

UN ANÁLISIS COMPARATIVO DEL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS Y EL
MÉTODO MIMÉTICO PARA LA ECUACIÓN DE CONVECCIÓN DIFUSIÓN
UNIDIMENSIONAL.

SERGIO ANDRÉS RIVERA ANTOLINEZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE MATEMÁTICAS
BUCARAMANGA
2024

UN ANÁLISIS COMPARATIVO DEL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS
Y EL MÉTODO MIMÉTICO PARA LA ECUACIÓN DE CONVECCIÓN
DIFUSIÓN UNIDIMENSIONAL.

SERGIO ANDRÉS RIVERA ANTOLINEZ

Trabajo de Grado para optar al título de
Pregrado en Matemática

Director:

Julio Cesar Carrillo Escobar
Ph.D. en Matemáticas

Co-director:

Giovanni Ernesto Calderón Silva
Ph.D. en Matemáticas

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE MATEMÁTICAS
BUCARAMANGA

2024

Agradecimientos

Agradezco a los profesores Julio Cesar Carrillo Escobar y Giovanni Ernesto Calderón Silva por su apoyo, tiempo y explicaciones brindadas para la realización de este trabajo. A mi madre, padre, hermana, tia, abuela, hijo, pareja, amigos y compañeros por el apoyo durante este camino.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	12
1. El problema de convección-difusión estacionario	16
1.1. Análisis de la solución analítica del problema conservativo	19
2. Métodos de diferencias finitas	23
2.1. Malla en Diferencias Finitas	25
2.2. Discretización de los operadores diferenciales	25
2.3. Esquemas en diferencias finitas para el problema modelo	30
2.3.1. Esquema de diferencias finitas centrales de segundo orden (DFC)	33
2.3.2. Esquema <i>Upwind</i> de segundo orden	33
2.3.3. Esquema QUICK (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics)	34
2.3.4. Esquema θ de segundo orden	35
2.4. Errores global y local	36
2.4.1. Error de truncamiento local (LTE)	39
2.4.2. Error global	40
2.5. Análisis de los esquemas	41
2.5.1. Estabilidad	41
2.5.2. Consistencia	43
2.5.3. Convergencia	43
3. Los métodos de discretización miméticos	46
3.1. Definiciones básicas	48

3.2. Operadores miméticos unidimensionales de segundo orden: Gradiente y Divergencia	50
3.3. Versión semidiscreta del teorema de Green-Stokes-Gauss	58
3.4. Concepto de esquema mimético	63
3.5. Versión discreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss	64
3.6. Ley de conservación	69
3.7. Consistencia	70
3.8. Esquema mimético para la ecuación de convección-difusión en régimen estacionario	72
4. Análisis de Convergencia	75
4.1. Problema: La ecuación de Poisson unidimensional	75
4.2. Esquema mimético propuesto	76
4.3. Esquema Conservativo Asociado	79
4.4. Relación Matricial entre Esquemas	82
4.5. Convergencia del esquema conservativo asociado	84
4.6. Análisis de la Perturbación	87
4.7. Convergencia esquema mimético	89
5. Resultados numéricos	93
5.1. Esquemas numéricos	95
5.2. Ejemplo 1.	99
BIBLIOGRAFÍA	106

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Solución analítica de (5): Izquierda: con $v = k$, $C_0 = 0$, $C_1 = 1$, $L = 1$. Centro: con $v \ll k$ y $\alpha = 0$ (Solución del problema: $-d^2u/dx^2 = 0$). Derecha: con $v \gg k$.	21
Figura 2. Varias aproximaciones a $f'(x_0)$ interpretada como la pendiente de rectas secantes	29
Figura 3. Malla escalonada unidimensional utilizada por los métodos miméticos.	51
Figura 4. Discretización de los operadores gradiente y divergencia en la malla unidimensional escalonada (staggered mesh).	52
Figura 5. Ejemplo 1. Comportamiento del orden de convergencia de los esquemas MDM y DF para $k = 1$ y $v = 300$. Se utilizan discretizaciones del dominio con 40, 80, 120, 160, 200, 400 y 600 celdas. Condiciones de frontera Dirichlet.	101
Figura 6. Ejemplo 1. Comportamiento del orden de convergencia en norma l_1 de los esquemas MDM y DF para $k = 10$ y $v = 0.1$. El zoom sobre la gráfica muestra los menores errores alcanzados. Condiciones de frontera Dirichlet.	102
Figura 7. Ejemplo 1. Comportamiento del orden de convergencia de los esquemas MDM y DF para $k = 150$ y $v = 1$. Se utilizan discretizaciones del dominio con 40, 80, 120, 160, 200, 400 y 600 celdas. Condiciones de frontera tipo Robin.	104

Figura 8. Ejemplo 1. Soluciones aproximadas y exactas para $k = 150$ y $v = 1$. Error absoluto distribuido en el dominio para la discretización de 600 celdas.

