2.1<sup>1</sup> se muestra la distribución de una función escalar  $f$  y una función vectorial  $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$  en la malla encajada 2D. Las evaluaciones de  $f, v_x, v_y$ , están ordenados en los vectores  $\vec{f}, \vec{v}_x, \vec{v}_y$ , respectivamente, siguiendo el ordenamiento natural donde el índice asociado a la coordenada  $x$  varía más rápidamente. La tabla 2.1 muestra que la distribución discreta de  $f$  incluye las 4 esquinas del dominio  $\Omega$ , que han sido omitidas en la formulación tradicional del método mimético (por ejemplo, ver [10]). Estas esquinas incorporadas simplifican la construcción del operador gradiente 2D, pues cada línea de la malla (sea en  $x$  o  $y$ ) replica la malla 1D para el campo  $f$ . En la columna 3 de la tabla 2.1, se lista el conjunto de puntos de la malla  $f$  que se usan en la formulación mimética tradicional 2D. A nivel de costo de almacenamiento, las cuatro evaluaciones extra de  $f$  en la nueva formulación resulta insignificante en comparación con el número total de nodos de  $f$  que es  $O[(N+2)*(M+2)]$ .

Campo	Con Esquinas	Convencional
$\vec{f}$	$\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_{cb}$	$\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_c \cup \vec{X}_c \times \vec{Y}_b$
$\vec{v}_x$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_c$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_c$
$\vec{v}_y$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_n$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_n$

TABLA 2.1. Distribución de los campos discretos  $\vec{f}, \vec{v}_x, \vec{v}_y$  en una malla encajada 2D

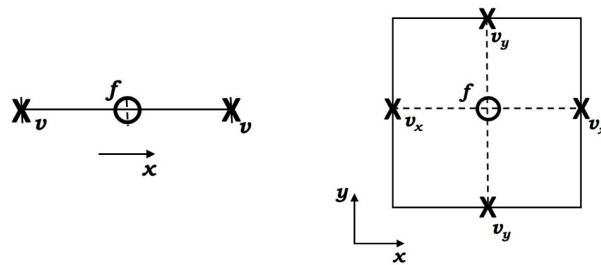
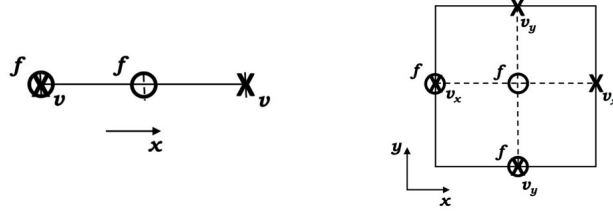


FIGURA 2.1. Celdas interiores de  $f$  y  $\mathbf{v}$  en mallas encajadas 1D y 2D

<sup>1</sup>El operador  $\times$  denota el producto cartesiano usado en la teoría de conjuntos y su aplicación en este contexto hace tuplas de puntos de la malla.



FIGURA 2.2. Celdas frontera de  $f$  y  $\mathbf{v}$  en mallas encajadas 1D y 2D

Las figuras 2.1 y 2.2 ilustran respectivamente, la generalización de una celda de malla de 1D a 2D, ya sea el caso de una celda interior, o de una celda en la frontera de  $\Omega$ . En el caso de un celda frontera, los círculos en la figura 2.2 representan los nodos sobre el borde del dominio. Como ya se mencionó, la distribución centro distribuida 2D de  $\vec{f}$  puede verse como el producto cartesiano de las distribuciones 1D sobre ambos ejes, y conduce a una formulación algebraica del gradiente mimético  $G^{2D}$  como la matriz en bloques que se muestra a continuación

$$(2.1) \quad G^{2D} = \begin{pmatrix} G_x^{2D} \\ G_y^{2D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{M+2} \otimes G_x^{1D} \\ G_y^{1D} \otimes I_{N+2} \end{pmatrix}.$$

En esta expresión,  $I_S$  es la matriz identidad de dimensión  $S$ , y el operador  $\otimes$  corresponde al producto Kronecker matricial, definido de la siguiente manera

$$(2.2) \quad A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix}.$$

La aproximación a las componentes del gradiente continuo  $\nabla f$  se hace separadamente por componentes, esto es,  $G_x^{2D} \vec{f}$  y  $G_y^{2D} \vec{f}$ . El término  $G_x^{2D} \vec{f}$  produce una aproximación a la primera componente  $\partial f / \partial x$  en el punto central de los lados verticales de cada celda. Debido a la inclusión de las evaluaciones de  $f$  en las esquinas,  $G_x^{2D} \vec{f}$  también produce aproximaciones a este componente de gradiente en las dos fronteras horizontales de la malla 2D. Específicamente, sobre los puntos con abscisas  $\vec{X}_n$  en ambos bordes de la malla  $y = 0, 1$ . Estas aproximaciones no se encuentran en la formulación mimética convencional, y en la tabla 2.2

se comparan ambos conjuntos de aproximaciones a  $\partial f/\partial x$ , dadas en la nueva formulación con esquinas, como en la formulación convencional (ver fila 1). De manera similar, la aplicación de  $G_y^{2D}\vec{f}$  conduce a aproximaciones a  $\partial f/\partial y$  ya existentes en la formulación convencional, con las aproximaciones adicionales en los puntos con ordenadas  $Y_n$  en ambos bordes de la malla  $x = 0, 1$ . La tabla 2.2 en su fila 2, compara el rango discreto de la operación  $G_y^{2D}\vec{f}$  en ambas formulaciones. La disponibilidad de todos los componentes discretos de gradiente en los límites de la malla podría permitir una aproximación de flujos generalizados  $k\nabla f$ , en las discretizaciones de problemas de difusión con tensor completo  $k$ . Sin embargo, la ubicación escalonada de las componentes individuales del gradiente amerita de estrategias de interpolación, para poder aproximar  $k\nabla f$  en una misma localización. Esta forma de condiciones de frontera se presentan en problemas de difusión en medios no isotrópicos y donde el tensor de permeabilidad  $k$  es una matriz simétrica arbitraria. En estos casos, interpolaciones adicionales son también requeridas para discretizar  $\nabla \cdot (k\nabla f)$  en puntos interiores de la malla. Ahora, este tema es abordado en el próximo capítulo.

Las componentes del vector  $\mathbf{v} = (v_x, v_y)^T$  se distribuyen de manera independiente a lo largo de la malla encajada 2D. Cada componente tiene un lugar distinto y coincidente con el punto central de un lado de la celda, y que se indican en la tabla 2.1. Esta distribución de los valores discretos de  $v_x$  y  $v_y$  en la malla 2D también se ilustran en las figuras 2.1 y 2.2, donde se aprecia que esta distribución es la misma para celdas en el interior o en la frontera de la malla. A continuación se considera un nuevo vector discreto  $\vec{v}$  y cuyas componentes son todos los valores de  $\vec{v}_x$ , seguidos por los valores de  $\vec{v}_y$ , ambos manteniendo el orden natural ya impuesto en esos vectores. Por lo tanto,  $\vec{v} = (\vec{v}_x, \vec{v}_y)^T$ . La aproximación mimética a  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  puede calcularse en los puntos centrales de cada celda de la malla por el producto  $D^{2D}\vec{v}$ , donde  $D^{2D}$  es el operador divergencia en 2D definido a continuación

$$(2.3) \quad D^{2D} = \begin{pmatrix} D_x^{2D} & D_y^{2D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \check{I}_{M+2} \otimes \bar{D}_x^{1D} & \bar{D}_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \end{pmatrix}.$$

La matriz  $\check{I}$  se deriva de la matriz identidad al añadir vectores con ceros en la primera y la última fila, así como, en la primera y la última columna. Por ejemplo, en el caso de la

coordenada  $x$  se tiene

$$(2.4) \quad \check{I}_{N+2} = \begin{pmatrix} 0 & & \\ 0 & I_N & 0 \\ & 0 & \end{pmatrix}.$$

La tabla 2.2 muestra las localizaciones en la malla de las aproximaciones generadas por  $D^{2D}\vec{v}$ , y las mismas coinciden con los centros de celda donde la función escalar  $f$  es evaluada y que se indican en la tabla 2.1, e ilustran en las figuras 2.1 y 2.2. En esta formulación que incluye las esquinas de la malla, el rango discreto de  $D^{2D}$  es el mismo que en la formulación convencional, debido a que la distribución de malla de  $\vec{v}$  coincide en ambas formulaciones. La fila 3 de la tabla 2.2 refleja esta coincidencia de los rangos discretos de  $D^{2D}$ .

Operador	Con Esquinas	Convencional
$G_x^{2D}\vec{f}$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_{cb}$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_c$
$G_y^{2D}\vec{f}$	$\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_n$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_n$
$D^{2D}\vec{v}$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c$

TABLA 2.2. Distribución del gradiente y divergencia mimético en la malla encajada 2D

## 2.2. Operador frontera bidimensional

En problemas de difusión definidos para un campo escalar  $f$ , el término  $(k\nabla f) \cdot \hat{n}$  permite cuantificar el flujo de dicho campo a través de las fronteras del medio, donde  $\hat{n}$  representa el vector unitario normal a la curva o superficie del borde. Ejemplos de estos problemas son aquellas aplicaciones físicas donde  $f$  corresponde a la temperatura en un material y  $-k\nabla f$  corresponde al vector de transferencia de calor, siendo  $k$  la conductividad térmica (ley de Fourier, ver [62] p. 256), o el caso donde  $f$  es la concentración de un soluto en una solución y  $-D\nabla f$  es el vector flujo difusivo, siendo  $D$  el coeficiente de difusividad (ley de Fick, ver [62] p. 260). Sin embargo, en otras aplicaciones definidas para un campo vectorial  $\mathbf{v}$  arbitrario, el operador frontera a ser formulado en esta sección permite aproximar la proyección  $\mathbf{v} \cdot \hat{n}$ . A continuación se omite la constante o vector de proporcionalidad  $k$  (también denotada  $D$  en nuestro ejemplo), pero la formulación sigue siendo aplicable a un vector flujo general del tipo  $(k\nabla f) \cdot \hat{n}$ .

La aproximación mimética de  $\nabla f \cdot \hat{n}$  está dada por las componentes de  $B^{2D}G^{2D}\vec{f}$  que coinciden con nodos frontera de acuerdo al ordenamiento impuesto en  $\vec{f}$ . Las componentes adicionales en  $B^{2D}G^{2D}\vec{f}$  corresponden a correcciones al Laplaciano  $D^{2D}G^{2D}$  en centros de celda cercanos a los bordes de la malla, tal como sucede en el caso unidimensional previamente presentado. El operador  $B^{2D}$  se deriva del equivalente bidimensional de la identidad mimética (1.3), ahora escrita en términos de los operadores  $G^{2D}$  y  $D^{2D}$ , y donde adicionalmente se toma  $Q^{2D} = hI$ . Es decir,  $Q^{2D}$  corresponde a la cuadratura del rectángulo en la malla 2D. Por otro lado, el producto tensorial también permite definir el operador cuadratura  $P^{2D}$  en la forma

$$(2.5) \quad P^{2D} = \begin{pmatrix} \check{I}_{M+2} \otimes P_x^{1D} & 0 \\ 0 & P_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \end{pmatrix}.$$

Sin embargo, a nivel computacional el operador  $B^{2D}$  puede construirse más eficientemente en base a productos tensoriales de los dos operadores frontera unidimensionales  $B_x^{1D}$  y  $B_y^{1D}$ , en ambas líneas coordenadas. El operador frontera resultante satisface igualmente la identidad mimética en 2D, como lo demuestra la siguiente proposición, y en cuya prueba se hace uso de las propiedades del producto Kronecker:

- (i)  $X \otimes (Y + Z) = X \otimes Y + X \otimes Z$ , si Y y Z son de iguales dimensiones
- (ii)  $(X + Y) \otimes Z = X \otimes Z + Y \otimes Z$ , si X y Y son de iguales dimensiones
- (iii)  $(X \otimes Y)(Z \otimes W) = XZ \otimes YW$
- (iv)  $(X \otimes Y)^T = X^T \otimes Y^T$

**PROPOSICIÓN 2.1.** *Si  $B^{2D}$  es el operador de frontera mimético  $D^{2D} + (G^{2D})^T P^{2D}$  donde  $G^{2D}$ ,  $D^{2D}$  y  $P^{2D}$  están dados por (2.1), (2.3) y (2.5) respectivamente, entonces*

$$(2.6) \quad B^{2D} = \begin{pmatrix} \check{I}_{M+2} \otimes B_x^{1D} & B_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \end{pmatrix}$$

**DEMOSTRACIÓN.** En primer lugar, al usar (iv) el producto  $(G^{2D})^T P^{2D}$  resulta

$$(G^{2D})^T P^{2D} = \left( (I_{M+2} \otimes (G_x^{1D})^T) \left( \check{I}_{M+2} \otimes P_x^{1D} \right) \quad \left( (G_y^{1D})^T \otimes I_{N+2} \right) \left( P_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \right) \right)$$

$$= \left( \check{I}_{M+2} \otimes (G_x^{1D})^T P_x^{1D} \quad (G_y^{1D})^T P_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \right)$$

después de emplear (iii). A continuación, se suma  $D^{2D}$  a ambos lados de la expresión anterior

$$D^{2D} + (G^{2D})^T P^{2D} = \left( \check{I}_{M+2} \otimes \bar{D}_x^{1D} + \check{I}_{M+2} \otimes (G_x^{1D})^T P_x^{1D} \quad \bar{D}_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} + (G_y^{1D})^T P_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \right)$$

$$= \left( \check{I}_{M+2} \otimes (\bar{D}_x^{1D} + (G_x^{1D})^T P_x^{1D}) \quad (\bar{D}_y^{1D} + (G_y^{1D})^T P_y^{1D}) \otimes \check{I}_{N+2} \right)$$

luego de hacer uso de las propiedades (i) y (ii). Finalmente, la definición unidimensional del operador frontera (1.3) permite reescribir la ecuación anterior como

$$B^{2D} = D^{2D} + (G^{2D})^T P^{2D} = \left( \check{I}_{M+2} \otimes B_x^{1D} \quad B_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \right)$$

□

### 2.3. Gradiente, divergencia y operador frontera tridimensionales

En esta sección se extienden los operadores miméticos gradiente, divergencia, y flujo en la frontera a mallas 3D rectangulares y centro distribuidas. La topología de la malla, la distribución discreta de las funciones  $f$  y  $\mathbf{v}$  objeto de la diferenciación numérica, y el ordenamiento de estos valores en vectores auxiliares  $\vec{f}$  y  $\vec{v}$ , son extensiones de los conceptos usados en 2D en la sección anterior. En este caso, consideraremos el cubo  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$  como el dominio de discretización. En la dirección  $x$ , se definen  $N$  celdas de igual tamaño, así mismo, se considera una partición de  $M$  celdas uniformes a lo largo de la dirección  $y$ , y de  $L$  celdas en la dirección  $z$ , para obtener los vectores  $\vec{X}_n, \vec{X}_c, \vec{X}_b, \vec{X}_{cb}, \vec{Y}_n, \vec{Y}_c, \vec{Y}_b, \vec{Y}_{cb}, \vec{Z}_n, \vec{Z}_c, \vec{Z}_b, \vec{Z}_{cb}$ , así como los operadores 1D de gradiente y divergencia  $G_x^{1D}, \bar{D}_x^{1D}, G_y^{1D}, \bar{D}_y^{1D}, G_z^{1D}, \bar{D}_z^{1D}$  acorde a las definiciones dadas en la sección 1.1.

La tabla reftab:field indica la distribución de las evaluaciones de la función escalar  $f$  y la función vectorial  $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$  en la malla encajada. Estas evaluaciones de  $f, v_x, v_y$ , y  $v_z$  conforman las componentes de los vectores  $\vec{f}, \vec{v}_x, \vec{v}_y$ , y  $\vec{v}_z$ , respectivamente, siguiendo el orden

preferente a  $x$ , seguido de  $y$ , y luego  $z$ , como se mencionó anteriormente. La distribución de valores de  $f$  en la malla 3D, puede escribirse como el producto cartesiano de las tres distribuciones 1D a lo largo de cada eje de coordenadas. Este producto tensorial incorpora las 4 esquinas en cada plano de la malla  $xy$  donde  $z$  es constante. Estas esquinas simplifican la construcción del operador gradiente 3D discreto, al tener la misma cantidad de valores en la malla para  $f$  en cada línea coordenada, tal como sucede en el caso bidimensional. En la revisión bibliográfica hecha a la fecha, no han sido reportadas aplicaciones miméticas tipo Castillo-Grone en tres dimensiones, es decir, las implementaciones y los casos de estudio publicados se limitan al mallado convencional 2D, el cual no considera los puntos esquinas y las evaluaciones de  $f$  en dichos nodos. Así, el término convencional en esta sección, se refiere a la extensión natural a 3D de la malla y operadores miméticos Castillo-Grone actualmente usados en 2D. Este mallado mimético convencional omite  $f$  en los nodos esquinas, que resultan de la intersección de al menos dos planos frontera  $xy$ ,  $xz$  o  $yz$  de la malla 3D rectangular. En la tabla 2.3 se comparan los puntos de malla para  $f$  en ambas formulaciones, y la convencional excluye un total de  $4(N + M + L + 2)$  nodos esquinas. En una malla densa, donde  $N$ ,  $M$  y  $L$  sean de  $O(10^2)$  o superior, esta cantidad extra de evaluaciones  $f$  es insignificante en comparación con el número total de nodos de  $f$  que es  $O[(N + 2) * (M + 2) * (L + 2)]$ . Omitiendo esta diferencia, las celdas o paralelepípedos de la malla en ambas formulaciones son los mismos. Las figuras 2.3 y 2.4 ilustran la generalización de tales celdas a partir de 1D a 2D, y luego a 3D, en el caso de una celda, ya sea interior, o una celda en la frontera de  $\Omega$ . En estas figuras también se muestra la distribución en la malla de las componentes del campo vectorial  $v = (v_x, v_y, v_z)^T$ . Cada una de estas componentes tiene un lugar distinto y coincidente con el punto central de un lado de la celda. La distribución de  $v_x$ ,  $v_y$  y  $v_z$  en la malla se indica en la tabla 2.3, y resulta semejante a la usada en la formulación convencional.