104

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Ejemplo 1. Errores en norma $\ \cdot \ _1$ para distintos valores de k (difusión) y v (velocidad). Se divide el dominio $[0, 1]$ en 600 celdas y se definen condiciones de frontera Dirichlet.	100
Tabla 2. Ejemplo 1. Errores en norma $\ \cdot \ _1$ para distintos valores de k (difusión) y v (velocidad). Se divide el dominio $[0, 1]$ en 600 celdas usando condiciones de frontera tipo Robin.	103

RESUMEN

TÍTULO: UN ANÁLISIS COMPARATIVO DEL MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS Y EL MÉTODO MIMÉTICO PARA LA ECUACIÓN DE CONVECCIÓN DIFUSIÓN UNIDIMENSIONAL *

AUTOR: SERGIO ANDRÉS RIVERA ANTOLINEZ **

PALABRAS CLAVE: MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS, MÉTODO MIMÉTICO, ECUACIÓN DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN, ANÁLISIS COMPARATIVO, ESTABILIDAD NUMÉRICA, CONVERGENCIA, NÚMERO DE PECLLET.

DESCRIPCIÓN:

Este trabajo presenta un análisis comparativo entre el método de diferencias finitas (DF) y el método mimético aplicado a la ecuación de convección-difusión unidimensional en régimen estacionario. Los métodos numéricos son fundamentales para resolver ecuaciones diferenciales parciales que surgen en diversas aplicaciones científicas e ingenieriles. A lo largo del documento, se implementan y comparan varios esquemas en diferencias finitas, entre ellos el esquema de diferencias finitas centrales de segundo orden, el esquema Upwind de segundo orden, el esquema QUICK y el esquema θ de segundo orden. Estos se contrastan con el método mimético, que utiliza versiones discretas de operadores diferenciales conservativos. El análisis se enfoca en evaluar la estabilidad, consistencia y convergencia de los esquemas numéricos, observando su comportamiento bajo distintas condiciones de frontera y valores del número de Peclet. Además, se examina la capacidad de estos métodos para manejar problemas de flujo dominado por la convección sin generar oscilaciones numéricas. Los resultados obtenidos muestran las ventajas y limitaciones de cada enfoque, destacando el potencial del método mimético en la resolución de problemas con regímenes complejos.

* Trabajo de grado

** Escuela de Matemáticas. Facultad de Ciencias. Universidad Industrial de Santander. Director: Julio Cesar Carrillo Escobar.

ABSTRACT

TITLE: A COMPARATIVE ANALYSIS OF THE FINITE DIFFERENCE METHOD AND THE MIMETIC METHOD FOR THE ONE-DIMENSIONAL CONVECTION-DIFFUSION EQUATION *

AUTHOR: SERGIO ANDRÉS RIVERA ANTOLINEZ **

KEYWORDS: FINITE DIFFERENCE METHOD, MIMETIC METHOD, CONVECTION-DIFFUSION EQUATION, COMPARATIVE ANALYSIS, NUMERICAL STABILITY, CONVERGENCE, PECLET NUMBER.

DESCRIPTION:

This work presents a comparative analysis between the finite difference method (FD) and the mimetic method applied to the one-dimensional steady-state convection-diffusion equation. Numerical methods are essential for solving partial differential equations that arise in various scientific and engineering applications. Throughout this document, several finite difference schemes are implemented and compared, including the second-order central difference scheme, the second-order upwind scheme, the QUICK scheme, and the second-order θ scheme. These are contrasted with the mimetic method, which employs discrete versions of conservative differential operators.

The analysis focuses on evaluating the stability, consistency, and convergence of the numerical schemes, observing their behavior under different boundary conditions and Peclet number values. Additionally, the ability of these methods to handle convection-dominated flow problems without generating numerical oscillations is examined. The results obtained highlight the advantages and limitations of each approach, underscoring the potential of the mimetic method in solving problems with complex regimes.

* Bachelor Thesis

** Mathematics School. Faculty of Sciences. Universidad Industrial de Santander. Director: Julio Cesar Carrillo Escobar.

INTRODUCCIÓN

Los métodos numéricos son herramientas esenciales para la resolución aproximada de problemas provenientes de aplicaciones en ingeniería, ciencias básicas y otras disciplinas. Muchos de estos problemas se modelan a través de ecuaciones diferenciales parciales (EDP), cuya solución exacta es a menudo imposible de obtener debido a la complejidad de los sistemas que describen. En estos casos, se recurre a esquemas numéricos para obtener soluciones aproximadas. Entre los métodos más utilizados para discretizar y resolver estas ecuaciones se encuentran el método de diferencias finitas (DF), el método de elementos finitos (MEF) y el método de volúmenes finitos (VF).

A lo largo de los años, se han desarrollado y adaptado otros métodos para superar las limitaciones de los métodos clásicos. Uno de estos métodos son los esquemas conocidos como métodos miméticos^{1 2 3}. Dentro de estos esquemas, destacan los desarrollados por Castillo et al.^{4 5}, los cuales son conocidos como métodos de discretización miméticos (MDM). Estos esquemas se formulan a partir de versiones

¹ Mikhail Shashkov y Stanly Steinberg. "Support-Operator Finite-Difference Algorithms for General Elliptic Problems". En: *Journal of Computational Physics* 118.1 (1995), págs. 131-151.