Campo	Con Esquinas	Convencional
$\vec{f}$	$\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_{cb} \times \vec{Z}_{cb}$	$[\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_{cb} - \vec{X}_b \times \vec{Y}_b] \times \vec{Z}_c \cup \vec{X}_c \times \vec{Y}_c \times \vec{Y}_b$
$\vec{v}_x$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_c$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_c$
$\vec{v}_y$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_n \times \vec{Z}_c$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_n \times \vec{Z}_c$
$\vec{v}_z$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_n$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_n$

TABLA 2.3. Distribución de los campos discretos  $\vec{f}$ ,  $\vec{v}_x$ ,  $\vec{v}_y$  and  $\vec{v}_z$  en la malla encajada 3D

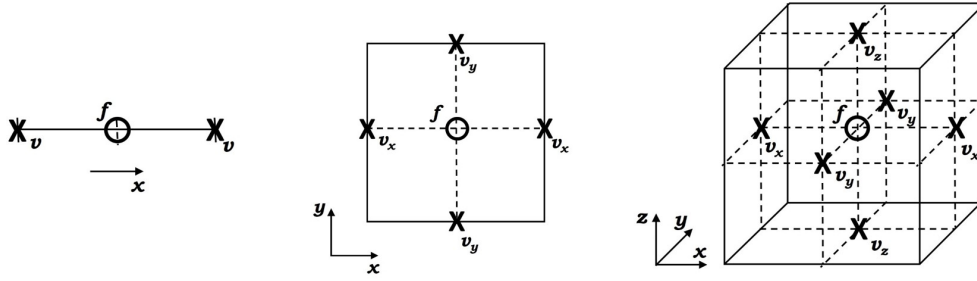


FIGURA 2.3. Celdas interiores de  $f$  y  $\mathbf{v}$  en mallas encajadas 1D, 2D y 3D

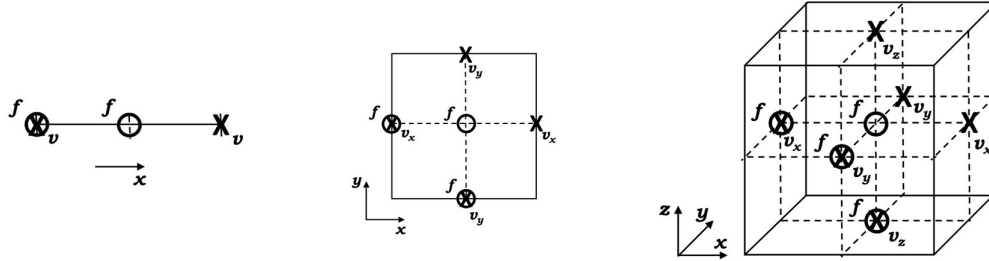


FIGURA 2.4. Celdas frontera, de  $f$  y  $\mathbf{v}$  en mallas encajadas 1D, 2D y 3D

La distribución de  $\vec{f}$  en la malla centro distribuida conduce a una formulación en bloques del gradiente mimético  $G^{3D}$  en función de sus tres componentes  $G_x^{3D}$ ,  $G_y^{3D}$  y  $G_z^{3D}$

$$(2.7) \quad G^{3D} = \begin{pmatrix} G_x^{3D} \\ G_y^{3D} \\ G_z^{3D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{L+2} \otimes I_{M+2} \otimes G_x^{1D} \\ I_{L+2} \otimes G_y^{1D} \otimes I_{N+2} \\ G_z^{1D} \otimes I_{M+2} \otimes I_{N+2} \end{pmatrix}$$

Al igual que en el caso 2D, el producto  $G_x^{3D} \vec{f}$  produce una aproximación a la primera componente del gradiente continuo  $\partial f / \partial x$  en el punto central de cada cara de celda con ubicación

nodal  $x = \text{constante}$ . Acorde a la tabla 2.3, la distribución de  $f$  en esta nueva formulación con esquinas hace que  $G_x^{3D} \vec{f}$  también genere aproximaciones en las caras frontera de la malla donde  $y = \text{constante}$  o  $z = \text{constante}$ . La tabla 2.4 indica los puntos de malla que sirven de imagen a  $G_x^{3D} \vec{f}$  y a la vez compara con las localizaciones de esta aproximación en una potencial formulación convencional. Las aproximaciones  $G_y^{3D} \vec{f}$  y  $G_z^{3D} \vec{f}$  de las restantes componentes del gradiente continuo son calculadas en los puntos de malla dados en la tabla 2.4 donde se comparan a la formulación convencional. La disponibilidad de todas estas aproximaciones a las componentes del gradiente en la frontera de la malla podría permitir una aproximación del operador  $k \nabla f$ , para un tensor completo  $k$ . Sin embargo, se requieren técnicas de interpolación dada la ubicación escalonada y no coincidente de estas componentes individuales, tal como se mencionó para el caso 2D, sección 2.1. La estructura matricial del operador gradiente en 3D se puede observar en la figura 2.5 para el caso  $N = M = L = 5$ , donde el patrón de esparcidad refleja el ordenamiento seguido en el vector  $\vec{f}$ .

Operador	Con Esquinas	Convencional
$G_x^{3D} \vec{f}$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_{cb} \times \vec{Z}_{cb}$	$\vec{X}_n \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_c$
$G_y^{3D} \vec{f}$	$\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_n \times \vec{Z}_{cb}$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_n \times \vec{Z}_c$
$G_z^{3D} \vec{f}$	$\vec{X}_{cb} \times \vec{Y}_{cb} \times \vec{Z}_n$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_n$
$D^{3D} \vec{v}$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_c$	$\vec{X}_c \times \vec{Y}_c \times \vec{Z}_c$

TABLA 2.4. Imagen en la malla de las aproximaciones gradiente y divergencia mimética

A continuación, se considera el nuevo vector discreto  $\vec{v}$  que contiene todas las evaluaciones en la malla de  $\vec{v}_x$ , seguido por  $\vec{v}_y$ , y finalmente  $\vec{v}_z$ , manteniendo el orden natural ya impuesto en esos vectores. Por lo tanto,  $\vec{v} = (\vec{v}_x, \vec{v}_y, \vec{v}_z)^T$ . La aproximación mimética a  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  se calcula en el punto central de cada una de las celdas en la malla mediante el producto  $D^{3D} \vec{v}$ , donde  $D^{3D}$  es el operador divergencia 3D definido en la forma

$$(2.8) \quad D^{3D} = \left( \check{I}_{L+2} \otimes \check{I}_{M+2} \otimes \bar{D}_x^{1D} \quad \check{I}_{L+2} \otimes \bar{D}_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \quad \bar{D}_z^{1D} \otimes \check{I}_{M+2} \otimes \check{I}_{N+2} \right).$$

La matriz  $\check{I}$  está definida en la ecuación (2.4). En la tabla 2.4 se indican los puntos imágenes en la malla de la aproximación  $D^{3D} \vec{v}$  y que serían similares a los definidos en la formulación convencional. Estas localizaciones coinciden con los puntos interiores en la malla para la

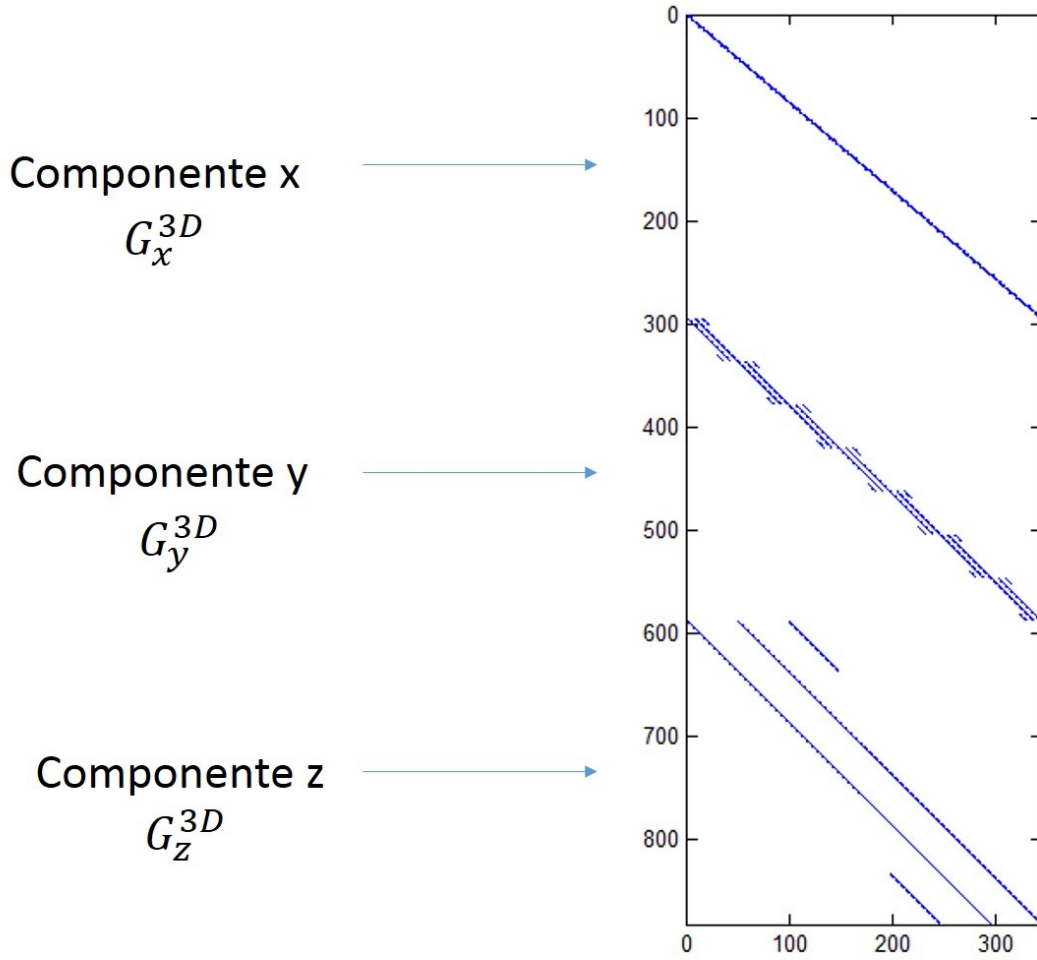


FIGURA 2.5. Estructura matricial del operador Gradiente  $G^{3D}$

función escalar  $f$  mostrada en las figuras 2.3 y 2.4. La estructura matricial del operador divergencia se ilustra en la figura 2.6.

La aproximación mimética para la proyección  $\nabla f \cdot \hat{n}$  está dada por  $B^{3D} G^{3D} \vec{f}$ , donde  $\hat{n}$  es el vector normal a la superficie en un plano frontera de la malla y el operador  $B^{3D}$  se puede construir mediante

$$(2.9) \quad B^{3D} = \begin{pmatrix} \check{I}_{L+2} \otimes \check{I}_{M+2} \otimes B_x^{1D} & \check{I}_{L+2} \otimes B_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} & B_z^{1D} \otimes \check{I}_{M+2} \otimes \check{I}_{N+2} \end{pmatrix}.$$

Esta expresión sencilla del operador  $B^{3D}$ , en términos de productos tensoriales de las versiones unidimensionales de  $B$  en cada dirección coordenada, también satisface la identidad

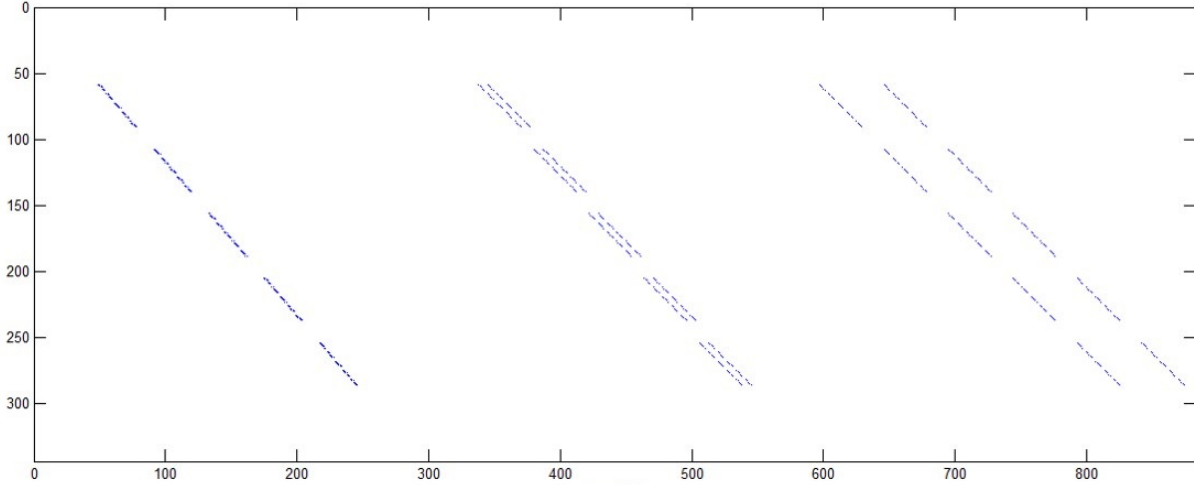
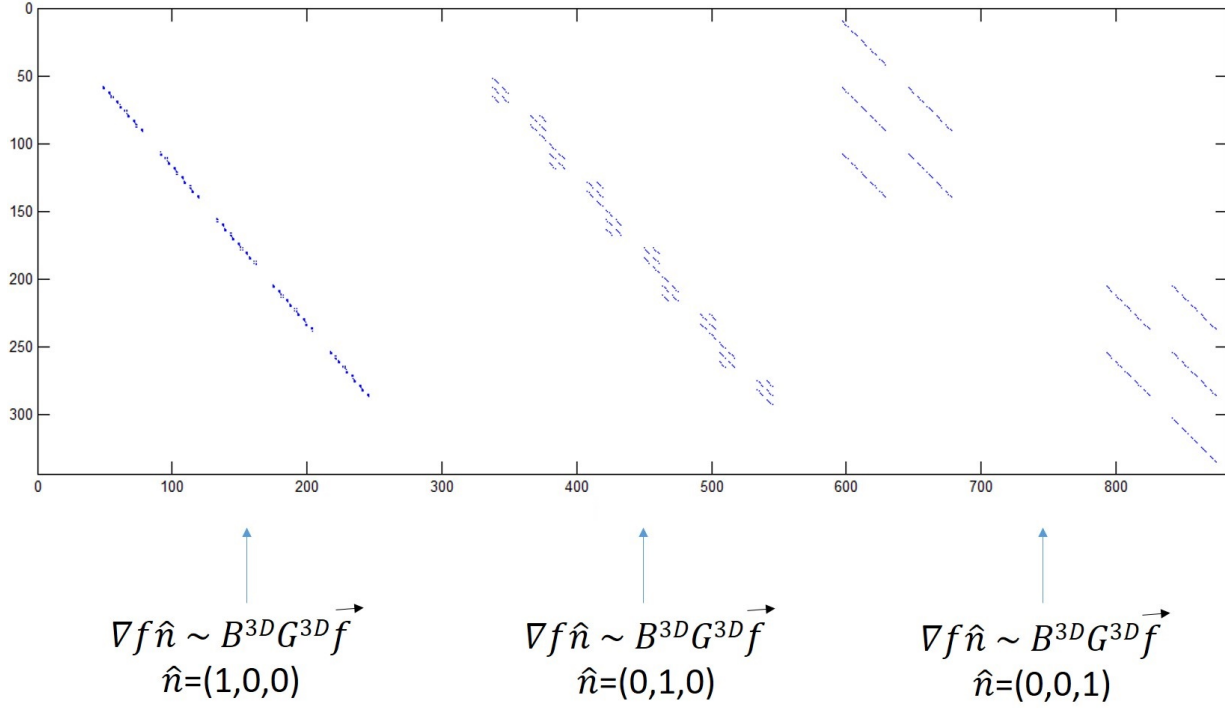


FIGURA 2.6. Estructura matricial del operador Divergencia  $D^{3D}$

mimética  $B^{3D} = D^{3D} + (G^{3D})^T P^{3D}$  asumiendo segundo orden de precisión. Note que el operador cuadratura  $Q^{3D}$  coincide con la integración del rectángulo, y que en términos algebraicos se reduce a la matriz identidad, pesada por  $h$ . Por otro lado, el operador cuadratura  $P^{3D}$  estaría dado como una extensión a 3D de su definición bidimensional (2.6). La prueba de que el operador frontera  $B^{3D}$  dado por (2.9) es realmente mimético, es una simple extensión de la proposición (2.1), y por lo tanto se omite en este documento. La estructura matricial de este operador frontera se muestra en la figura 2.7. En esta figura, se denotan los vectores unitarios y normales a cada una de las fronteras planas de la malla con signos  $\pm$  en la dirección de cada vector unitario.

#### 2.4. Extensión a mallas 3D con espaciamento no uniforme

La definición tensorial de los operadores  $G_x^{3D}$ ,  $G_y^{3D}$  y  $G_z^{3D}$  se puede adaptar al caso de mallas rectangulares y que presenten espaciado no uniformes en cada línea coordenada, de manera muy sencilla y siguiendo la formulación unidimensional de la sección 1.2. En este tipo de malla, el refinamiento local podría permitir la resolución numérica eficiente de altos gradientes propios de la solución deseada, si los mismos están muy concentrados en algunas regiones del dominio del problema. En el capítulo 4 se presentan resultados numéricos para este tipo de problemas y se muestra la contribución del refinamiento local de malla.

FIGURA 2.7. Estructura matricial del operador frontera  $B^{3D}$ 

La distribución de los campos discretos  $\vec{f}$ ,  $\vec{v}_x$ ,  $\vec{v}_y$  y  $\vec{v}_z$  en este tipo de malla 3D no uniforme es lógicamente la misma a la descrita anteriormente en el caso uniforme. A lo largo de cada línea coordenada en la malla no uniforme, las localizaciones del campo discreto  $\vec{f}$  permiten calcular (o aproximar) las matrices jacobianas  $J_{G_x}$ ,  $J_{G_y}$  y  $J_{G_z}$ . Cada una de estas matrices está asociada a la transformación unidimensional del espaciamiento uniforme al no uniforme, en cada línea coordenada de la malla 3D. De esta manera, la formulación no uniforme del gradiente 3D corresponde a

$$(2.10) \quad \tilde{G}^{3D} = \begin{pmatrix} \tilde{G}_x^{3D} \\ \tilde{G}_y^{3D} \\ \tilde{G}_z^{3D} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{L+2} \otimes I_{M+2} \otimes \tilde{G}_x^{1D} \\ I_{L+2} \otimes \tilde{G}_y^{1D} \otimes I_{N+2} \\ \tilde{G}_z^{1D} \otimes I_{M+2} \otimes I_{N+2} \end{pmatrix},$$

donde,  $\tilde{G}_x^{1D} = J_{G_x}^{-1} G_x^{1D}$ ,  $\tilde{G}_y^{1D} = J_{G_y}^{-1} G_y^{1D}$  y  $\tilde{G}_z^{1D} = J_{G_z}^{-1} G_z^{1D}$ . Note que (2.10) es una simple aplicación de la formulación no uniforme 1D Batista-Castillo de la sección 1.2.

De manera semejante, las localizaciones en la malla de las componentes discretas de  $\vec{v} = (\vec{v}_x, \vec{v}_y, \vec{v}_z)$ , permiten la aproximación de los jacobianos unidireccionales  $J_{D_x}$ ,  $J_{D_y}$  y  $J_{D_z}$ .

La aproximación mimética a  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  puede calcularse en los puntos centrales de cada celda de la malla por el producto  $\tilde{D}^{3D} \vec{v}$ , donde  $\tilde{D}^{3D}$  es el operador divergencia en 3D dado por

$$(2.11) \quad \tilde{D}^{3D} = \left( \check{I}_{L+2} \otimes \check{I}_{M+2} \otimes \check{D}_x^{1D} \quad \check{I}_{L+2} \otimes \check{D}_y^{1D} \otimes \check{I}_{N+2} \quad \check{D}_z^{1D} \otimes \check{I}_{M+2} \otimes \check{I}_{N+2} \right),$$

donde,  $\check{D}_x^{1D} = J_{D_x}^{-1} D_x^{1D}$ ,  $\check{D}_y^{1D} = J_{D_y}^{-1} D_y^{1D}$  y  $\check{D}_z^{1D} = J_{D_z}^{-1} D_z^{1D}$ .

Por otro lado, el operador frontera permanece invariante ante el refinamiento de malla, siempre que esta resulte rectangular. Así, la formulación tensorial (2.9) es válida también en este tipo de mallas no uniformes.

## Discretización de ecuaciones elípticas del tipo $\nabla \cdot (k \nabla f) + \omega f = F$

En este capítulo, los operadores miméticos presentados anteriormente se van a utilizar en la discretización de un tipo general de ecuaciones elípticas en tres y dos dimensiones. En el caso tridimensional, se discute formalmente la consistencia y estabilidad de este nuevo método mimético para unos casos particulares de los parámetros  $k$  y  $\omega$ . Dado lo novedoso y general de estos análisis en 3D, la formulación del método bidimensional se presenta posteriormente, pero se considera el caso general de un tensor  $k$  simétrico y no diagonal. En este caso, sencillas estrategias de interpolación de las componentes del vector  $\nabla \cdot (k \nabla f)$  en la malla centro distribuida son también discutidas.

### 3.1. Un método mimético tridimensional

En la formulación de este nuevo método se considera la siguiente forma general de una ecuación elíptica de segundo orden en  $\Omega \in \mathbb{R}^3$

$$(3.1) \quad -\nabla \cdot (k(x, y, z) \nabla f) + \omega(x, y, z) f = F(x, y, z) \quad (x, y, z) \in \Omega,$$

bajo la siguiente condición de borde tipo Robin

$$(3.2) \quad a f + \gamma (k(x, y, z) \nabla f) \cdot \hat{n} = \varphi(x, y, z) \quad (x, y, z) \in \partial\Omega.$$

En estas ecuaciones,  $k$ ,  $\omega$ ,  $F$  y  $\varphi$  son funciones escalares conocidas al igual que los coeficientes  $a$  y  $\gamma$ , mientras que  $f$  es la solución desconocida de este problema de valor de frontera, la cual también se asume como una función escalar. Adicionalmente, se considera que el dominio  $\Omega$  es un cubo cartesiano, y  $\hat{n}$  es el vector unitario normal al exterior de la frontera,  $\partial\Omega$ . La discretización mimética de este problema consiste en sustituir los operadores diferenciales continuos por sus aproximaciones miméticas en forma directa. En el caso de la ecuación (3.1) su discretización mimética es

$$(3.3) \quad (-D^{3D} K G^{3D} + W) \vec{f} = \vec{F},$$



donde  $\vec{f}$  es la aproximación mimética a la solución  $f$ ,  $\vec{F}$  es la proyección de la función  $F$  en los centros de bloque,  $K$  es una matriz diagonal cuyas componentes son los valores de la función  $k$  en las caras (puntos de discretización del gradiente) de los bloques correspondientes a la discretización del cubo  $\Omega$ , y  $W$  es una matriz diagonal cuyas entradas son los valores de la función  $\omega$  en los centros de los bloques. La ecuación (3.3) contiene filas de ceros asociados a los puntos sobre las caras externas de los bloques de la malla que discretizan la frontera  $\partial\Omega$  del cubo. Entre estos puntos, se encuentran los nodos esquinas que son requeridos por la definición de productos tensoriales, pero que al igual que el resto de los nodos frontera, no contribuyen en la aproximación del Laplaciano (corregido por  $W$ ) y dado por esta ecuación. La principal ventaja de (3.3) es que evita la numeración explícita de una malla tridimensional y los centros de bloques tienen automáticamente un orden lexicográfico. De manera similar, la discretización mimética de la condición de frontera (3.2) está dada por

$$(3.4) \quad (A + \Gamma B^{3D} K G^{3D}) \vec{f} = \vec{\varphi},$$

donde  $A$  y  $\Gamma$  son matrices diagonales con los valores de  $a$  y  $\gamma$  en las caras exteriores de los bloques en la frontera  $\partial\Omega$ , y el vector  $\vec{\varphi}$  es la proyección de  $\varphi$  en la malla encajada. Las discretizaciones miméticas (3.3) y (3.4) se pueden combinar por el principio de superposición en una sola ecuación

$$(3.5) \quad (-D^{3D} K G^{3D} + W + A + \Gamma B^{3D} K G^{3D}) \vec{f} = \vec{F} + \vec{\varphi}.$$

Esta ecuación puede reescribirse en forma concisa como

$$(3.6) \quad \phi \vec{f} = \vec{F} + \vec{\varphi}$$

siendo  $\phi = -D^{3D} K G^{3D} + W + A + \Gamma B^{3D} K G^{3D}$ , la matriz asociada al sistema de ecuaciones lineales dado por (3.5). Cabe destacar que al construir  $\phi$ , las filas nulas en  $-D^{3D} K G^{3D}$  fueron sustituidos por la discretización mimética de las condiciones de borde dada por (3.4). En este proceso, se impone como vector normal  $\hat{n}_y^\pm = (0, \pm 1, 0)^T$  sobre un punto esquina, si el mismo pertenece a un plano frontera de malla con  $y = \text{constante}$ . En caso contrario, el punto esquina pertenece a un plano frontera de malla donde  $z = \text{constante}$ , se impone  $\hat{n}_z^\pm = (0, 0, \pm 1)^T$  al aplicar la condición tipo Robin. Estas consideraciones sobre los vectores normales en puntos esquinas sólo obedece a la simplicidad de esta formulacion inicial, pero

la misma puede generalizarse con otras expresiones de estos vectores, a través de los cambios apropiados en las matrices  $B_x^{1D}$ ,  $B_y^{1D}$ , y  $B_z^{1D}$  en (2.9). La estructura matricial de  $\phi$  se muestra en la figura 3.1 para un caso  $N = M = L = 5$ . Esta matriz  $\phi$  no es simétrica, al comparar componente a componente, pero su patrón de esparcidad sí es simétrico. La no singularidad de  $\phi$  se estudia en la sección 3.3.

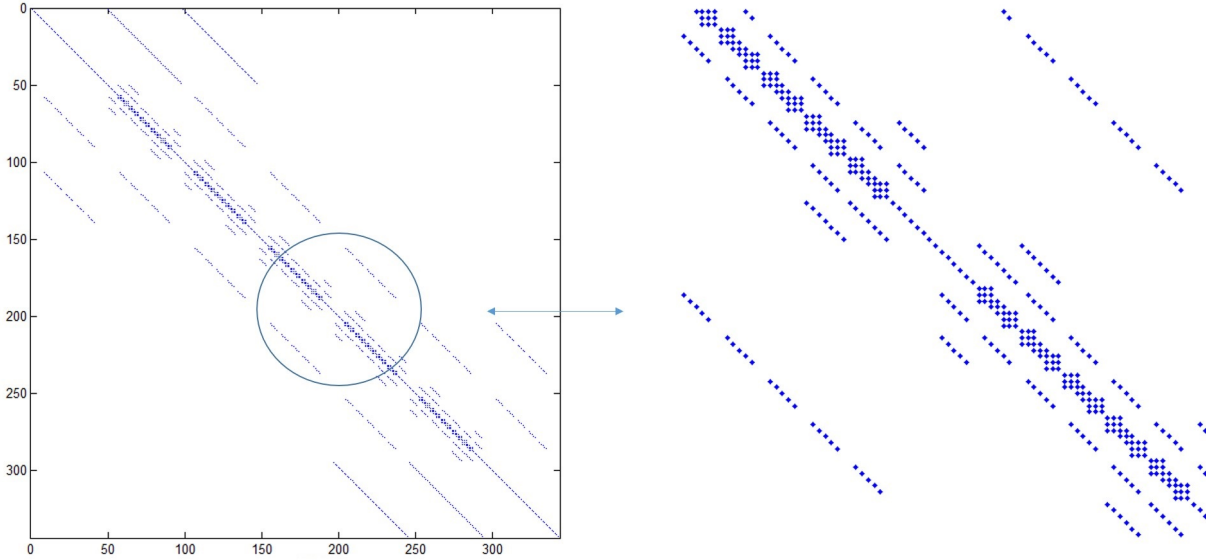


FIGURA 3.1. Estructura matricial de  $\phi$

### 3.2. Análisis de consistencia: Error local de truncamiento

La formulación del método mimético (3.5) en términos de los operadores 3D es muy compacta y las ecuaciones en diferencias finitas que lo conforman siguen automáticamente el ordenamiento natural (lexicográfico) impuesto por los productos tensoriales en el vector  $\vec{f}$ . Sin embargo, una descripción explícita de las ecuaciones definidas por (3.5) es importante para los análisis de consistencia. A la luz de las aproximaciones miméticas 1D dadas por (1.11), se puede esperar que las fórmulas laplacianas 3D no convencionales en el caso de (3.5) y que resultan diferentes al estencil estándar en DF de siete puntos, presenten un error de truncamiento de primer orden. Dado que este nuevo esquema mimético está basado en aproximaciones de segundo orden, las únicas aproximaciones no estándar al Laplaciano son las asociadas a los bloques frontera de la malla, y a sus bloques contiguos. En otras palabras, las ecuaciones laplacianas correspondientes a los bloques interiores de la malla, que distan

dos bloques de un plano frontera, tienen una plantilla estándar de siete puntos. Tomando en cuenta esta observación, una malla donde  $N = M = L = 5$  presenta el mínimo de celdas necesarias para exhibir todas las posibles plantillas del nuevo esquema. La figura 3.2 muestra una malla 3D uniforme con estas dimensiones, y donde se ilustran tres planos de la misma con discretizaciones no estándar del Laplaciano asociadas a centros de celda denotados con las letras  $a, b, c, d, e, f$ . La proximidad de estos tres planos de malla a la frontera  $z = 0$ , genera las plantillas no estándar mostradas en la figura 3.3 dado que los puntos  $a, b, c, d, e$  son también vecinos a los bordes  $x = y = 0$ . Se omiten la ilustración y análisis de otras configuraciones no estándar de Laplacianos miméticos en la vecindad de las otras fronteras de la malla.

Por simetría, sólo hay seis plantillas no estándar y estructuralmente diferentes en el nuevo esquema mimético 3D, y sus gráficas se muestran en la figura 3.3. Estas plantillas son topológicamente singulares porque contienen al menos una rama con un nodo en la frontera  $\partial\Omega$ . En estas gráficas, el punto de malla  $(i, j, k)$  representa un centro de bloque, por lo que no interviene en la discretización de la condición de borde (3.2). Se utilizan tuplas de índices enteros para identificar estos puntos centrales de una plantilla, así que cualquier nodo borde tendrá entre sus índices una fracción múltiplo de  $\frac{1}{2}$ . Se define como singular a una rama que tiene cuatro nodos, uno de ellos es un nodo borde, y los nodos adicionales son centros de bloques contiguos. Dado que las ecuaciones de (3.5) pueden ser complejas para el caso general de coeficientes variables  $k, \gamma$ , y  $a$ , se asume que los mismos son constantes e iguales a uno, y además la malla es uniforme con un paso común  $h$  en las tres direcciones. Estas simplificaciones nos permiten presentar las ecuaciones discretas no convencionales en (3.5) con un mínimo de notación y manteniendo sus características no estándar, pero no representan una limitación en la implementación del esquema.

En la figura 3.3, plantilla (a) se presenta sólo una rama singular y su ecuación toma la siguiente expresión

$$(3.7) \quad -\left(\frac{1}{3h}\right)\vec{f}_{(i,j-3/2,k)} - \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)\vec{f}_{(i,j-1,k)} + \left(\frac{6}{h^2} - \frac{1}{6h} + \omega_{(i,j,k)}\right)\vec{f}_{(i,j,k)} \\ - \left(\frac{1}{h^2}\right)(\vec{f}_{(i+1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j+1,k)} + \vec{f}_{(i,j,k+1)} + \vec{f}_{(i-1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j,k-1)}) = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{\varphi}_{(i,j,k)}.$$

Esta aproximación corresponde a un centro de un bloque que es vecino a sólo un bloque frontera. En el caso de la plantilla (b), la aproximación al Laplaciano tiene dos ramas singulares,

y su ecuación es

$$(3.8) \quad -\left(\frac{1}{3h}\right)(\vec{f}_{(i,j-3/2,k)} + \vec{f}_{(i,j,k-3/2)}) - \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)(\vec{f}_{(i,j,k-1)} + \vec{f}_{(i,j-1,k)}) \\ + \left(\frac{6}{h^2} - \frac{1}{3h} + \omega_{(i,j,k)}\right)\vec{f}_{(i,j,k)} - \left(\frac{1}{h^2}\right)(\vec{f}_{(i+1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j+1,k)} + \vec{f}_{(i,j,k+1)} + \vec{f}_{(i-1,j,k)}) = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{\varphi}_{(i,j,k)}$$

La misma está asociada a un centro de bloque, que es simultáneamente vecino a sólo dos bloques frontera. Ahora, la plantilla (c) es la más compleja de las seis plantillas no estándar de la figura 3.3, tiene tres ramas singulares, y su ecuación toma la forma siguiente

$$(3.9) \quad -\left(\frac{1}{3h}\right)(\vec{f}_{(i,j-3/2,k)} + \vec{f}_{(i-3/2,j,k)} + \vec{f}_{(i,j,k-3/2)}) - \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)(\vec{f}_{(i,j,k-1)} + \vec{f}_{(i,j-1,k)} + \vec{f}_{(i-1,j,k)}) \\ + \left(\frac{6}{h^2} - \frac{1}{2h} + \omega_{(i,j,k)}\right)\vec{f}_{(i,j,k)} - \left(\frac{1}{h^2}\right)(\vec{f}_{(i+1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j+1,k)} + \vec{f}_{(i,j,k+1)}) = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{\varphi}_{(i,j,k)}$$

Este tipo de discretizaciones está asociada al centro de un bloque que es al mismo tiempo vecino a tres bloques con caras en la frontera de la malla.

Estos bloques son los que se encuentran cerca de las ocho esquinas del paralelepípedo de la malla. Todas estas plantillas 3D en (3.7), (3.8) y (3.9) resultan de una combinación lineal de la DF centrada estándar  $h^{-2}[1, -2, 1]$ , y la plantilla mimética 1D colocada en la tercera fila de (1.11) con un error de truncamiento de primer orden dado por (1.12). Por lo tanto, la precisión de las aproximaciones laplacianas en (3.7), (3.8), y (3.9) es sólo de primer orden, pero podría mejorar al segundo orden en el caso de funciones armónicas.

Las tres plantillas adicionales en la figura 3.3, representan discretizaciones no estándar en los centros de bloques que tienen al menos una de sus caras en la frontera de la malla. La plantilla (d) tiene una rama singular y su ecuación es

$$(3.10) \quad -\left(\frac{1}{3h}\right)\vec{f}_{(i-3/2,j,k)} - \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)\vec{f}_{(i-1,j,k)} + \left(\frac{10}{h^2} - \frac{7}{6h} + \omega_{(i,j,k)}\right)\vec{f}_{(i,j,k)} - \left(\frac{1}{h^2}\right)\vec{f}_{(i+1,j,k)} \\ - \left(\frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h}\right)(\vec{f}_{(i,j+1,k)} + \vec{f}_{(i,j,k+1)}) - \left(\frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h}\right)(\vec{f}_{(i,j-1/2,k)} + \vec{f}_{(i,j,k-1/2)}) = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{\varphi}_{(i,j,k)}$$

Esta aproximación se asocia al centro de un bloque que únicamente tiene dos caras en la frontera. Por otro lado, la plantilla (e) contiene dos ramas singulares y su ecuación

$$(3.11) \quad -\left(\frac{1}{3h}\right)(\vec{f}_{(i-3/2,j,k)} + \vec{f}_{(i,j-3/2,k)}) - \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)(\vec{f}_{(i,j-1,k)} + \vec{f}_{(i-1,j,k)}) + \left(\frac{8}{h^2} - \frac{5}{6h} + \omega_{(i,j,k)}\right)\vec{f}_{(i,j,k)} \\ - \left(\frac{1}{h^2}\right)(\vec{f}_{(i+1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j+1,k)}) - \left(\frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h}\right)\vec{f}_{(i,j,k+1)} - \left(\frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h}\right)\vec{f}_{(i,j,k-1/2)} = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{\varphi}_{(i,j,k)}$$

representa una aproximación asociada con un bloque con sólo una cara en la frontera de la malla. El bloque en esa cara borde pertenece a la rama corta representada en el gráfico de la plantilla, y las otras ramas son singulares con nodos terminales en las caras borde. Las tres caras borde alcanzadas por esta plantilla son ortogonales y conforman una esquina del paralelepípedo de la malla.