² James M. Hyman y Mikhail Shashkov. "The Approximation of Boundary Conditions for Mimetic Finite Difference Methods". En: *Computers Math. Applic.* 36.5 (1998), págs. 79-99.

³ James M. Hyman, Mikhail Shashkov y S. Steinberg. "Mimetic Finite Difference Methods for Diffusion Equations". En: *Computers Math. Applic.* 6.3-4 (2002), págs. 333-352.

⁴ J.E. Castillo y R. D. Grone. "A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law". En: *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 25.1 (2003), págs. 128-142.

⁵ J.E. Castillo y Mark Yasuda. "Linear Systems Arising for Second-Order Mimetic Divergence and Gradient Discretizations". En: *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms* 4.1 (2005), págs. 67-82.

discretas de los operadores de divergencia, gradiente y rotacional, comúnmente empleados en la definición de EDP. Los operadores discretos imitan algunas propiedades fundamentales de sus contrapartes continuas, resultando en esquemas conservativos y manteniendo el orden de convergencia en todos los nodos del dominio discreto; se hace referencia a ellos como operadores miméticos. Se ha observado que los esquemas numéricos basados en estos operadores ofrecen ventajas significativas en comparación con los esquemas clásicos de DF al resolver una variedad de problemas en ingeniería y ciencias. Estos problemas abarcan áreas como propagación de ondas, estudios sísmicos, fluidos, fenómenos térmicos, reacciones químicas, electrodinámica y procesamiento de imágenes^{6 7 8}.

El desarrollo de métodos numéricos para la ecuación de convección-difusión, en particular, ha sido un área de intenso estudio durante más de cuatro décadas, debido a los desafíos que presenta. Estos incluyen inestabilidad numérica y la aparición de oscilaciones no físicas cuando el número de Péclet es alto. En este trabajo, se presentan varios esquemas de diferencias finitas, que serán comparados con el método mimético para el problema estacionario de convección-difusión unidimensional.

Los esquemas de diferencias finitas analizados incluyen:

- **Esquema de diferencias finitas centrales de segundo orden (DFC):** Es un esquema ampliamente utilizado por su simplicidad y precisión moderada

⁶ J.M. Guevara, M. Freites y J.E. Castillo. "A New Second Order Finite Difference Conservative Scheme". En: *Divulgaciones Matemáticas* 13.1 (2005), págs. 107-122.

⁷ F. Solano-Feo et al. "A new mimetic scheme for the acoustic wave equation". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 295 (2016). VIII Pan-American Workshop in Applied and Computational Mathematics, págs. 2-12.

⁸ L.J. Córdova et al. "Compact finite difference modeling of 2-D acoustic wave propagation". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 295 (2016). VIII Pan-American Workshop in Applied and Computational Mathematics, págs. 83-91.

en casos donde la convección y la difusión están equilibradas. En ⁹ discuten ampliamente los esquemas de diferencias finitas, incluyendo los métodos de segundo orden y sus aplicaciones en la ecuación de convección-difusión.

- **Esquema Upwind de segundo orden:** Este esquema mejora la estabilidad en problemas dominados por la convección, a costa de una mayor dispersión numérica. En el texto ¹⁰ se da una explicación clara de los esquemas Upwind, incluyendo la versión de segundo orden, y su importancia en problemas de flujo con convección dominante.
- **Esquema QUICK (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics):** Es un esquema que busca reducir la difusión numérica sin introducir oscilaciones significativas. En ¹¹ se define el esquema QUICK, y es una referencia en la literatura de métodos numéricos para resolver ecuaciones de convección-difusión.
- **Esquema θ de segundo orden:** Un esquema híbrido que combina aproximaciones centradas y upwind, permitiendo ajustar el parámetro θ para mejorar la precisión dependiendo del régimen del flujo. En ¹² se proporciona una explicación clara de los esquemas implícitos y su relación con los métodos θ , incluyendo aplicaciones a ecuaciones de segundo orden.

⁹ Randall J LeVeque. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. SIAM, 2007.

¹⁰ John David Anderson y John Wendt. *Computational fluid dynamics*. Vol. 206. Springer, 1995.

¹¹ Brian P Leonard. "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation". En: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 19.1 (1979), págs. 59-98.

¹² Gordon D Smith. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*. Oxford university press, 1985.

Cada uno de estos esquemas será implementado y comparado en términos de su precisión, estabilidad y eficiencia para diferentes condiciones de frontera y valores del número de Péclet. El análisis incluirá tanto condiciones de frontera tipo Dirichlet como Robin, con el objetivo de proporcionar una comparación exhaustiva entre los métodos de diferencias finitas y el método mimético.