Finalmente, la plantilla (f) se asocia a los bloques de frontera con una sólo cara en la frontera y una rama singular. Se ecuación es dada por

$$(3.12) \quad -\left(\frac{1}{3h}\right)\vec{f}_{(i,j-3/2,k)} - \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)\vec{f}_{(i,j-1,k)} + \left(\frac{8}{h^2} - \frac{2}{3h} + \omega_{(i,j,k)}\right)\vec{f}_{(i,j,k)} - \left(\frac{1}{h^2}\right)(\vec{f}_{(i-1,j,k)} + \vec{f}_{(i+1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j+1,k)}) - \left(\frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h}\right)\vec{f}_{(i,j,k+1)} - \left(\frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h}\right)\vec{f}_{(i,j,k-1/2)} = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{\varphi}_{(i,j,k)}$$

La configuración de los estéciles tridimensionales anteriores en (3.10), (3.11) y (3.12) combinan las DF centrales  $h^{-2}[1, -2, 1]$  y los estéciles miméticos 1D de primer orden dados por la segunda y la tercera filas de (1.11). Como resultado, el error local de truncamiento de estas aproximaciones laplacianas 3D es formalmente de orden  $O(h)$ . Todos los otros estéciles en el nuevo esquema mimético tienen siete puntos y presentan errores de truncamiento de segundo orden en el interior de la malla. Dado que el nuevo esquema se desarrolla sobre una malla cartesiana, las ecuaciones que discretizan las condiciones de borde son idénticas a las descritas en esquemas miméticos unidimensionales y producen errores de truncamiento de segundo orden (ver [11] y [24]).

El análisis de consistencia anterior revela que las aproximaciones laplacianas discretas miméticas son de primer orden en la vecindad de los bordes de la malla. Sin embargo, la convergencia empírica global podría ser más alta en muchas pruebas numéricas y estar dominada principalmente por la precisión del segundo orden interior. Los resultados de los experimentos computacionales discutidos en el capítulo 4 son evidencia de que el nuevo esquema mimético produce realmente tasas óptimas de convergencia de segundo orden, siempre que la solución exacta al problema sea lo suficientemente suave. Un refinamiento apropiado de la malla cartesiana también podría ser necesario para garantizar una convergencia cuadrática de este esquema.

### 3.3. Estabilidad del método mimético: Autovalores y no singularidad

El análisis de consistencia anterior permite establecer la siguiente relación entre la solución exacta  $\vec{f}^e$  al problema (3.1) evaluada en la misma malla encajada de su aproximación

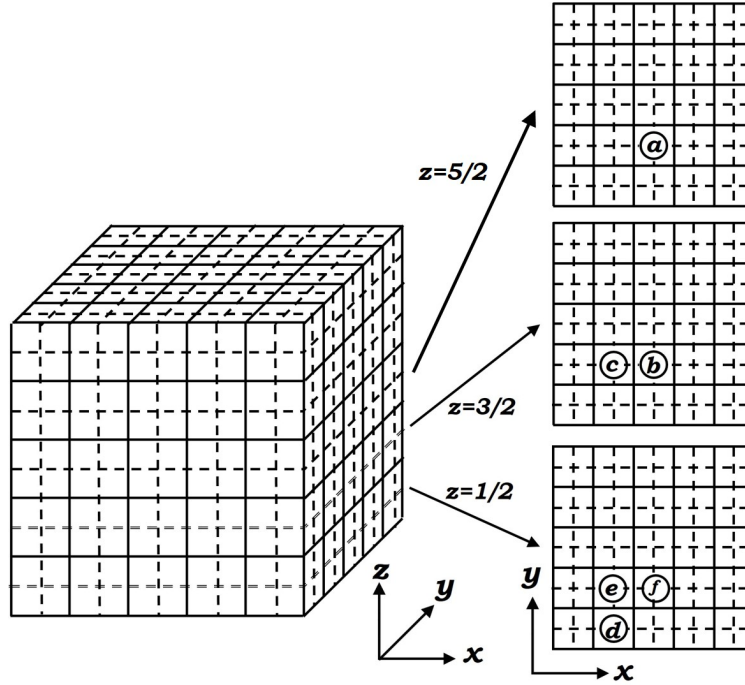


FIGURA 3.2. Planos de la malla 3D con plantillas laplacianas no estándar en la vecindad de la frontera  $z = 0$

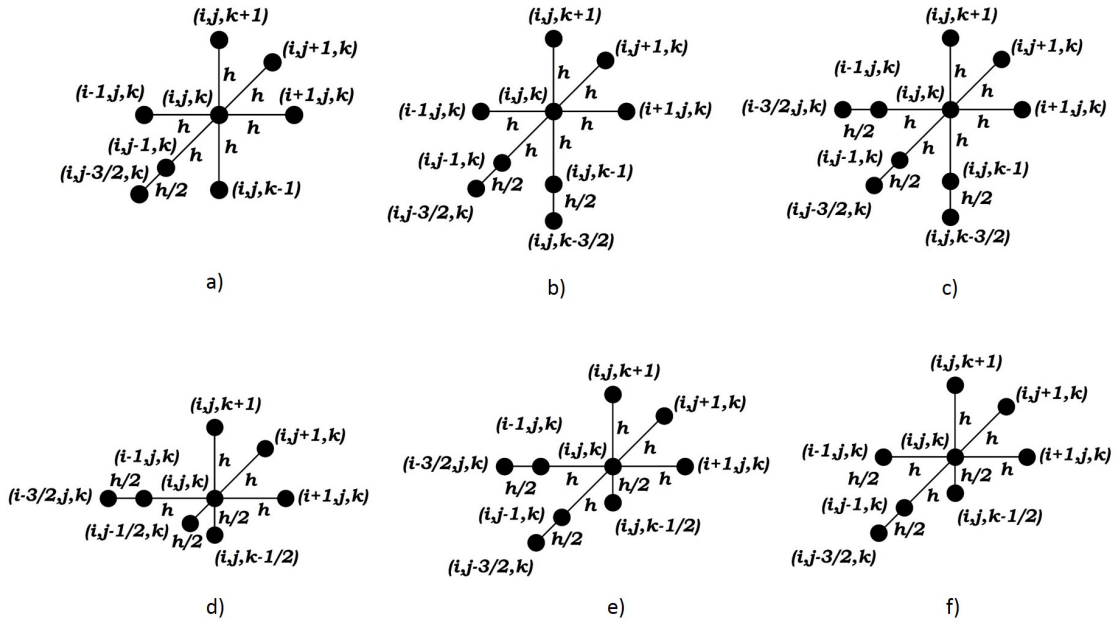


FIGURA 3.3. Plantillas laplacianas no estándar para el esquema mimético en la vecindad de la frontera  $z = 0$

$\vec{f}^h$  y el vector de errores locales de truncamiento  $\vec{\tau}^h$ ,

$$(3.13) \quad \phi^h \vec{f}^e = \vec{F} + \vec{\varphi} + \vec{\tau}^h.$$

El supraíndice  $h$  denota la dependencia de la matriz y el error local de truncamiento en el paso espacial, y donde  $\|\vec{\tau}^h\| = O(h)$ . Al hacer la diferencia entre (3.13) y la ecuación (3.6) que define el método mimético se tiene

$$(3.14) \quad \phi^h E^h = \vec{\tau}^h$$

donde la norma del error  $E^h = \vec{f}^e - \vec{f}$ , puede acotarse en términos de la inversa de la matriz  $\phi^h$ , esto es,  $\|E^h\| \leq \|(\phi^h)^{-1}\| \|\vec{\tau}^h\|$ . Por consistencia, se tiene que  $\|\vec{\tau}^h\| \rightarrow 0$  si  $h \rightarrow 0$ , así que la convergencia del método dependerá de que  $\|(\phi^h)^{-1}\|$  permanece acotada ante el refinamiento de malla. Esta es precisamente la definición de estabilidad relevante en este análisis,  $\|(\phi^h)^{-1}\| \leq C$  para  $h \rightarrow 0$ .

**DEFINICIÓN 3.1.** [38] Supóngase que un método de diferencias finitas con Problemas de Valor en la Frontera (PVF) lineal, da una secuencia de ecuaciones matriciales de la forma  $A^h \vec{f}^h = \vec{F}^h$ , donde  $A^h$  es la matriz del sistema,  $\vec{f}^h$  es el vector solución y  $\vec{F}^h$  es el lado derecho de dichas ecuaciones expresadas en función de un ancho de malla  $h$ . Se dice que el método es estable si existe  $(A^h)^{-1}$  y una constante  $C$  independiente de  $h$ , para todo  $h$  suficientemente pequeño ( $h < h_0$ ), tal que  $\|(A^h)^{-1}\| \leq C$  para todo  $h < h_0$ .

Es claro que en el caso de una matriz simétrica  $\phi_s$ ,  $\|\phi_s^{-1}\|_2 = |\lambda_{(\phi_s)}^{min}|$ , donde  $\lambda^{min}$  corresponde al autovalor de magnitud mínima. Sin embargo, bajo condiciones de borde tipo Robin, la matriz  $\phi^h$  es no simétrica, pero acotar su autovalor de mínima magnitud permite garantizar su no singularidad. Precisamente, esto es el objeto de estudio de esta sección bajo ciertas hipótesis sobre los coeficientes  $k$ ,  $\omega$ ,  $a$ , y  $\gamma$ .

Mediante la aplicación de la fórmula discreta de integración por partes (1.2) extendida a nuestra formulación 3D, se prueba que los autovalores asociados a la matriz del sistema en (3.5) son reales y positivos. La matriz  $\Phi$  para el caso de parámetros constantes y positivos  $k$ ,  $\omega$ ,  $a$ , y  $\gamma$ , se puede escribir como

$$(3.15) \quad \Phi = -D^{3D}G^{3D} + \Lambda + B^{3D}G^{3D}.$$



La matriz  $\Lambda$  es diagonal con elementos que siguen el mismo orden lexicográfico como el campo  $\vec{f}$  y está definido por

$$(3.16) \quad \Lambda_{ss} = \begin{cases} \frac{\omega}{k}, & \text{en cualquier centro de celda} \\ \frac{a}{\gamma k}, & \text{en cualquier punto de borde.} \end{cases}$$

En particular, el término  $\frac{a}{\gamma k}$  resulta de dividir la condición de borde (3.2) por  $\gamma k$ .

A continuación, en aras de la simplicidad en la notación, se omite el exponente que indica la dimensión espacial en los operadores de diferenciación mimética y de cuadratura en (3.15), y además en la generalización 3D de (1.2).

**PROPOSICIÓN 3.2.** *Los autovalores de la matriz en (3.15) son reales y positivos.*

**DEMOSTRACIÓN.** En el caso de un vector complejo no nulo  $\vec{f}$ , donde  $\vec{v} = G\vec{f}$ , el análogo tridimensional de (1.2) equivale a la identidad

$$(3.17) \quad \vec{f}^* Q D G \vec{f} + G \vec{f}^* P G \vec{f} = \vec{f}^* B G \vec{f}.$$

Aquí, sólo se considera la discretización de segundo orden, donde  $Q = hI$ . Así, (3.17) es equivalente a

$$(3.18) \quad \vec{f}^* (-DG + BG) \vec{f} = \vec{v}^* P \vec{v},$$

donde el lado derecho es siempre no negativo dado que la matriz de pesos diagonales  $P$  es positiva definida. Dado que este resultado (3.18) es válido para cualquier vector  $\vec{f}$ , siendo  $\vec{v} = G\vec{f}$ , se toma el caso particular donde  $\vec{f}$  corresponde a un autovector de la matriz  $\Phi$ , siendo  $\lambda$  su autovalor asociado. El cociente de Rayleigh para este par resulta

$$(3.19) \quad \begin{aligned} \lambda &= \frac{\vec{f}^* \Phi \vec{f}}{\vec{f}^* \vec{f}} \\ &= \frac{\vec{f}^* (-DG + BG + \Lambda) \vec{f}}{\vec{f}^* \vec{f}} \\ &= \frac{\vec{v}^* P \vec{v} + \vec{f}^* \Lambda \vec{f}}{\|\vec{f}\|_2^2} \end{aligned}$$

En consecuencia,  $\lambda$  es un valor real y positivo dado que la matriz  $\Lambda$  también es diagonal y con componentes mayores que cero.  $\square$

La proposición (3.2) demuestra la no singularidad de la matriz del sistema  $\Phi$  para el caso de condiciones de borde generales tipo Robin (3.2) y acopladas al problema del modelo elíptico (3.1). En realidad, la prueba anterior se extiende fácilmente al caso de coeficientes positivos y espacialmente variables  $k$ ,  $\omega$ ,  $a$  y  $\gamma$ . Además, una simple aplicación del teorema de Gershgorin [15] permite establecer cotas inferiores para los autovalores de la matriz  $\Phi$ . En el siguiente resultado, se consideran las restricciones adicionales de  $k = a = \gamma = 1$ , las cuales fueron previamente impuestas a las versiones simplificadas de los estenciles Laplacianos miméticos (3.7) - (3.12).

**PROPOSICIÓN 3.3.** *Cualquier autovalor  $\lambda$  de la matriz  $\Phi$  en (3.15) satisface  $\omega \leq \lambda \leq \omega + O(h^{-2})$ .*

**DEMOSTRACIÓN.** Esta prueba es una aplicación directa de la cota dada para los autovalores por los círculos de Gershgorin, en cada uno de los casos (3.7) - (3.12). Primero se considera un estencil interior del sistema (3.5) y que corresponde a la aplicación laplaciana de diferencias finitas estándar de siete puntos, suficientemente alejada de la contribución mimética de  $B$  en (3.5)

$$-h^{-2} \left( \vec{f}_{(i+1,j,k)} + \vec{f}_{(i-1,j,k)} + \vec{f}_{(i,j-1,k)} + \vec{f}_{(i,j+1,k)} + \vec{f}_{(i,j,k-1)} + \vec{f}_{(i,j,k+1)} - 6\vec{f}_{(i,j,k)} \right) + \omega \vec{f}_{(i,j,k)} = \vec{F}_{(i,j,k)} + \vec{f}_{(i,j,k)}.$$

Las magnitudes de las entradas fuera de la diagonal suman

$$\sum_{s \neq t} |\Phi_{st}| = 6h^{-2}$$

y la diagonal corresponde a

$$\Phi_{ss} = \sum_{s \neq t} |\Phi_{st}| + \omega.$$

Así, de acuerdo a los círculos de Gershgorin

$$(3.20) \quad \omega \leq \lambda \leq \frac{12}{h^2} + \omega.$$

A continuación, se considera el estencil no convencional en la ecuación (3.7). En este caso,

$$\sum_{s \neq t} |\Phi_{st}| = \frac{1}{3h} + \frac{5}{h^2} + \left| \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h} \right|$$

y

$$\Phi_{ss} = \sum_{s \neq t} |\Phi_{st}| + \left( \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h} \right) - \left| \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h} \right| + \omega.$$

Después de un escalamiento espacial apropiado al problema elíptico original, siempre es el caso que  $0 < h < 1$ . En este intervalo, tenemos que  $(h^{-2} - h^{-1}/2) > 0$ , y los círculos de Gershgorin definidos por el estencil (3.7) permiten escribir

$$(3.21) \quad \omega \leq \lambda \leq \frac{11}{h^2} + \frac{1}{6h} + 12h^{-2} + \left| \frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h} \right| + \omega.$$

Las cotas de Gershgorin definidas a partir de las ecuaciones restantes de este sistema se plantean de manera similar, y por lo tanto se omiten los detalles y su transcripción.  $\square$

La proposición (3.3) refuerza el hecho de que la matriz  $\Phi$  es invertible, dado que el autovalor mínimo permanece acotado por  $\omega > 0$ , independientemente de cómo  $h \rightarrow 0$  en cualquier refinamiento de malla. Así, el esquema mimético es estable y debe converger a la solución exacta del problema dado (3.1) y (3.2). Por otro lado, si la cota superior estimada via Gershgorin es precisa, entonces el autovalor máximo puede crecer con orden  $O(h^{-2})$ , y también esperamos un aumento similar del número de condición de la matriz  $\Phi$ . Este es el caso de esquemas DF estándar con una matriz de discretización simétrica de este tipo de problemas elípticos. Sin embargo, ante la no simetría de la matriz  $\Phi$ , y la posible imprecisión de las cotas provistas por la proposición (3.3), se presenta a continuación una estimación de autovalores empírica, así como del número de condición. Para esto se emplean las funciones intrínsecas de Matlab *eig* y *cond* para aproximar los autovalores de magnitud mínima ( $\lambda^{MIN}$ ) y máxima ( $\lambda^{MAX}$ ) de  $\Phi$ , además de su número de condición. La figura 3.4 presentan estos resultados en mallas que se refinan progresivamente desde  $N = 5$  hasta  $N = 60$ . Los parámetros del problema corresponden a  $k = a = \gamma = 1$ , y también  $\omega = 1$  bajo condiciones de borde tipo Robin. Escalamos estos autovalores  $\lambda^{MIN}$  y  $\lambda^{MAX}$  con los valores  $\omega$  y  $N^2$ , respectivamente, con el fin de evaluar las cotas teóricas. Observe el escalamiento perfecto seguido por ambos autovalores en estos experimentos. Además, la figura 3.4 muestra el número de condición  $L_2$  de  $\Phi$  ponderado por la relación  $\frac{\lambda^{MAX}}{\lambda^{MIN}}$ , aun cuando esta matriz no es estrictamente simétrica, y se ha denotado este nuevo término con  $cond_2^*(\Phi)$ . Se observa que  $cond_2^*(\Phi)$  crece linealmente con  $N^2$ , por lo que se puede esperar también un aumento

lineal del número de iteraciones necesarias para resolver el sistema (3.5), con un resolvidor iterativo estándar para matrices esparcidas.

Esta sección finaliza con un breve comentario sobre las propiedades de la matriz del sistema  $\Phi$  bajo una parametrización más general del problema elíptico (3.1)-(3.2). Esta matriz no es simétrica bajo condiciones de borde Robin  $\gamma \neq 0$ , debido a la aproximación lateral mimética de los flujos por el operador  $B^{3D}G^{3D}$ . Además  $\Phi$  puede llegar a ser indefinida de acuerdo con la variación de signo de los parámetros  $k$  y  $w$  en el dominio del problema. Por lo tanto, la implementación del esquema mimético (3.5) requiere resolvidores iterativos especializados para matrices no simétricas e indefinidas. Los autores en [28] presentan una discretización bidimensional de la ecuación de Poisson basada en los operadores miméticos divergencia y gradiente. Este estudio explora cuidadosamente la aplicación de los métodos *Generalized Minimal Residual* (GMRES) y *BiConjugate Gradient* (BiCGstab) a estos problemas, y recomienda el uso de este último método bajo un preconditionamiento LU incompleto. Aunque las discretizaciones DF en [28] omiten la contribución del operador  $B^{3D}G^{3D}$  en la aproximación laplaciana, se considera el método BiCGstab entre las opciones aplicadas en los casos de estudios en 3D, presentados en el próximo capítulo.

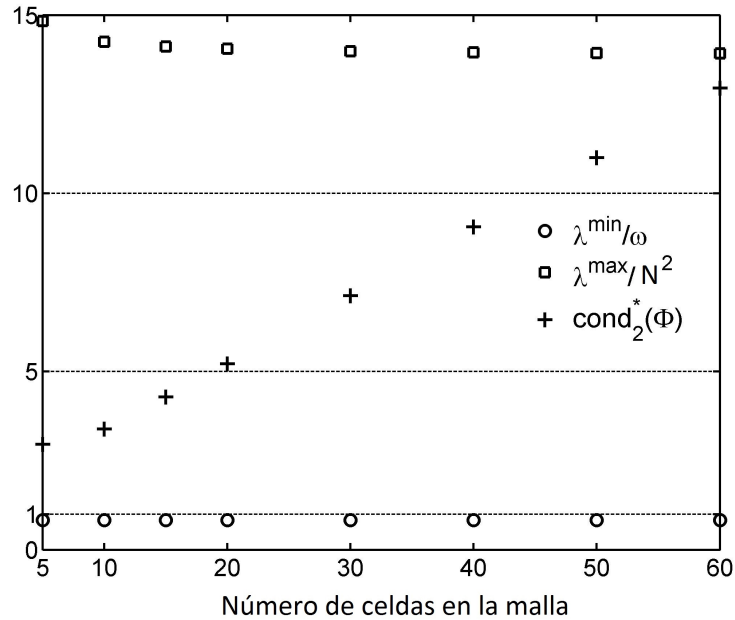


FIGURA 3.4. Autovalores mínimo y máximo escalados y número de condición de la matriz  $\Phi$

### 3.4. Un método mimético bidimensional para un tensor $k$ general

El método mimético formulado en la sección 3.1 puede ser aplicado a problemas elípticos modelados por las ecuaciones (3.22) y (3.23) en el caso de un tensor de propiedades  $k(x, y, z)$  diagonal, es decir,  $k(x, y, z) = \kappa(x, y, z)I$ , donde  $\kappa$  es una función escalar. La discretización centro distribuida y los operadores miméticos de diferenciación en mallas 3D, previamente presentados en la sección 2.3, permiten la solución de esta clase de problemas. Sin embargo, la generalización del método mimético al caso de tensores  $k(x, y, z)$  más generales, del tipo matriz simétrica no diagonal, resulta importante para ampliar su rango de aplicación. En este trabajo, dicha generalización e implementación se ha limitado a dominios 2D rectangulares, donde el método mimético convencional cuenta con una única aplicación a problemas de difusión en medios no isotrópicos bidimensionales en la referencia [63]. La ecuación elíptica de segundo orden a aproximar en 2D es

$$(3.22) \quad -\nabla \cdot (k(x, y)\nabla f) = F(x, y) \quad (x, y) \in \Omega,$$

bajo la siguiente condición de Robin

$$(3.23) \quad af + \gamma(k(x, y)\nabla f) \cdot \hat{n} = \varphi(x, y) \quad (x, y) \in \partial\Omega.$$

En primer lugar, se considera la aproximación del término divergencia  $\nabla \cdot (k\nabla f)$  en la ecuación (3.22), para  $k$  simétrico y no diagonal

$$(3.24) \quad \nabla \cdot (k(x, y)\nabla f) = \nabla \cdot \begin{pmatrix} k_{11}(x, y)\frac{\partial f}{\partial x} + k_{12}(x, y)\frac{\partial f}{\partial y} \\ k_{12}(x, y)\frac{\partial f}{\partial x} + k_{22}(x, y)\frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix}.$$

Al usar la definición de divergencia, la expresión anterior se reescribe como

$$(3.25) \quad \nabla \cdot (k(x, y)\nabla f) = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_{11}(x, y)\frac{\partial f}{\partial x} + k_{12}(x, y)\frac{\partial f}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_{12}(x, y)\frac{\partial f}{\partial x} + k_{22}(x, y)\frac{\partial f}{\partial y} \right).$$

Ambas derivadas parciales del campo escalar  $f$ , son aproximadas automáticamente por la discretización centro distribuida del gradiente mimético (2.1). Ante la forma de  $k$ , los términos dependientes de las componentes diagonales de  $k$ ,  $k_{11}\frac{\partial f}{\partial x}$  y  $k_{22}\frac{\partial f}{\partial y}$  en (3.25), ocupan localizaciones de malla que coinciden con el dominio discreto del operador divergencia mimético (2.3).

Sin embargo, los términos que involucran el coeficiente  $k_{12}$  requieren ser interpolados, previo a la aplicación de los operadores  $D_x^{2D}$  y  $D_y^{2D}$ . Específicamente, el término  $k_{12} \frac{\partial f}{\partial y}$  automáticamente calculado en los puntos de malla  $\vec{X}_c \times \vec{Y}_n$ , debe ser aproximado en las localizaciones que alojan al término recíproco  $k_{11} \frac{\partial f}{\partial x}$  y coincidentes con  $\vec{X}_n \times \vec{Y}_c$ , de acuerdo a la discretización encajada dada en la tabla 2.1. Una interpolación similar de los valores  $k_{12} \frac{\partial f}{\partial x}$  calculados en  $\vec{X}_n \times \vec{Y}_c$ , a los puntos  $\vec{X}_c \times \vec{Y}_n$  que alojan a  $k_{22} \frac{\partial f}{\partial y}$ , es igualmente requerido previo al cálculo final de la divergencia. La figura 3.5-a ilustra una celda de la malla con la distribución de los términos conocidos, y representados en forma genérica por los valores discretos  $g_{i,j}$ , mientras que el valor producto de la interpolación corresponde a  $g^*$ . Con el objeto de considerar el posible espaciamiento no uniforme de la malla 2D cartesiana, las posiciones de  $g^*$  y de los cuatro valores vecinos  $g_{i,j}$ , también son ilustrados en esta figura. La presente formulación se limita al uso de la interpolación de Lagrange de primer orden.

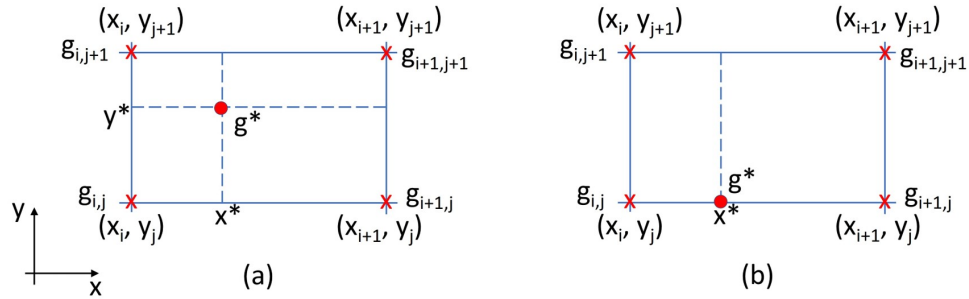


FIGURA 3.5. Interpolación de Lagrange de las componentes del gradiente en la malla 2D encajada

$$(3.26) \quad g^* = g_{i,j} \frac{(x_{i+1} - x^*)}{(x_{i+1} - x_i)} \frac{(y_{j+1} - y^*)}{(y_{j+1} - y_j)} + g_{i,j+1} \frac{(x_{i+1} - x^*)}{(x_{i+1} - x_i)} \frac{(y^* - y_j)}{(y_{j+1} - y_j)} + g_{i+1,j} \frac{(x^* - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} \frac{(y_{j+1} - y^*)}{(y_{j+1} - y_j)} + g_{i+1,j+1} \frac{(x^* - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} \frac{(y^* - y_j)}{(y_{j+1} - y_j)}.$$

La precisión de la interpolación definida por (3.26) es de segundo orden para funciones  $g(x, y)$  suficientemente suaves, por lo que su uso no debería degradar la convergencia nominal del método mimético 2D basado en los operadores unidimensionales (1.6), (1.7) y (1.10). La figura 3.5-b muestra el caso de una celda en la frontera, y donde  $g^*$  debe ser interpolado en la línea de borde. En este caso, la fórmula (3.26) se degrada a la simple interpolación

unidimensional ampliamente conocida

$$(3.27) \quad g^* = g_{i,j} \frac{(x_{i+1} - x^*)}{(x_{i+1} - x_i)} + g_{i+1,j} \frac{(x^* - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)}.$$

En función de resolver el problema elíptico (3.22)-(3.23), los coeficientes de las fórmulas de interpolación (3.26) y (3.27) pasan a formar parte de un nuevo operador  $I^*$ , de tal manera que los términos  $k_{12} \frac{\partial f}{\partial x}$  y  $k_{12} \frac{\partial f}{\partial y}$  sean apropiadamente aproximados, mediante la operación compuesta  $I^*(KG\vec{f})$ . Estas nuevas aproximaciones siguen el ordenamiento natural usado en la malla encajada, y requerido para la aplicación del operador divergencia mimético  $D^{2D}$ . Una vez construido este operador  $I^*$ , el método mimético bidimensional para este problema queda formulado como

$$(3.28) \quad (-D^{2D}I^*KG^{2D} + A + \Gamma B^{2D}I^*KG^{2D})\vec{f} = \vec{F} + \vec{\varphi},$$

o alternativamente escrito como

$$\phi \vec{f} = \vec{F} + \vec{\varphi}$$

siendo la matriz  $\phi = -D^{2D}I^*KG^{2D} + A + \Gamma B^{2D}I^*KG^{2D}$ .

El esquema mimético anterior es bastante general pues puede ser aplicado en mallas con espaciamiento no uniforme, una vez reemplazados el gradiente y la divergencia miméticos por sus versiones no uniformes dados en la sección 2.4, y además consideran un tensor de propiedades  $k$  no diagonal. Sin embargo, en caso que  $k_{12} = 0$ , las proyecciones del operador  $I^*$  son anuladas, y el esquema (3.28) se reduce al caso bidimensional del método mimético 3D presentado en las secciones anteriores.

## Experimentación numérica

Para la solución numérica de los casos de prueba, se utiliza la herramienta Matlab R2012b en un equipo bajo Windows 10 como sistema operativo, con un procesador Intel core i7-2630QM y 6 GB de memoria RAM.

### 4.1. Experimentación con mallas uniformes y no uniformes en 3D

Las simulaciones numéricas presentadas en esta sección corresponden a ejecuciones del esquema mimético formulado y analizado en las secciones 3.1-3.3. Además, los casos de prueba objeto de estas simulaciones están parametrizados acorde a esta formulación y análisis. Para resolver los sistemas de ecuaciones lineales inherentes al esquema, se emplea el resolvidor iterativo *Quasi Minimal residual* (QMR) porque resulta el más efectivo entre las opciones exploradas en Matlab. El primer resolvidor alternativo corresponde a la gama de métodos directos que implementa la barra invertida. El alto consumo de memoria de estos métodos al triangularizar la matriz generada por la discretización 3D, induce el sistema a colapsar al refinar la malla por encima de 40 puntos por eje coordenado. También se emplean los métodos iterativos *gmres* y *bcgstat*, ambos con el uso opcional de preconditionamiento factorización LU incompleta (ilu) y sobrerelajación simétrica sucesiva (ssor). El cálculo del preconditionador por parte de estos métodos también conduce el sistema al colapso por los elevados requerimientos de memoria en mallas con 70 o más nodos por eje coordenado.

Para evaluar la precisión y la convergencia experimental de las discretizaciones miméticas, se utiliza como caso de prueba el siguiente problema de difusión estacionaria con un tensor diagonal  $k$  variable en espacio

$$-\nabla \cdot (k \nabla f) + wf = F(x, y, z) \quad (x, y, z) \in [(0, 1) \times (0, 1) \times (0, 1)]$$

$$af + \gamma(k \nabla f) \hat{n} = \varphi(x, y, z) \quad (x, y, z) \in \partial\Omega$$



donde

$$F = -e^{x+y+z}\eta\{(\eta - 1)(x^{\eta-2} + y^{\eta-2} + z^{\eta-2}) + x^{\eta-1} + y^{\eta-1} + z^{\eta-1}\} + x^\eta + y^\eta + z^\eta$$

$$k = e^{x+y+z}I \quad ; \quad a = \gamma = w = 1.$$

La solución analítica de este problema es evidentemente dependiente del parámetro  $\eta$  y corresponde con

$$f(x, y, z) = x^\eta + y^\eta + z^\eta.$$

Para este problema, un primer conjunto de simulaciones se realizan utilizando los operadores de segundo orden de precisión  $G^{3D}$ ,  $D^{3D}$ , y  $B^{3D}$ , formulados en la sección 2.3, a partir de los operadores unidimensionales dados por las ecuaciones (1.6)-(1.10). Sin embargo, a nivel comparativo resulta interesante calcular las soluciones numéricas empleando una precisión mayor, y con este objeto se usan las versiones de cuarto orden del gradiente y de la divergencia 3D. Las mismas se obtienen al sustituir los operadores gradiente y divergencia 1D de cuarto orden (1.13) y (1.14), en las fórmulas tensoriales (2.7) y (2.8), resultando los nuevos  $G^{3D}$  y  $D^{3D}$  de alto orden. A continuación, estos operadores se combinan con un operador tridimensional simplificado de flujo en la frontera únicamente diseñado para hacer cumplir las condiciones de frontera de Robin dadas. Este nuevo operador no mimético  $B^{3D}$  se obtiene al usar  $B = [-e_1, 0, \dots, 0, e_N]$  como el operador de flujo unidimensional en la ecuación (2.9). Finalmente, estos tres nuevos operadores tridimensionales son sustituidos en la ecuación (3.5) para obtener una discretización no mimética de alto orden a ser usada como referencia. La misma puede ser vista como un esquema tradicional en diferencias finitas que explota los diferentes estenciles disponibles en  $G^{3D}$  y  $D^{3D}$ , pero no satisface la ley de conservación (1.2).

El error de aproximación en los resultados numéricos aumenta con el grado  $\eta$  del polinomio solución  $f$ . Esto se debe a que en las proximidades de las esquinas del dominio (diferentes al punto de origen) el gradiente de  $f$  aumenta considerablemente a medida que  $\eta$  crece. Por ello, se realizan simulaciones para  $\eta = 5, 6, 8, \text{ y } 10$ , usando mallas con un número creciente de celdas  $N = M = L = 10, 20, 30, 40, 50 \text{ y } 60$ . El uso del mismo número de celdas en cada dirección coordenada simplifica la presentación y análisis de los resultados, y no atiende a una limitación de las implementaciones computacionales. Así, de aquí en adelante se hace referencia sólo a  $N$  para indicar la densidad de la malla.

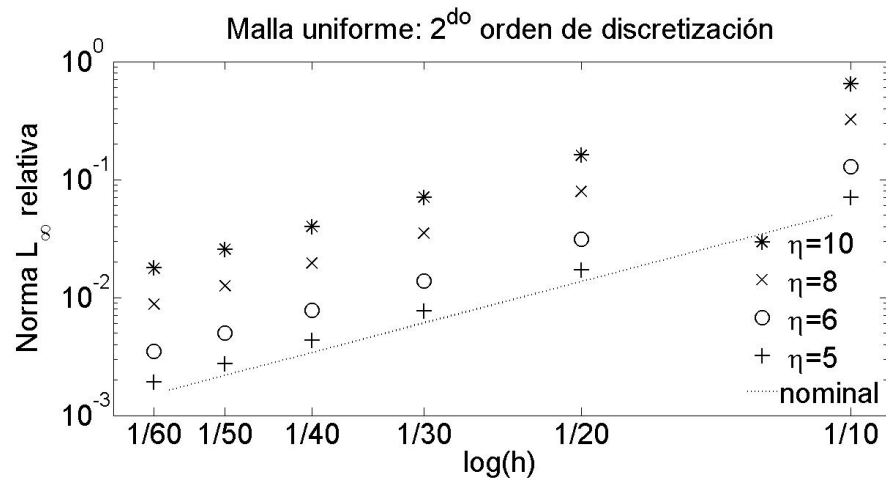
Las soluciones numéricas han sido calculadas en mallas uniformes donde el espaciamiento resulta  $h = 1/N$ , y además en mallas con un refinamiento local para una resolución más precisa del gradiente continuo de gran magnitud. Los errores relativos  $L_\infty$  de estas soluciones se ilustran en la figura 4.1 y se listan en las tablas 4.1, (4.2), y (4.3). En el caso de mallas uniformes, estos errores corresponden al esquema mimético de segundo orden (3.5), presentados en la figura 4.1a, y al esquema no mimético de cuarto orden mencionado anteriormente, ilustrados en la figura 4.1b. En estas figuras también se muestra una recta como referencia a la convergencia nominal de cada esquema. Es evidente que la dificultad del problema crece con el parametro  $\eta$ , pero la discretización basada en operadores de cuarto orden resulta más precisa en las mallas con mayor refinamiento. Una simple inspección de las tablas 4.1 y 4.2 muestra esta ganancia en precisión por el alto orden de discretización. Para ejemplificar la misma, se incluye la tabla 4.4 donde se indican las fracciones que representan los errores del esquema de cuarto orden, respecto a los observados en el método de segundo orden en el caso de prueba  $\eta = 8$ . Note que esta proporción de errores cae de 6,81 % para la malla  $N = 10$ , a sólo un 0,03 % cuando la misma se refina hasta  $N = 60$ .