El resto de este trabajo está organizado de la siguiente manera. En el primer capítulo, se introduce el problema de valor de frontera que se utiliza como modelo para el análisis. En el segundo capítulo, se describen los métodos numéricos y los esquemas en diferencias finitas seleccionados. En el tercer capítulo, se presenta el esquema mimético para la ecuación de convección-difusión. A continuación, en el cuarto capítulo, se realiza el análisis de convergencia de ambos enfoques. Finalmente, en el quinto capítulo, se muestran los resultados numéricos y las conclusiones obtenidas.

1. El problema de convección-difusión estacionario

Las ecuaciones diferenciales parabólicas aparecen en muchos campos de las ciencias y la ingeniería en problemas tales como la transferencia de calor y el flujo de fluidos¹³. Una clase muy importante de estos problemas es el de convección-difusión estacionario, el cual es esencial en la ingeniería y ciencias aplicadas, ya que modela el transporte de solutos en fluidos, siendo relevante tanto en procesos naturales como industriales. En la naturaleza, este fenómeno se observa en el transporte de contaminantes en cuerpos de agua y la difusión de nutrientes en ecosistemas, mientras que en la industria es crucial para el diseño de procesos como la separación química y la conservación de alimentos. La formulación matemática del problema permite predecir la concentración de solutos bajo diversas condiciones, facilitando decisiones informadas para la gestión ambiental¹⁴.

La ecuación diferencial que gobierna el transporte de solutos en un fluido bajo la ley de Fick¹⁵ está dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (v u) = \nabla \cdot (K \nabla u) + f, \quad (1)$$

donde $u(, t)$ representa la concentración de soluto por unidad de volumen de fluido, $v(, t)$ es el campo de velocidad del fluido, K es el tensor de difusión molecular, y f

¹³ Alexandre J Chorin, Jerrold E Marsden et al. "A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics [electronic resource]". En: (); Bertil Gustafsson. *High order difference methods for time dependent PDE*. Vol. 38. Springer Science & Business Media, 2007; Michael E Taylor et al. *Partial differential equations III*. Vol. 2. Springer, 1996.

¹⁴ William F Ames. *Numerical methods for partial differential equations*. Academic press, 2014.

¹⁵ Adolf Fick (nace en Kassel, Alemania, el 03/09/1829 - muere en Blankenberge, Bélgica, el 21/08/1901).

es un término fuente o sumidero que puede variar en función del problema físico. En la mayoría de los casos, la difusión en fluidos libres se modela como isotrópica, lo que significa que el tensor de difusión K es un múltiplo de la matriz identidad. Esto simplifica la ecuación de la siguiente manera:

$$K = k I, \quad (2)$$

donde k es un coeficiente escalar positivo conocido como *coeficiente de difusión*. La magnitud numérica del coeficiente de difusión indica la facilidad para la transferencia de masa; es decir, a mayor magnitud mayor transferencia de masa.

Para formular un problema bien planteado en términos de ecuaciones diferenciales, es necesario completar el modelo incorporando condiciones iniciales y de frontera:

- **Condiciones iniciales:**

$$u(, 0) = u_0(),$$

que representa la concentración inicial del soluto en el fluido en el tiempo $t = 0$.

- **Condiciones de frontera:** Dependiendo de la naturaleza del problema, se pueden imponer diferentes tipos de condiciones de frontera:

- **Condiciones tipo Dirichlet:**

$$u(, t) = g(),$$

que especifica los valores fijos para la concentración, $u(, t)$, en los bordes del dominio.

- **Condiciones de tipo Neumann:**

$$\nabla u(, t) \cdot \mathbf{n} = g(),$$

que describen el flujo normal de soluto en las fronteras.

- **Condiciones tipo Robin:**

$$a() u(, t) + b() \nabla u(, t) \cdot \nu = \gamma(),$$

una combinación lineal de las dos anteriores.

Cuando v es variable o $\frac{\partial u}{\partial t} \neq 0$, el problema se complica por dos factores principales:

- **Velocidad variable:** Si v depende de x o t , el término de convección deja de ser constante, lo que genera ecuaciones potencialmente no lineales y fenómenos de transporte complejos, requiriendo métodos numéricos avanzados.
- **Régimen transitorio:** Cuando $\frac{\partial u}{\partial t} \neq 0$, la solución depende del tiempo, exigiendo discretización temporal y condiciones iniciales. Esto introduce restricciones de estabilidad y aumenta el costo computacional al acoplar las discretizaciones en tiempo y espacio.

En este trabajo, se considera un caso simplificado en el que la velocidad v es constante, independiente tanto del tiempo como de la posición, y el problema se analiza en su régimen **estacionario** (es decir, cuando $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$). Bajo estas suposiciones, la ecuación de convección-difusión se reduce a:

$$-k \nabla^2 u + v \nabla \cdot u = f, \tag{3}$$

conocida como ecuación de **advección-difusión en estado estacionario**. En casos generales, cuando $f \neq 0$, se denomina **ecuación de advección-difusión-reacción** en estado estacionario.