La tabla 4.5 presenta una información adicional acerca de la convergencia de los esquemas mencionados. Básicamente, se listan las pendientes de regresión lineal al ajustar por mínimos cuadrados los datos de error de cada esquema. En mallas uniformes, el orden de convergencia experimental del método de segundo orden replica la tasa nominal, mientras que el método de cuarto orden converge con mayor velocidad en la práctica, a la esperada teóricamente. Ambos comportamientos se repiten para los diferentes casos de estudio dados por  $\eta$ .

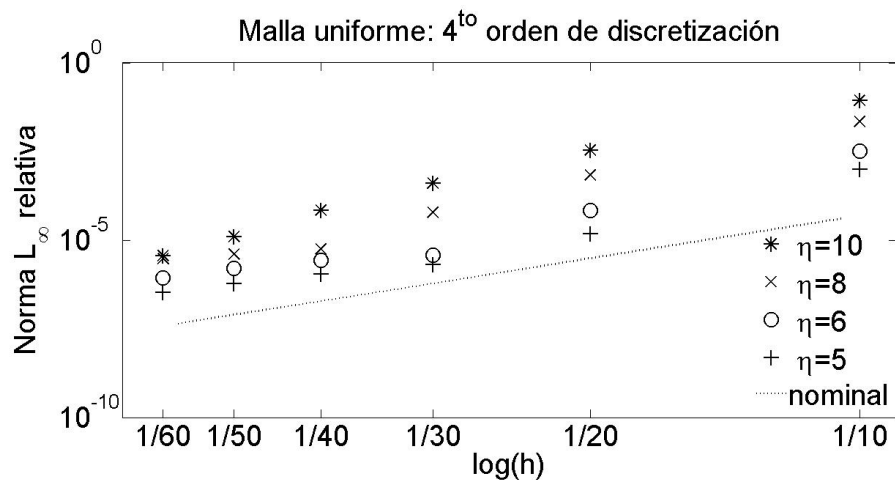
$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	0.070554	0.017159	0.007641	0.004306	0.002758	0.001917
6	0.127785	0.031122	0.013842	0.007800	0.004996	0.003472
8	0.321365	0.078849	0.034901	0.019665	0.012597	0.008754
10	0.647969	0.160447	0.070901	0.039900	0.025564	0.017765

TABLA 4.1. Error relativo  $L_\infty$  en malla uniforme con 2<sup>do</sup> orden de discretización

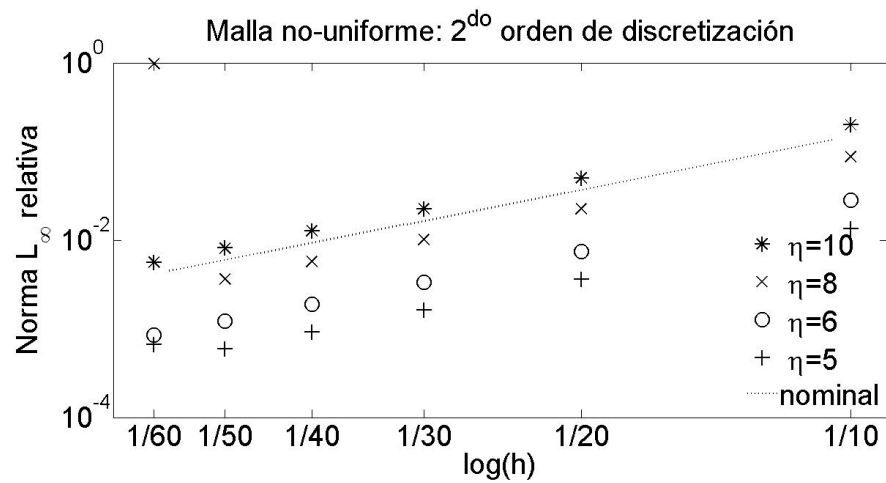
Un tercer conjunto de soluciones numéricas han sido calculadas mediante el esquema mimético de segundo orden, pero formulado en términos de los operadores en mallas con espaciamiento no uniforme de la sección 2.4. Por simplicidad, se aplica el mismo refinamiento en las tres direcciones coordenadas del mallado. El objetivo fundamental de estas pruebas



(a)



(b)



(c)

FIGURA 4.1. Ilustración de los errores relativos en norma  $L_\infty$  de las soluciones numéricas

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	0.0009672	0.0000153	0.0000020	0.0000011	0.0000006	0.0000003
6	0.0033034	0.0000680	0.0000037	0.0000027	0.0000016	0.0000009
8	0.0218912	0.0006834	0.0000616	0.0000057	0.0000040	0.0000030
10	0.0855075	0.0034265	0.0003992	0.0000696	0.0000127	0.0000036

TABLA 4.2. Error relativo  $L_\infty$  en malla uniforme con 4<sup>to</sup> orden de discretización

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	0.019293	0.005054	0.002281	0.001293	0.000831	0.000579
6	0.038967	0.010099	0.004543	0.002571	0.001652	0.001150
8	0.114029	0.028830	0.012919	0.007298	0.004683	0.003258
10	0.250715	0.062605	0.027987	0.015794	0.010129	0.007043

TABLA 4.3. Error relativo  $L_\infty$  en malla no-uniforme con 2<sup>do</sup> orden de discretización

Cociente $\backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
$4^{\text{to}}U/2^{\text{do}}U$	6,81 %	0,87 %	0,18 %	0,03 %	0,03 %	0,03 %
$2^{\text{do}}NU/2^{\text{do}}U$	35,48 %	36,56 %	37,02 %	37,11 %	37,18 %	37,22 %

TABLA 4.4. Fracciones del error relativo  $L_\infty$  para los casos de prueba  $\eta = 8$ 

$\eta \backslash$ Esquema	2 <sup>do</sup> orden uniforme	4 <sup>to</sup> orden uniforme	2 <sup>do</sup> orden no uniforme
5	2.01	4.40	1.96
6	2.01	4.62	1.97
8	2.01	5.29	1.98
10	2.01	5.60	1.99

TABLA 4.5. Tasas de convergencia para los esquemas de 2<sup>do</sup> y 4<sup>to</sup> orden de precisión

es mostrar la versatilidad del esquema numérico al operar en este tipo de mallas, y no la de encontrar un refinamiento óptimo para el problema bajo solución. El espaciado de la malla a lo largo de cada eje del cubo unitario, se logra al usar la transformación  $T(\epsilon) = \arctan(t\epsilon)/\arctan(t)$ , donde el parámetro  $t$  controla el nivel de refinamiento cerca de 1. En estos casos de prueba se usa  $t = 7/8$ . La nueva variable  $\epsilon$  toma valores uniformes en el intervalo  $[0, 1]$  para generar la malla refinada. Al aplicar esta transformación, el espaciado de la malla se reduce a medida que se aleja del origen  $(0, 0, 0)$  permitiendo una mayor resolución

de los altos gradientes de la solución en las celdas vecinas a los bordes de la malla. Estas pruebas se limitan al esquema mimético de segundo orden (3.5), cuyos errores se presentan en la figura 4.1c y se listan en la tabla 4.3. Al comparar contra los resultados bajo malla uniforme, se puede apreciar la ganancia en precisión ofrecida por el refinamiento de malla. De hecho, para cada caso de prueba dado por  $N$  y  $\eta$ , el error bajo refinamiento es menor a la mitad de su correspondiente en mallas uniformes. Adicionalmente, la tabla 4.5 detalla las tasas de convergencia experimentales de este esquema, y las cuales son ligeramente menores a las observadas en mallas uniformes, pero igualmente se aproximan a la nominal igual a 2.

Finalmente, se presenta el número de iteraciones del resolvidor lineal  $QMR$  y los tiempos de ejecución de los esquemas numéricos bajo comparación en las tablas 4.6- 4.11, para todos los casos de prueba mencionados. Estos resultados presentan una escasa desviación respecto al grado del polinomio  $\eta$ , mientras que aumentan significativamente con el número de nodos de la malla  $N$ . Así, se incluyen en estas tablas los valores promedios para cada densidad de malla considerada. Note que los mismos son relativamente similares para las simulaciones en mallas uniformes, ya sea con segundo o cuarto orden de precisión, y ligeramente menores a sus correspondientes en mallas refinadas no uniformes. El aumento del número de iteraciones del resolvidor lineal y los tiempos de ejecución ante el mallado no uniforme, atiende probablemente al incremento del número de condición de la matriz asociada al esquema en función del mínimo espaciado impuesto en la malla. Bajo esta óptica, el esquema con cuarto orden de precisión operando en mallas uniformes resultaría la opción más precisa para este tipo de problemas elípticos, de costo inferior a una discretización basada en el refinamiento no uniforme de la malla.

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	106	150	201	266	441	634
6	112	146	212	268	426	502
8	104	147	194	268	419	544
10	100	154	194	259	404	509
prom.	105.50	149.25	200.25	265.25	422.50	547.25

TABLA 4.6. Número de iteraciones del esquema mimético de 2<sup>do</sup> orden en mallas uniformes

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	79	140	205	335	396	539
6	79	142	204	277	337	555
8	79	139	207	291	345	537
10	77	143	204	287	355	523
prom.	78.50	141.00	205.00	297.50	358.25	538.50

TABLA 4.7. Número de iteraciones del esquema no mimético de 4<sup>to</sup> orden en mallas uniformes

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	102	152	204	273	444	611
6	104	163	216	318	407	545
8	101	152	240	317	868	937
10	101	156	203	303	398	589
prom.	102.00	155.75	215.75	302.75	529.25	670.50

TABLA 4.8. Número de iteraciones del esquema mimético de 2<sup>do</sup> orden en mallas no uniformes

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	2.984375	1.640625	3.203125	8.718750	27.515625	64.734375
6	1.062500	1.406250	3.187500	8.218750	26.078125	53.140625
8	0.984375	1.578125	2.968750	8.281250	25.500000	56.859375
10	0.953125	1.468750	3.109375	8.203125	25.031250	51.343750
prom.	2.023438	1.523438	3.117188	8.355469	26.031250	56.519531

TABLA 4.9. Tiempos de ejecución (seg) del esquema mimético de 2<sup>do</sup> orden en mallas uniformes

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	1.000000	1.906250	5.484375	17.390625	42.453125	97.812500
6	1.000000	1.765625	5.234375	15.031250	35.531250	102.140625
8	1.171875	3.375000	6.343750	17.218750	41.203125	103.296875
10	1.343750	2.281250	6.046875	18.062500	47.593750	94.187500
prom.	1.128906	2.332031	5.777344	16.925781	41.695313	99.359375

TABLA 4.10. Tiempos de ejecución (seg) del esquema no mimético de 4<sup>to</sup> orden en mallas uniformes

$\eta \backslash N$	$10 \times 10 \times 10$	$20 \times 20 \times 20$	$30 \times 30 \times 30$	$40 \times 40 \times 40$	$50 \times 50 \times 50$	$60 \times 60 \times 60$
5	2.250000	2.921875	9.000000	28.531250	91.593750	218.078125
6	1.500000	2.921875	10.109375	37.593750	97.062500	219.468750
8	1.296875	3.109375	10.437500	39.687500	221.500000	476.687500
10	1.484375	3.687500	9.984375	40.718750	27.484375	58.484375
prom.	1.632813	3.160156	9.882813	36.632813	109.410156	243.179688

TABLA 4.11. Tiempos de ejecución (seg) del esquema mimético de  $2^{do}$  orden en mallas no uniformes

## 4.2. Experimentación en mallas uniformes y no uniformes en 2D

Para resolver los sistemas de ecuaciones lineales inherentes a los casos de prueba presentados en esta sección, se utiliza el grupo de resolvidores directos que implementan la barra invertida de Matlab. En estos experimentos, la máxima resolución de la malla está dada por  $N = 220$ , y nuestro equipo computacional permite tanto la construcción en formato sparse de la matriz del sistema de dimensión  $(N + 2)^2 \times (N + 2)^2$ , como la resolución del sistema asociado vía la barra invertida.

### 4.2.1. Caso de estudio Batista-Castillo extendido a 2D con tensor $k$ diagonal.

El caso de prueba presentado en [5] en 1D, ha sido extendido a un dominio bidimensional de manera tal que la solución analítica está normalizada, es decir su rango corresponde a  $[0, 1]$ . Este nuevo problema resulta tan interesante como su versión original 1D, pues la solución exacta se caracteriza por su rápido crecimiento a 1 en la región vecina al punto origen  $(0, 0)$ . Para este tipo de problemas, los métodos tradicionales de diferencias finitas y basados en la discretización de las condiciones de frontera usando puntos fantasmas, generan oscilaciones espúreas. Los elevados gradientes de la solución hacen muy imprecisa una extrapolación polinomial del campo a nodos fantasmas localizados fuera de esta frontera. En estos casos, suele ser preferible las diferenciaciones basadas en estenciles laterales, tales como los usados en la discretización mimética.

Acorde a la formulación general presentada en la sección 3.4, este problema de valor de frontera para el tensor  $k$  identidad queda definido como

$$-\nabla \cdot (k \nabla f) = F(x, y) \quad (x, y) \in [(0, 1) \times (0, 1)]$$

$$af + \gamma(k \nabla f) \hat{n} = \varphi(x, y) \quad (x, y) \in \partial\Omega$$

donde

$$F = \frac{4 * 10^6(x + y)}{(1 + 10^4(x + y)^2)^2 \operatorname{atan}(200)}$$

$$k = I \quad ; \quad a = \gamma = 1.$$

La solución analítica de este problema es

$$f = \frac{\operatorname{atan}(100(x + y))}{\operatorname{atan}(200)}$$



Se han efectuado simulaciones numéricas empleando el esquema (3.28) en mallas con igual número de celdas en cada dirección coordenada y dadas por  $N = 160, 170, 180, 190, 200, 210$ , y 220. Semejante al caso de estudio tridimensional, se han usado operadores con segundo y cuarto orden de precisión en mallas uniformes, mientras que las simulaciones en mallas localmente refinadas corresponden exclusivamente a discretizaciones de segundo orden. Atendiendo al operador de frontera  $B^{2D}$  empleado en estas simulaciones, se tiene que ambas discretizaciones con segundo orden son miméticas dado que usan el operador de frontera dado por la identidad (2.6). Por otro lado, la discretización con cuarto orden de precisión usa la versión no mimética de  $B^{2D}$  que únicamente permite imponer las condiciones de borde tipo Robin. En resumen, se han ejecutado 21 simulaciones numéricas para este caso de prueba de acuerdo a la variación de  $N$  y a los 3 esquemas numéricos opcionales. Un número igual de soluciones numéricas son calculadas para el resto de los casos de prueba presentados en esta sección.

En las simulaciones sobre mallas no uniformes debido al refinamiento local, la transformación unidimensional usada en ambas direcciones coordenadas es  $T(\epsilon) = (e^{5\epsilon} - 1)/(e^5 - 1)$ .

Los errores relativos  $L_\infty$  de las soluciones numéricas se ilustran en la figura 4.2 y se listan en la tabla 4.12. En el caso de mallas uniformes, el esquema de segundo orden resulta más preciso que su contraparte de cuarto orden para cada valor de  $N$ . Este interesante resultado conduce a la conclusión de que la resolución de elevados gradientes en la solución aproximada resulta más precisa en discretizaciones de bajo orden. Si adicionalmente la malla es apropiadamente refinada en la zona de gran variación de la solución, la precisión del esquema numérico puede aumentar significativamente. Note que el error de la simulación no uniforme es dos ordenes de magnitud inferior a su contraparte en malla uniforme, en cada caso de  $N$ .

N tipo	160×160	170×170	180×180	190×190	200×200	210×210	220×220
uniforme $2^{do}$	0.0316	0.0302	0.0283	0.0263	0.0242	0.0222	0.0204
uniforme $4^{to}$	0.0731	0.0619	0.0518	0.0430	0.0355	0.0291	0.0238
no uniforme $2^{do}$	0.00091	0.00080	0.00071	0.00064	0.00058	0.00052	0.00048

TABLA 4.12. Errores relativos  $L_\infty$  en el caso 4.2.1

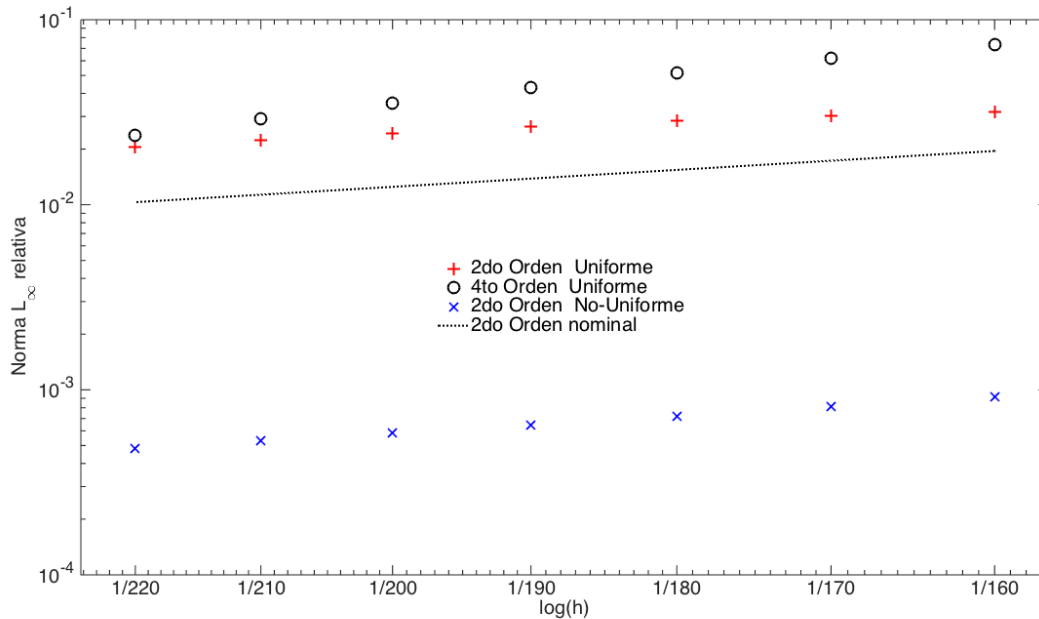


FIGURA 4.2. Ilustración de los errores relativos  $L_\infty$  de las soluciones numéricas en el caso 4.2.1

La tabla 4.13 lista las tasas de convergencia para los 3 conjuntos de soluciones numéricas. El esquema de segundo orden en mallado uniforme presenta una convergencia deficiente en el rango de  $N$  explorado, por lo que sería necesario un refinamiento de malla aún mayor. Una situación similar es también observada en el caso de simulaciones uniformes con cuarto orden de precisión. Alternativamente, el refinamiento de malla en las simulaciones de segundo orden no sólo redunda en precisión, sino también permite alcanzar una tasa de convergencia óptima que replica la nominal. Finalmente, la tabla 4.14 permite comparar los tiempos de ejecución de estas simulaciones. Tomando estos valores como un indicativo del costo computacional, se puede inducir que las simulaciones no uniformes son igualmente costosas que sus contrapartes uniformes, y en mallas densas o poco densas ( $N \geq 180$ ) este costo es menor a la mitad del requerido para el cálculo de soluciones de cuarto orden en mallado uniforme.

tipo \ Tasa	Tasa de convergencia
uniforme 2 <sup>do</sup>	1.40
uniforme 4 <sup>to</sup>	3.53
no uniforme 2 <sup>do</sup>	2.01

TABLA 4.13. Tasas de convergencia para los esquemas de 2<sup>do</sup> y 4<sup>to</sup> orden de precisión en el caso 4.2.1

tipo \ N	160×160	170×170	180×180	190×190	200×200	210×210	220×220
uniforme 2 <sup>do</sup>	2.6094	1.4688	1.3594	1.4688	1.6875	1.6719	1.7188
uniforme 4 <sup>to</sup>	3.8438	2.8906	3.8281	3.5469	4.1094	4.9219	4.9063
no uniforme 2 <sup>do</sup>	2.6406	1.5469	1.4063	1.5938	1.3750	1.7969	1.7813

TABLA 4.14. Tiempos de cálculo (seg) de las soluciones numéricas en el caso 4.2.1

**4.2.2. Caso de estudio Arteaga-Guevara con tensor  $k$  diagonal.** Este caso de prueba corresponde al problema presentado en [4] y que físicamente se corresponde con la ecuación estática de difusión bajo condiciones de flujo tipo Robin en las fronteras. Este modelo físico aplica a los demás casos de estudio de esta sección. Tal como se indica a continuación, la solución analítica a este problema particular es una función polinomial que podría presentar fuertes variaciones en las vecindades de la frontera, de acuerdo al grado  $n$  de la misma. En este caso, se adopta  $n = 20$  en las simulaciones numéricas y que corresponde al valor más alto considerado en el citado trabajo, donde además el tensor  $k$  coincide con la matriz identidad. La formulación de este problema en términos de un grado  $n$  arbitrario viene a ser

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (k \nabla f) &= F(x, y) & (x, y) &\in [(0, 1) \times (0, 1)] \\ af + \gamma(k \nabla f) \hat{n} &= \varphi(x, y) & (x, y) &\in \partial\Omega \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} F &= -n(n-1)(x^{n-2} + (1-x)^{n-2} - y^{n-2} + (1-y)^{n-2}) \\ k &= I \quad ; \quad a = \gamma = 1. \end{aligned}$$

La solución analítica de este problema es

$$f = (1-x)^n + (1-y)^n + x^n - y^n$$

Las soluciones numéricas se han calculado usando la cantidad de celdas de malla y opciones para el orden de discretización del caso de estudio anterior. En las simulaciones sobre mallas no uniformes con refinamiento local, la transformación unidimensional usada corresponde a  $T(\epsilon) = (e^{5\epsilon} - 1)/2(e^{5/2} - 1)$  si  $0 \leq \epsilon \leq 1/2$  y  $T(\epsilon) = (1 - (e^{5(1-\epsilon)} - 1))/(2(e^{5/2} - 1))$  si  $1/2 \leq \epsilon \leq 1$ .

Los errores relativos  $L_\infty$  de las soluciones numéricas se presentan en la figura 4.3 y en la tabla 4.15. Es evidente que la discretización de cuarto orden redundante en una alta precisión y sus errores son al menos dos órdenes de magnitud inferior a sus dos contrapartes calculadas con segundo orden, para cada valor de  $N$  considerado. Ahora, al tomar en cuenta sólo las simulaciones con segundo orden de precisión, el refinamiento de malla también brinda beneficios significativos en precisión. Para cada densidad de malla dada por  $N$ , el error en

mallado no uniforme no supera un tercio de su correspondiente error de la simulación en malla uniforme.

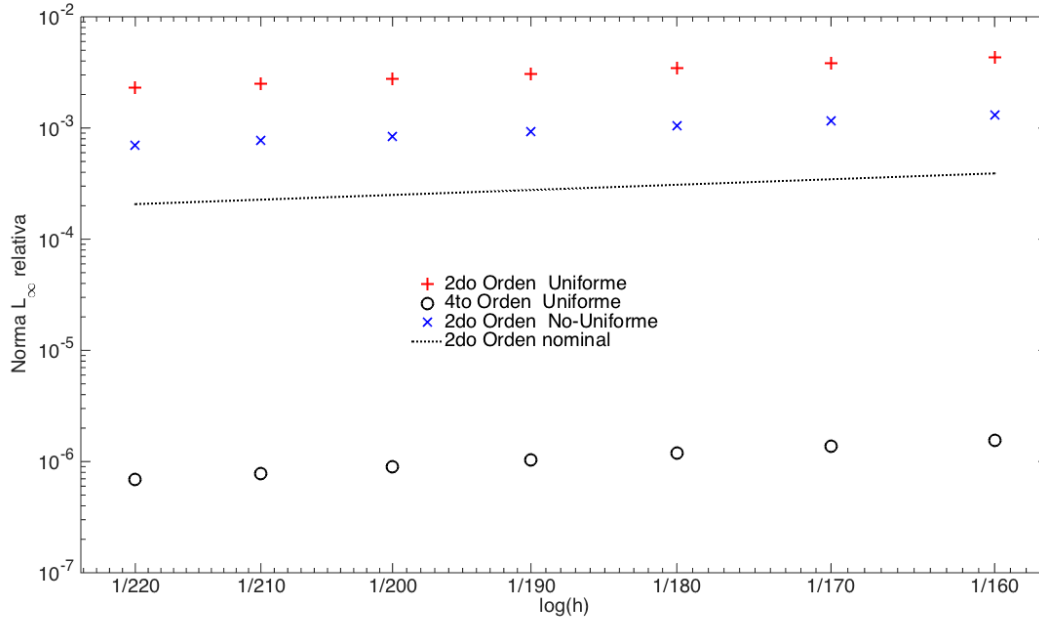


FIGURA 4.3. Ilustración de los errores relativos  $L_\infty$  de las soluciones numéricas en el caso 4.2.2

tipo \ N	160×160	170×170	180×180	190×190	200×200	210×210	220×220
uniforme $2^{do}$	0.0043	0.0038	0.0034	0.0031	0.0028	0.0025	0.0023
uniforme $4^{to}$	0.155E-5	0.137E-5	0.119E-5	0.104E-5	0.090E-5	0.079E-5	0.068E-5
no uniforme $2^{do}$	0.001318	0.001168	0.001042	0.000935	0.000844	0.000765	0.000697

TABLA 4.15. Errores relativos  $L_\infty$  en el caso 4.2.2

La tabla 4.16 presenta las tasas de convergencia experimentales para este caso de prueba. Las simulaciones bajo discretizaciones de segundo orden muestran una convergencia cuadrática que coincide con la nominal, en ambos tipos de mallado. Por otro lado, el esquema no mimético basado en una discretización uniforme con cuarto orden de precisión exhibe una convergencia experimental deficiente en el rango de  $N$  explorado. Sin embargo, las magnitudes pequeñas de sus errores son un indicativo de que las mallas exploradas resultan muy refinadas para la precisión de este esquema de alto orden, y que podría esperarse una convergencia más rápida para valores mucho menores de  $N$ . A continuación, la tabla 4.17 lista

los tiempos de ejecución de todas estas simulaciones. La menor precisión del esquema del segundo orden en mallado uniforme está acompañada de los menores tiempos de ejecución, y por ende de menor costo computacional, en relación a los dos métodos alternativos. Tomando como referencia el caso  $N = 170$ , el tiempo de ejecución de este esquema aumenta sólo un 30 % respecto al caso de malla más densa dado por  $N = 220$ . Similarmente, los tiempos de ejecución del esquema de segundo orden en mallado no uniforme aumentan sólo un 50 % al comparar los mismos casos  $N = 170$  y  $N = 220$ . Esto es un indicativo de que ambos esquemas podrían ser aplicados en casos ligeramente mayores de  $N$ , esperando un crecimiento lineal del tiempo de ejecución. Por otro lado, el esquema de cuarto orden experimenta un crecimiento del tiempo de ejecución de 137 % al comparar los casos de referencias  $N = 170$  y  $N = 220$ , por lo que se esperaría un crecimiento más significativo del mismo ante el refinamiento de malla.

tipo \ Tasa	Tasa de convergencia
uniforme 2 <sup>do</sup>	1.99
uniforme 4 <sup>to</sup>	2.58
no uniforme 2 <sup>do</sup>	2.00

TABLA 4.16. Tasas de convergencia para los esquemas de 2<sup>do</sup> y 4<sup>to</sup> orden de precisión en el caso 4.2.2

tipo \ N	160×160	170×170	180×180	190×190	200×200	210×210	220×220
uniforme 2 <sup>do</sup>	2.2500	1.2500	1.3750	1.3906	1.5000	1.5781	1.6250
uniforme 4 <sup>to</sup>	3.5313	2.5625	2.9688	3.8125	4.5781	4.5938	6.0781
no uniforme 2 <sup>do</sup>	3.1719	1.6250	1.7500	1.7969	1.9219	1.8906	2.4219

TABLA 4.17. Tiempos de cálculo (seg) de las soluciones numéricas en el caso 4.2.2

### 4.2.3. Caso de estudio Arteaga-Guevara modificado con tensor $k$ completo.

Este caso de prueba se basa en una modificación del problema de valor de frontera resuelto en la sección anterior. Aquí se toma una matriz densa y simétrica como el tensor  $k$  de propiedades del material, por lo que el vector flujo de la solución  $k\nabla f$  presenta componentes dependientes de ambas derivadas espaciales (ver ec. 3.25), y en consecuencia la discretización del nuevo problema amerita de las técnicas de interpolación en la malla encajada presentadas en la sección 3.4. Específicamente, la formulación del problema de valor de frontera modificado es

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (k\nabla f) &= F(x, y) & (x, y) &\in [(0, 1) \times (0, 1)] \\ af + \gamma(k\nabla f)\hat{n} &= \varphi(x, y) & (x, y) &\in \partial\Omega \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} F &= -n(n-1)(x^{n-2} - y^{n-2} + (1-x)^{n-2} + (1-y)^{n-2}) \\ &+ 2500n(n-2)\left((x-0,5)^{\frac{n}{4}}(y-0,5)^{\frac{n}{4}-2}(0,5-x)^{\frac{n}{4}}(0,5-y)^{\frac{n}{4}} + (x-0,5)^{\frac{n}{4}-2}(y-0,5)^{\frac{n}{4}}(0,5-x)^{\frac{n}{4}}(0,5-y)^{\frac{n}{4}}\right) \\ &+ 2500(x-0,5)^{\frac{n}{4}-1}n^2 * (y-0,5)^{\frac{n}{4}-1}(0,5-x)^{\frac{n}{4}}(0,5-y)^{\frac{n}{4}} \end{aligned}$$

y

$$k = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}, \quad a = \gamma = 1.$$

La solución analítica de este problema está bien definida para  $n$  positivos y múltiplos de 4, y la misma corresponde a

$$f = (1-x)^n + (1-y)^n + x^n - y^n + 10000(x-0,5)^{\frac{n}{4}}(y-0,5)^{\frac{n}{4}}(0,5-x)^{\frac{n}{4}}(0,5-y)^{\frac{n}{4}}$$

Semejante al caso de estudio anterior, se ha tomado  $n = 20$  como el grado de la solución polinomial. Similarmente, las simulaciones se han efectuado usando igual cantidad de celdas de malla y órdenes de discretización, siguiendo la transformación unidimensional del caso anterior 4.2.2  $T(\epsilon) = (e^{5\epsilon} - 1)/2(e^{5/2} - 1)$  si  $0 \leq \epsilon \leq 1/2$  y  $T(\epsilon) = (1 - (e^{5(1-\epsilon)} - 1))/(2(e^{5/2} - 1))$  si  $1/2 \leq \epsilon \leq 1$  para el refinamiento local en las mallas no uniformes. En este caso, la figura 4.4 ilustra los errores relativos  $L_\infty$  de las soluciones numéricas y que son listados en la tabla 4.18. Se puede apreciar que el esquema de cuarto orden y el método de segundo orden en

mallas no uniformes resultan igualmente precisos en la práctica, con una ligera ganancia de 20 % del segundo método para todos los  $N$  explorados, y que llega a ser a lo más 21,05 % en el caso de  $N = 160$ . En relación al esquema de cuarto orden, es evidente que el uso de la interpolación lineal y de bajo orden en este caso de prueba degrada de manera importante su precisión si se compara al caso de prueba de la sección anterior. Por su parte, el esquema de segundo orden no uniforme amerita de otra transformación en el refinamiento local de malla si se desea una mayor precisión respecto al esquema uniforme. El refinamiento actual permite una reducción de los errores de al menos 27 % en todos los casos de  $N$ , y que llega a ser de 28,57 % en el caso de  $N = 200$ . Sin embargo, encontrar refinamientos óptimos de malla o incluso su construcción vía técnicas automáticas no están contemplados en los objetivos de este trabajo.

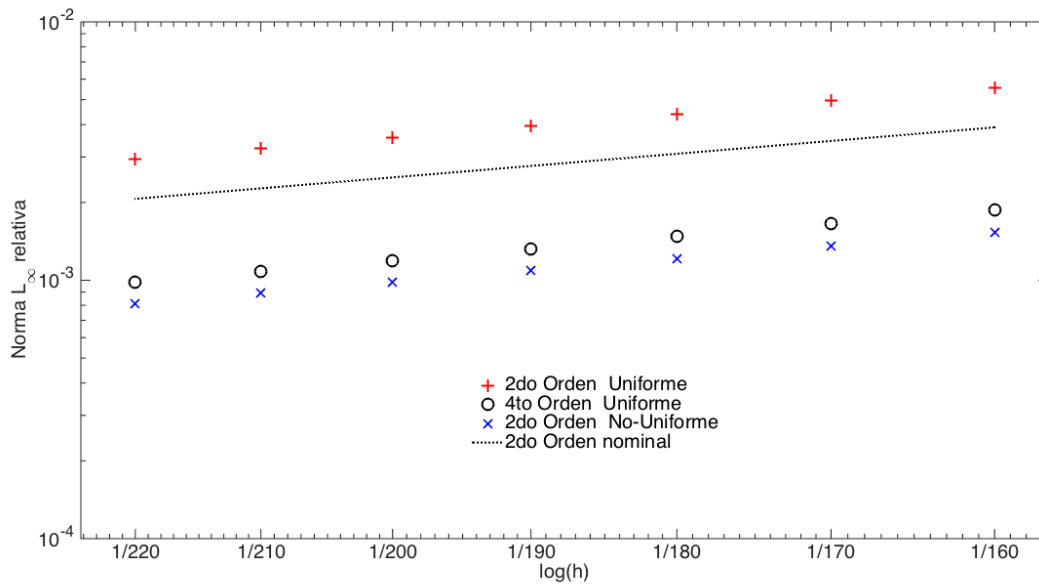


FIGURA 4.4. Ilustración de los errores relativos  $L_\infty$  de las soluciones numéricas en el caso 4.2.3

tipo \ N	160×160	170×170	180×180	190×190	200×200	210×210	220×220
uniforme 2 <sup>do</sup>	0.0055	0.0049	0.0044	0.0039	0.0035	0.0032	0.0029
uniforme 4 <sup>to</sup>	0.0019	0.0017	0.0015	0.0013	0.0012	0.0011	0.0010
no uniforme 2 <sup>do</sup>	0.0015	0.0014	0.0012	0.0011	0.0010	0.0009	0.0008

TABLA 4.18. Errores relativos  $L_\infty$  en el caso 4.2.3



La tabla 4.19 lista las tasas de convergencia estimadas de las tres familias de soluciones numéricas para este caso. En ambos tipos de mallas, las simulaciones basadas en discretizaciones de segundo orden convergen cuadráticamente a nivel experimental. De esta manera, el error inherente a la interpolación lineal de las componentes del vector flujo, no degrada la convergencia de los esquemas de segundo orden. Sin embargo, el efecto de la interpolación sí es significativo para el esquema de cuarto orden, cuyas tasas de convergencia responden a estos errores de interpolación de mayor magnitud a los errores de la diferenciación numérica. Finalmente, la tabla 4.20 presenta los tiempos de ejecución de todas estas simulaciones. Ambos esquemas bajo discretizaciones de segundo orden requieren de tiempos de ejecución muy similares en cada caso de  $N$ , y los mismos resultan inferiores a los registrados para el método de cuarto orden. Como referencia se toman las simulaciones para  $N = 220$ , donde este método de cuarto orden tarda 15 % más en ejecutarse que su contraparte uniforme con segundo orden de precisión. En vista de los errores listados en la tabla 4.18 y los tiempos de cálculo bajo observación, el refinamiento local de malla usado hace óptimo al esquema de segundo orden para este problema.

tipo \ Tasa	Tasa de convergencia
uniforme 2 <sup>do</sup>	2.01
uniforme 4 <sup>to</sup>	2.01
no uniforme 2 <sup>do</sup>	2.00

TABLA 4.19. Tasas de convergencia para los esquemas de 2<sup>do</sup> y 4<sup>to</sup> orden de precisión en el caso 4.2.3

tipo \ N	160×160	170×170	180×180	190×190	200×200	210×210	220×220
uniforme 2 <sup>do</sup>	7.5000	7.0781	8.5156	10.8594	13.7969	17.2969	21.4844
uniforme 4 <sup>to</sup>	9.3438	9.0469	10.6719	12.7344	18.2188	22.6406	24.6563
no uniforme 2 <sup>do</sup>	7.6094	7.0781	8.5000	11.2188	13.9844	17.2188	21.3594

TABLA 4.20. Tiempos de cálculo (seg) de las soluciones numéricas en el caso 4.2.3

## Conclusiones y Recomendaciones

En este trabajo, se ha presentado una formulación tensorial de los operadores miméticos en diferencias finitas gradiente, divergencia, y el operador de proyección de un campo vectorial en la frontera, propuestos originalmente por Castillo y colaboradores en [9, 8, 11]. Los nuevos operadores permiten la discretización mimética de problemas de valor de frontera bajo condiciones de borde generales tipo Robin en mallas rectangulares en dos y tres dimensiones, con un refinamiento opcional en cada una de las direcciones coordenadas. A nivel teórico, se prueba que estos operadores tensoriales satisfacen la versión mimética y multidimensional del teorema de la divergencia, al igual que sucede con los operadores originales en 1D. Posteriormente, se procede a la discretización mimética de un tipo particular de ecuaciones elípticas de segundo orden, con condiciones Robin sobre la frontera, y cuya solución es un campo escalar  $f$ . Tanto la consistencia como la estabilidad del nuevo esquema mimético son formalmente analizadas, en el caso de segundo orden de precisión. En este análisis se acota el autovalor de mínima magnitud de la matriz asociada al sistema lineal producto de la discretización mimética, lo que permite garantizar su invertibilidad, ante una amplia gama de parámetros del modelo elíptico. De esta manera, la convergencia de la discretización mimética propuesta es mostrada a nivel formal.