Para facilitar aún más el análisis, se considera el caso **unidimensional** definido sobre el dominio $\Omega = [0, L]$, con $L > 0$ dado, y condiciones de frontera tipo Dirichlet

o Robin. Así, el **problema modelo a trabajar en esta tesis** queda formulado como:

$$\left\{ \begin{array}{l} -k \frac{d^2 u}{dx^2} + v \frac{du}{dx} = f \quad \text{en } \Omega = (0, L). \\ \alpha_0 u(0) - \beta_0 u'(0) = C_0, \quad \text{(condición de frontera izquierda),} \\ \alpha_L u(L) + \beta_L u'(L) = C_1, \quad \text{(condición de frontera derecha),} \end{array} \right. \quad (4)$$

donde $\alpha_0, \alpha_L, \beta_0, \beta_L, C_0$ y C_1 son parámetros reales que determinan las condiciones de frontera. Dependiendo de sus valores, estas condiciones pueden ser de Dirichlet, Neumann o Robin.

Aunque en muchos casos es posible obtener soluciones analíticas del problema de valor de frontera (4), la resolución numérica del problema resulta especialmente útil para visualizar y analizar los resultados. Para ciertos escenarios, el problema se simplificará aún más, considerando el caso conservativo ($f \equiv 0$) y condiciones de frontera Dirichlet, $u(0) = C_0$ y $u(L) = C_1$. Así, el problema queda dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} -k \frac{d^2 u}{dx^2} + v \frac{du}{dx} = 0 \quad \text{en } \Omega = (0, L). \\ u(0) = C_0, \quad u(L) = C_1. \end{array} \right. \quad (5)$$

1.1. Análisis de la solución analítica del problema conservativo

La solución de esta ecuación (5) puede obtenerse resolviendo la ecuación característica asociada, la cual es:

$$r(-kr + v) = 0,$$

cuyas raíces son $r_1 = 0$ y $r_2 = v/k$. Por lo tanto, la solución general de la ecuación diferencial es:

$$u(x) = K_1 + K_2 e^{vx/k}.$$

Aplicando las condiciones de frontera $u(0) = C_0$ y $u(L) = C_1$, se determinan las constantes K_1 y K_2 :

$$K_1 = \frac{C_1 - C_0 e^{vL/k}}{1 - e^{vL/k}}, \quad K_2 = \frac{C_0 - C_1}{1 - e^{vL/k}},$$

obteniéndose la solución específica para cada configuración del problema. Esta solución se puede expresar como:

$$u(x) = C_0 - K_2 + K_2 e^{vx/k} \Rightarrow \frac{u(x) - C_0}{C_1 - C_0} = \frac{1 - e^{vx/k}}{1 - e^{vL/k}} \quad \text{para todo } x \in \Omega,$$

donde la función $u(x)$ nos indica el grado de concentración de la partícula en la posición x .

Tomando en cuenta que la solución anterior queda dada en términos de v y k , los coeficientes de advección y difusión, respectivamente, se deben considerar los tres casos siguientes:

1. Sea $v/k = 1$; es decir, la velocidad de las partículas es igual a la capacidad que tienen para difundirse en el medio. Entonces la solución se convierte en

$$\frac{u(x) - C_0}{C_1 - C_0} = \frac{1 - e^x}{1 - e} \quad \text{para todo } x \in \Omega.$$

Sin ninguna pérdida de generalidad se puede suponer que $L = 1$, $C_0 = 0$ y $C_1 = 1$. Por lo tanto,

$$u(x) = \frac{1 - e^x}{1 - e},$$

cuya gráfica se ilustra en la Figura 1 (izquierda).

2. Sea $v/k \ll 1$, en este caso la difusión de las partículas es mucho mayor que su velocidad con la cual se mueven. Considerando los mismos valores de L ,

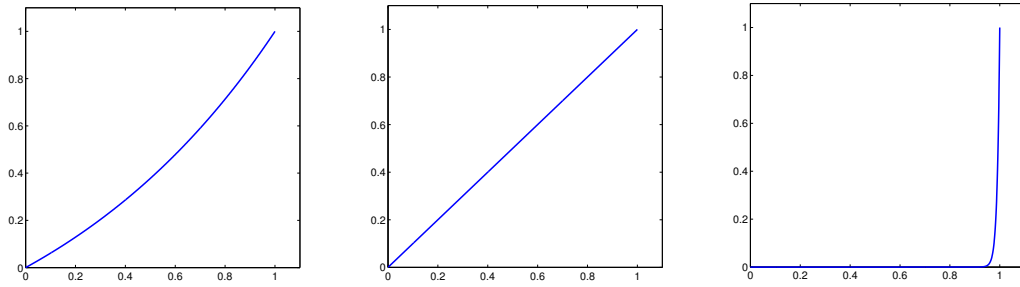


Figura 1. Solución analítica de (5): Izquierda: con $v = k$, $C_0 = 0$, $C_1 = 1$, $L = 1$. Centro: con $v \ll k$ y $\alpha = 0$ (Solución del problema: $-d^2u/dx^2 = 0$). Derecha: con $v \gg k$.