A nivel práctico, se muestra la flexibilidad de la formulación tensorial mediante el diseño e implementación de dos esquemas numéricos alternativos, uno con segundo orden de precisión en mallas con un refinamiento local en cada dirección coordenada, y el otro basado en operadores gradiente y divergencia con cuarto orden de precisión sobre un mallado uniforme. A continuación, estos tres esquemas numéricos son empleados en la resolución de varios problemas, y cuyas soluciones exhiben fuertes gradientes en las fronteras acorde a un parámetro manualmente calibrado. En el caso de estudio tridimensional, los tres esquemas presentaron tasas de convergencia muy cercanas a las nominales, y tanto el refinamiento local de malla como la discretización uniforme con cuarto orden de precisión, condujeron a resultados más precisos respecto al esquema uniforme de segundo orden. En los casos de estudio en dos

dimensiones, los resultados son más diversos e interesantes. En primer lugar, el problema derivado al extender a 2D el test Batista-Castillo usado en [5] corresponde a un problema de capa límite de alta dificultad. En este caso, sólo un refinamiento de malla apropiado permite que el esquema de segundo orden no uniforme genere tasas de convergencia óptimas y mayor precisión que los otros dos esquemas uniformes. En el segundo caso de estudio propuesto por Arteaga y Guevara en [4], los esquemas con segundo orden replican esta tasa de convergencia en los experimentos, pero el método de cuarto orden presenta errores menores en al menos dos órdenes de magnitud. Finalmente, se aplican estos esquemas a un problema de difusión definido para un tensor de propiedades no diagonal  $k$ , después de incorporar un mecanismo de interpolación lineal a las componentes del vector flujo  $k\nabla f$ . En este último caso, los tres esquemas exhiben una convergencia cuadrática y el esquema no uniforme resulta ligeramente más preciso. Así, la interpolación lineal degrada la precisión de la discretización de cuarto orden, como era de esperarse.

A nivel de recomendaciones, se tiene en primer lugar la extensión del mecanismo de interpolación de las componentes del vector flujo a la malla 3D centro distribuida, ya usada en este trabajo. Esta estrategia permitiría la resolución de problemas de difusión con un tensor de propiedades más general, los cuales tienen diversas aplicaciones [37, 40]. De esta manera, la flexibilidad y las propiedades de convergencia de los nuevos esquemas numéricos pueden ser evaluadas en aplicaciones de interés físico. Este mecanismo de interpolación sobre la malla centro distribuida considerada en este trabajo (con la inclusión de los puntos esquinas) permite una aproximación de todas las posibles componentes del vector flujo requeridas en mallas deformadas. Esto es, para la resolución de problemas con dominios no rectangulares, el modelo elíptico puede ser reescrito en términos de coordenadas curvilíneas y el dominio puede discretizarse mediante mallas estructuradas. Ante la transformación de coordenadas, todas las derivadas espaciales tanto de la solución escalar al problema como de las componentes del vector flujo, son necesarias en la discretización del problema de difusión en dominios no rectangulares. La malla centro distribuida y el mecanismo de interpolación presentados en este trabajo son apropiadas para estos problemas, siendo su implementación y análisis la segunda y última recomendación.

## Bibliografía

- [1] ABOUALI, M., AND CASTILLO, J. E. *Solving Poisson equation with Robin Boundary Condition on a curvilinear mesh using High Order Mimetic Discretization Methods*. Mathematics and Computers in Simulation, 2013. 4
- [2] ANDERSON, D., TANNEHILL, J. C., AND PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Third Edition*. CRC Press, 2012. 2
- [3] APPELÖ, D., AND PETERSSON, N. A. A stable finite difference method for the elastic wave equation on complex geometries with free surfaces. *Communications in Computational Physics* 5, 1 (2009), 84 – 107. 3
- [4] ARTEAGA-ARISPE, J., AND GUEVARA-JORDAN, J. M. Nuevo esquema numérico conservativo para la difusión de calor en medios bi-dimensionales no-homogéneos. *Revista de la Facultad de Ingeniería de la U.C.V.* 23, 2 (2008), 17 – 25. 56, 63
- [5] BATISTA, E. D., AND CASTILLO, J. E. Mimetic schemes on non-uniform structured meshes. *ETNA* 34 (2009), 152–162. 7, 13, 52, 63
- [6] BLANCO, J., ROJAS, O., CHACÓN, C., GUEVARA-JORDAN, J. M., AND CASTILLO, J. E. Tensor formulation of 3-D mimetic finite differences and applications to elliptic problems. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. 45 (2016), 457–475. 4, 5
- [7] CAMPBELL, J. C., HYMAN, J. M., AND SHASHKOV, M. J. Mimetic finite difference operators for second-order tensors on unstructured grids. *Computers & Mathematics with Applications* 44, 1-2 (July 2002), 157–173. 3
- [8] CASTILLO, J. E., AND GRONE, R. D. A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 25 (January 2003), 128–142. 3, 4, 7, 8, 12, 62
- [9] CASTILLO, J. E., HYMAN, J. M., SHASHKOV, M., AND STEINBERG, S. Fourth- and sixth-order conservative finite difference approximations of the divergence and gradient. *Applied Numerical Mathematics* 37, 1-2 (2001), 171 – 187. 3, 4, 5, 7, 8, 12, 62
- [10] CASTILLO, J. E., AND MIRANDA, G. F. *Mimetic Discretization Methods*. CRC Press, 2013. 1, 2, 3, 15, 16
- [11] CASTILLO, J. E., AND YASUDA, M. Linear systems arising for second-order mimetic divergence and gradient discretizations. *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms* 4 (2005), 67–82. 10.1007/s10852-004-3523-1. 3, 4, 5, 7, 11, 34, 62

- [12] CHACÓN, C. Una formulación mimética mixta para ecuaciones elípticas. Master's thesis, Universidad Central de Venezuela, 2017. 4
- [13] DA VEIGA, L. B., LIPNIKOV, K., AND MANZINI, G. *The Mimetic Finite Difference Method for Elliptic Problems*. Springer, MSA 11, 2014. 3
- [14] DE LA PUENTE, J., FERRER, M., HANZICH, M., CASTILLO, J. E., AND CELA, J. M. Mimetic seismic wave modeling including topography on deformed staggered grids. *GEOPHYSICS* 79, 3 (2014), T125–T141. 4
- [15] DEMMEL, J. W. *Applied Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997. 4, 38
- [16] DÍAZ, J. C. *Diferencias finitas compactas en mallas nodales y centro distribuidas aplicadas a la simulación de ondas acústicas*. PhD thesis, Universidad Central de Venezuela, 2017. 4
- [17] DURU, K., AND DUNHAM, E. M. Dynamic earthquake rupture simulations on nonplanar faults embedded in 3D geometrically complex, heterogeneous elastic solids. *Journal of Computational Physics* 305, Supplement C (2016), 185 – 207. 3
- [18] ELY, G. P., DAY, S. M., AND MINSTER, J. B. A support-operator method for viscoelastic wave modelling in 3-D heterogeneous media. *Geophysical Journal International* 172, 1 (2008), 331–344. 3
- [19] ELY, G. P., DAY, S. M., AND MINSTER, J.-B. A support-operator method for 3-D rupture dynamics. *Geophysical Journal International* 177, 3 (2009), 1140–1150. 3
- [20] GELIS, C., LEPAROUX, D., VIRIEUX, J., BITRI, A., OPERTO, S., AND GRANDJEAN, G. Numerical modeling of surface waves over shallow cavities. *Journal of Environmental and Engineering Geophysics* 10, 2 (2005), 111 – 121. 2
- [21] GÓMEZ-POLANCO, A., GUEVARA-JORDAN, J. M., AND MOLINA, B. A mimetic iterative scheme for solving biharmonic equations. *Mathematical and Computer Modelling* 57, 9 (2013), 2132 – 2139. System Dynamics in Project Management & Applied Mathematics and Computational Science and Engineering- Selected Papers of the Seventh PanAmerican Workshop - June 6-11 2010, Venezuela. 4
- [22] GRAVES, R. W. Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences. *Bulletin of the Seismological Society of America* 86, 4 (1996), 1091 – 1106. 2
- [23] GUEVARA-JORDAN, J. M. Sobre los esquemas miméticos de diferencias finitas para la ecuación estática de difusión. *Trabajo de Ascenso a la Categoría de Asociado* (Julio 2005). 2
- [24] GUEVARA-JORDAN, J. M., ROJAS, S., FREITES, M., AND CASTILLO, J. E. Convergence of a mimetic finite difference method for static diffusion equations. *Advances in Difference Equations* 1 (2007), 1–12. 4, 5, 11, 34
- [25] GUEVARA-JORDAN, J. M., ROJAS, S., FREITES, M., AND CASTILLO, J. E. *A Second Order Mimetic Approach for Tracer Flow in Oil Reservoirs*. Society of Petroleum Engineers, Proceedings from X Latin American and Caribbean Petroleum Engineering Conference, 2007. 4
- [26] GYRYA, V., AND LIPNIKOV, K. High-order mimetic finite difference method for diffusion problems on polygonal meshes. *Journal of Computational Physics* 227, 20 (2008), 8841 – 8854. 3

- [27] HABERMAN, R. *Elementary Applied Partial Differential Equations: With Fourier Series And Boundary Value Problems*. Prentice Hall, 1983. 1, 2
- [28] HERNÁNDEZ, F. F., CASTILLO, J. E., AND LARRAZABAL, G. A. Large sparse linear systems arising from mimetic discretization. *Computers and Mathematics with Applications* 53, 1 (2007), 1–11. 4, 40
- [29] HYMAN, J. M., MOREL, J., SHASHKOV, M., AND STEINBERG, S. Mimetic finite difference methods for diffusion equations. *Computational Geosciences* 6, 3 (2002), 333–352. 3
- [30] HYMAN, J. M., AND SHASHKOV, M. Adjoint operators for the natural discretizations of the divergence, gradient and curl on logically rectangular grids. *Applied Numerical Mathematics* 25, 4 (1997), 413–442. 3
- [31] HYMAN, J. M., AND SHASHKOV, M. Natural discretizations for the divergence, gradient, and curl on logically rectangular grids. *Computers & Mathematics with Applications* 33, 4 (1997), 81 – 104. 3
- [32] HYMAN, J. M., AND SHASHKOV, M. Mimetic discretizations for Maxwell’s equations. *Journal of Computational Physics* 151, 2 (1999), 881 – 909. 3
- [33] HYMAN, J. M., AND SHASHKOV, M. Mimetic finite difference methods for Maxwell’s equations and the equations of magnetic diffusion. *Progress In Electromagnetics Research* 32 (2001), 89–121. 3
- [34] JUSTO, D. *High Order Mimetic Methods and Absorbing Boundary Conditions*. VDM Verlag, 2009. 3
- [35] KOZDON, J. E., DUNHAM, E. M., AND NORDSTRÖM, J. Simulation of dynamic earthquake ruptures in complex geometries using high-order finite difference methods. *Journal of Scientific Computing* 55, 1 (2013), 92–124. 3
- [36] KREISS, H.-O., AND SCHERER, G. Finite element and finite difference methods for hyperbolic partial differential equations. In *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations* (1974), no. 33 in Publ. Math. Res. Center Univ. Wisconsin, Academic Press, pp. 195–212. 3
- [37] LEE, S. H., DURLOFSKY, L. J., LOUGH, M. F., AND & CHEN, W. H. Finite difference simulation of geologically complex reservoirs with tensor permeabilities. *SPE Reservoir Simulation Symposium, 8-11 June, Dallas, Texas* (1997). 63
- [38] LEVEQUE, R. J. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2007. 1, 36
- [39] LIPNIKOV, K., MANZINI, G., AND SHASHKOV, M. Mimetic finite difference method. *J. Comput. Phys.* 257 (Jan. 2014), 1163–1227. 2, 3
- [40] LIPNIKOV, K., SHASHKOV, M., AND SVYATSKIY, D. The mimetic finite difference discretization of diffusion problem on unstructured polyhedral meshes. *J. Comput. Phys.* 211, 2 (Jan. 2006), 473–491. 63
- [41] MANNARINO, I. Un método mimético de diferencias finitas para la ecuación no estática de difusión. Master’s thesis, Universidad Central de Venezuela, 2007. 4

- [42] MOCZO, P., ROBERTSSON, J. O. A., AND EISNER, L. The finite-difference time-domain method for modeling of seismic wave propagation. In *Advances in Wave Propagation in Heterogenous Earth*, R.-S. Wu, V. Maupin, and R. Dmowska, Eds., vol. 48 of *Advances in Geophysics*. Elsevier, 2007, pp. 421 – 516. 2
- [43] NIEVES, A., ROJAS, O., AND DAY, S. Finite difference modeling of rupture propagation under velocity-dependent and thermal weakening processes. *Memorias del XII Congreso internacional de métodos numéricos en ingeniería y ciencias aplicadas* (2014), 136 – 141. 4
- [44] OLSSON, P. Summation by parts, projections, and stability. i. *Mathematics of Computation* 64 (1995), 1035–1065. 3
- [45] OLSSON, P. Summation by parts, projections, and stability. ii. *Mathematics of Computation* 64 (1995), 1473–1493. 3
- [46] OTERO, B., FRANCÉS, J., RODRIGUEZ, R., ROJAS, O., SOLANO-FEO, F., AND GUEVARA-JORDAN, J. M. A performance analysis of a mimetic finite difference scheme for acoustic wave propagation on gpu platforms. *Concurrency and Computation: Practice and Experience* 29, 4 (2017), e3880–n/a. e3880 cpe.3880. 4
- [47] ROJAS, O., DAY, S., CASTILLO, J. E., AND DALGUER, L. A. Modelling of rupture propagation using high-order mimetic finite differences. *Geophysical Journal International* 172, 2 (2008), 631–650+. 4
- [48] ROJAS, O., OTERO, B., CASTILLO, J. E., AND DAY, S. M. Low dispersive modeling of Rayleigh waves on partly staggered grids. *Computational Geosciences* 18, 1 (2014), 29–43. 2, 4
- [49] RUNYAN, J. B. A novel higher order finite difference time domain method based on the Castillo-Grone mimetic curl operator with applications concerning the time-dependent Maxwell equations. Master’s thesis, San Diego State University, 2011. 4, 5, 15
- [50] SANCHEZ, E. J., PAOLINI, C., BLOMGREN, P., AND CASTILLO, J. E. Algorithms for higher-order mimetic operators. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering* (dec 2015). 4
- [51] SANCHEZ, E. J., PAOLINI, C., AND CASTILLO, J. E. The Mimetic Methods Toolkit: An object-oriented API for Mimetic Finite Differences. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 270, 0 (2014), 308?322. Fourth International Conference on Finite Element Methods in Engineering and Sciences (FEMTEC 2013). 5
- [52] SHASHKOV, M., AND STEINBERG, S. Support-operator finite-difference algorithms for general elliptic problems. *J. Comput. Phys.* 118 (April 1995), 131–151. 3
- [53] SHASHKOV, M., AND STEINBERG, S. *Conservative finite-difference methods on general grids*. No. v. 1 in Symbolic and numeric computation series. CRC Press, 1996. 2
- [54] SHASHKOV, M., AND STEINBERG, S. Solving diffusion equations with rough coefficients in rough grids. *Journal of Computational Physics* 129 (1996), 383–405. 3
- [55] SHRAGGE, J., AND TAPLEY, B. Solving the tensorial 3D acoustic wave equation: A mimetic finite-difference time-domain approach. *GEOPHYSICS* 82, 4 (2017), T183–T196. 4

- [56] SOLANO-FEO, F. Un esquema mimético en diferencias finitas para la ecuación de onda acústica. Master's thesis, Universidad central de Venezuela, 2016. 4
- [57] SOLANO-FEO, F., GUEVARA-JORDAN, J. M., GONZÁLEZ-RAMIREZ, C., ROJAS-ULACIO, O., AND OTERO-CALVINYO, B. Modeling seismic wave propagation using staggered-grid mimetic finite differences. *Bulletin of Computational Applied Mathematics* 5, 2 (2017), 9–28. 4, 5
- [58] SOLANO-FEO, F., GUEVARA-JORDAN, J. M., ROJAS, O., OTERO, B., AND RODRIGUEZ, R. A new mimetic scheme for the acoustic wave equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 295 (2016), 2 – 12. VIII Pan-American Workshop in Applied and Computational Mathematics. 4, 5, 15
- [59] SPIEGEL, M. R. *Calculus of Finite Differences and Differences Equations*. Schaum Outline Series, McGraw Hill, 1994. 4
- [60] STRAND, B. Summation by parts for finite difference approximations for  $d/dx$ . *J. Comput. Phys.* 110 (January 1994), 47–67. 3
- [61] STRIKWERDA, J. C. *Finite difference schemes and partial differential equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2004. 1
- [62] TANNEHILL, J., DALE, A., AND PLETCHER, R. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Second Edition*. Taylor & Francis, 1997. 19
- [63] VU, H., AND CASTILLO, J. E. Mimetic discretization of elliptic PDE with full tensor coefficients. *Research reports San Diego State University* (2006). 41