C_0 y C_1 usados en el caso anterior y definiendo $\alpha = \frac{v}{k}$, se tiene que

$$u(x) = \frac{1 - e^{\alpha x}}{1 - e^{\alpha}}.$$

Como $\alpha \ll 1$, la solución queda indeterminada cuando $\alpha = 0$. Sin embargo, cuando $\alpha \rightarrow 0$ se tiene que $\lim_{\alpha \rightarrow 0} u(x) = x$ para todo $x \in \Omega$, la cual es una línea recta interpolando los valores de la frontera (Ver Figura 1 (centro)).

3. Sea $v/k \gg 1$, en este caso las partículas se mueven a una velocidad mucho mayor que con la que se difunden. Como los términos exponenciales alcanzan valores grandes, la solución $u(x)$ tiende a

$$u(x) = \frac{1 - e^{\alpha x}}{1 - e^{\alpha}} \rightarrow \frac{e^{\alpha x}}{e^{\alpha}} = e^{-\alpha(1-x)}.$$

Como el exponente es grande y negativo, se tiene que la solución está muy cercana a cero en una vecindad del cero, y muy cercana a uno en una vecindad muy pequeña alrededor del uno, de tal forma que la solución alcanza el valor 1 con un comportamiento exponencial (Figura 1 (derecha)).

En cada uno de estos casos, la forma de la solución refleja diferentes fenómenos

físicos que nos permiten entender cómo la relación entre advección y difusión influye en la propagación de los solutos en el fluido. El análisis hecho nos ilustra la importancia que tiene el cociente de v y k en el comportamiento de la solución. A partir de este cociente se da la siguiente definición.

Definición 1.1.1 (Número de Péclet). El número de Péclet¹⁶ es un número adimensional que relaciona la velocidad de advección de un flujo y la velocidad de difusión, habitualmente difusión térmica. El número global de Péclet se define como $P_g := |v|L/(2k)$, donde L representa el tamaño del dominio. El número local de Péclet se define como $P_e := |v|h/(2k)$, donde h representa el tamaño del subintervalo (elemento) de la partición del dominio.

En mecánica de fluidos, la importancia del número de Péclet radica esencialmente en que a través de él se puede hacer un análisis de la relación que existe entre los términos advectivo y difusivo. El comportamiento de la solución obtenida a partir de métodos numéricos depende del tamaño de los términos advectivo y difusivo; cuando hay advección, a partir del número de Péclet se puede hacer el análisis de los problemas de inestabilidad de la solución numérica.

¹⁶ Jean Claude Eugène Péclet (nace en Besançon, Francia, el 10/02/1793 - muere en Paris, Francia, el 06/12/1857).

2. Métodos de diferencias finitas

Los métodos numéricos utilizados, frecuentemente se definen utilizando técnicas de discretización e interpolación. Estos métodos sustituyen la ecuación diferencial por un sistema de ecuaciones algebraicas cuyas incógnitas son los valores nodales de las variables principales. Los métodos mas utilizados para obtener la solución numérica son: el *Método de Diferencias Finitas*, el *Método de Elementos Finitos* y el *Método de Volúmenes Finitos*.

Como se dijo previamente, para el presente trabajo se estudiarán diferentes tipos de esquemas basados en el *Método de Diferencias Finitas*, junto con un nuevo esquema numérico basado también en diferencias finitas conocido como *Método de Diferencias Miméticas*. Por tanto, a continuación se abordarán los conceptos fundamentales para esquemas en diferencias finitas y se definen los esquemas a estudiar. Se deja para el próximo capítulo el estudio de los esquemas en diferencias miméticas.

El método de diferencias finitas es un método de carácter general que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales definidas en dominios finitos. Probablemente es el primer método numérico utilizado en la resolución de problemas en dinámica de fluidos y transferencia de calor, así como en problemas electromagnéticos; existe documentación en la que se menciona que Gauss utilizó este método. Su uso se generalizó con la aparición de los primeros ordenadores y la bibliografía sobre el mismo es abundante, especialmente en relación con el análisis de guías de ondas.

Este método obtiene una solución aproximada de las ecuaciones diferenciales definidas en un dominio o región de trabajo. En dicho dominio estarán definidas las condiciones de contorno o frontera y las condiciones iniciales que marcarán el pun-

to de partida en la solución de problemas concretos.

El primer paso para la aplicación del método es definir el dominio donde ha de calcularse el valor de la función incógnita a resolverse. Dicho dominio, que en este caso particular será unidimensional, se discretiza en un número variable de puntos formando una malla. Estos puntos son llamados nodos. La aplicación del método de diferencias finitas sobre el dominio dará como resultado conocer el valor de la función incógnita en cada uno de esos nodos. El número y disposición de los nodos depende de la exactitud que se desea en las soluciones.

El método aproxima a la función incógnita en cada nodo por su desarrollo en serie de Taylor. El número de términos del desarrollo, que se tendrán en cuenta, será el suficiente para que junto con las condiciones de contorno y las condiciones iniciales sea posible eliminar las derivadas y obtener, de este modo, una ecuación que nos permita conocer el valor de la función en cada nodo. Dicha ecuación, como se verá más adelante, relaciona el valor de la función en un nodo con el valor de la función en los nodos adyacentes.

El proceso anterior se repite para cada uno de los nodos, obteniéndose un sistema de ecuaciones cuya solución conduce a la obtención de la solución aproximada que se está buscando. La solución del sistema de ecuaciones es un proceso iterativo que puede resolverse utilizando diferentes métodos. La aplicación de un método u otro y el número de iteraciones que consideraremos influirán en el resultado final.

En este capítulo se presenta en forma general y básica el concepto de método de diferencias finitas, que por ser objeto de estudio se presenta en dimensión uno. Para esto, se supone un dominio $\Omega = [0, L]$ en donde se plantea el problema y tiene solución.

A fin de entender el método de diferencias finitas se explicara el proceso de discretización, el cual está referido a discretizar una variable y la discretización de operadores diferenciales.

Discretizar la variable independiente significa discretizar la variable espacial sobre un dominio finito. Se considera un intervalo de la forma $\Omega = [0, L]$ o $[a, b]$ o más general se considera todo como un dominio natural.

2.1. Malla en Diferencias Finitas

Sea h un número positivo. Una malla en el dominio $\Omega \subset \mathbb{R}$ es un conjunto de puntos $\tau = x_n \in \Omega$, tal que cada x_n está en el interior o en la frontera de un subdominio tal que $x_{n+1} = x_n + h$. Se considera una partición uniforme $x_0 < x_1 < \dots < x_N$ del intervalo $[a, b]$, donde N es un número entero dado. En ella, los puntos $x_i = x_0 + ih = a + ih, i = 0, 1, \dots, N$, definen la posición de los lados de las celdas de la malla representadas por pequeños segmentos verticales consecutivos, cada uno de tamaño $h = (b - a)/N$. Los puntos x_n en la malla se llaman nodos y este proceso de elección no es único.

2.2. Discretización de los operadores diferenciales

[Teorema de Taylor] Suponga que $f \in C^n[a, b]$, $f^{(n+1)}$ existe en $[a, b]$, y $x_j \in [a, b]$. Para cada $x \in [a, b]$, existe un número $\xi(x)$ entre x_j y x con

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x),$$

donde

$$\begin{aligned} P_n(x) &= f(x_j) + f'(x_j)(x - x_j) + \frac{f''(x_j)}{2!}(x - x_j)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}(x - x_j)^n \\ &= \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_j)}{k!}(x - x_j)^k \end{aligned}$$

y

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_j)^{n+1}.$$

Denotando por $x = x_j + h$, el polinomio de Taylor y el Residuo quedan escritos de la siguiente manera

$$P_n(x) = f(x_j) + f'(x_j)(h) + \frac{f''(x_j)}{2!}(h)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}(h)^n = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_j)}{k!}(h)^k \quad (6)$$

y

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} (h)^{n+1}.$$

Aquí $P_n(x)$ es llamado el **n-ésimo polinomio de Taylor** alrededor de x_j y $R_n(x)$ recibe el nombre de **residuo** (o **error de truncamiento**) relacionado con $P_n(x)$. Puesto que el número $\xi(x)$ en el error de truncamiento $R_n(x)$ depende del valor de x donde se evalúa el polinomio $P_n(x)$, el error es una función de la variable x . Sin embargo, no se debe esperar que se pueda determinar la función $\xi(x)$ de manera explícita. El teorema de Taylor simplemente garantiza que esta función existe y que su valor se encuentra entre x y x_j . De hecho, uno de los problemas comunes en los métodos numéricos es tratar de determinar un límite realista para el valor de $f^{(n+1)}(\xi(x))$ cuando x se encuentra en un intervalo específico.

Se obtiene a continuación la aproximación por diferencias finitas para la primera derivada tomando una función f que cumpla con las condiciones del teorema de Taylor 6:

$$f(x_j + h) = f(x_j) + f'(x_j)h + \frac{f''(x_j)}{2!}h^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^n \quad (7)$$

$$f(x_j - h) = f(x_j) - f'(x_j)h + \frac{f''(x_j)}{2!}h^2 - \dots + \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^n \quad (8)$$

De (7) se tiene que:

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j + h) - f(x_j)}{h} - \frac{f''(x_j)}{2!}h - \dots - \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^{n-1} \quad (9)$$

Análogamente de (8) se tiene que:

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j) - f(x_j - h)}{h} + \frac{f''(x_j)}{2!}h - \dots + \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^{n-1} \quad (10)$$

Por otro lado, restando (7) y (8) se obtiene:

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j + h) - f(x_j - h)}{2h} - \frac{f'''(x_j)}{3!}h^2 - \dots - \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^{n-1}, \text{ con } n \text{ impar.} \quad (11)$$

Ahora, para obtener f'' se suman (7) y (8) así:

$$f''(x_j) = \frac{f(x_j + h) - 2f(x_j) + f(x_j - h)}{h^2} - \frac{2f^{(4)}(x_j)h^2}{4!} - \dots - \frac{2f^{(n)}(x_j)h^{n-2}}{4!}. \quad (12)$$

Para efecto de simplificación y una mejor visualización de las igualdades anteriores se proporciona las siguientes definiciones.

Definición 2.2.1. Si $f(h)$ y $g(h)$ son dos funciones de h , entonces se dice que

$$f(h) = O(g(h)) \text{ cuando } h \rightarrow 0$$

si existe una constante C tal que

$$\left| \frac{f(h)}{g(h)} \right| < C \text{ para todo } h \text{ suficientemente pequeño}$$

o, de manera equivalente, si se puede acotar

$$|f(h)| < C|g(h)| \text{ para todo } h \text{ suficientemente pequeño.}$$

Intuitivamente, esto significa que $f(h)$ decae a cero al menos tan rápido como lo hace la función $g(h)$. Por lo general, $g(h)$ es un monomio h^q , pero esto no es necesario.

A veces también es conveniente utilizar la notación (o pequeña).

$$f(h) = o(g(h)) \quad \text{cuando } h \rightarrow 0.$$

Esto significa que

$$\left| \frac{f(h)}{g(h)} \right| \rightarrow 0 \quad \text{cuando } h \rightarrow 0.$$

Esto es un poco más fuerte que la afirmación anterior y significa que $f(h)$ decae a cero más rápido que $g(h)$. Si $f(h) = o(g(h))$, entonces $f(h) = O(g(h))$, aunque lo contrario puede no ser cierto. Decir que $f(h) = o(1)$ simplemente significa que $f(h) \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$.

Definición 2.2.2. La función $g(h)$ es de orden $O(h^p)$, $p > 0$ si y solo si existe una constante $M \leq 0$ tal que

$$|g(h)| \leq Mh^p. \quad (13)$$

Ahora, a modo de ejemplo se determina el error de truncamiento local. Para ello se usa la fórmula de Taylor de diferentes órdenes, utilizando el orden $n = 1$, de (9) se puede expresar

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j + h) - f(x_j)}{h} - \left(\frac{f''(x_j)}{2!}h - \dots - \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^{n-1} \right) \quad (14)$$

Por lo tanto, se puede definir la primera aproximación

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_j + h) - f(x_j)}{h}. \quad (15)$$

Se observa que el error de truncamiento es:

$$\begin{aligned} \tau(x_j, h) &= - \left(\frac{f''(x_j)}{2!}h - \dots - \frac{f^{(n)}(x_j)}{n!}h^{n-1} \right) \\ &= O(h) \end{aligned}$$

La aproximación (15) es llamada aproximación por diferencias finitas progresiva o hacia adelante para f' , y $O(h)$ es llamado error de truncamiento de orden $p = 1$, este orden depende de la potencia de h . Análogamente se tiene que:

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_j) - f(x_j - h)}{h}, \quad (16)$$

la aproximación (16) es llamada aproximación por diferencias finitas regresiva o hacia atrás para f' , donde se tiene un error de truncamiento de orden $p = 1$. De igual manera:

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_j + h) - f(x_j - h)}{2h}, \quad (17)$$

llamada aproximación por diferencia central para f' , que cuenta con un error de truncamiento de orden $p = 2$. Cabe resaltar que en la Figura 2 se puede observar como la aproximación de segundo orden ofrece un mejor acercamiento a la derivada en comparación con las aproximaciones de orden uno.

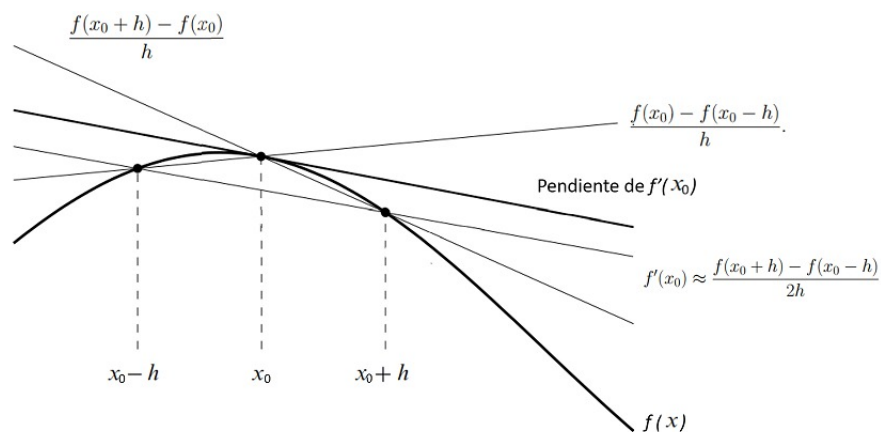


Figura 2. Varias aproximaciones a $f'(x_0)$ interpretada como la pendiente de rectas secantes

Para finalizar con las aproximaciones a la primera derivada se añaden dos aproxi-

maciones que serán necesarias mas adelante:

$$f'(x_j) \approx \frac{3f(x_j) - 4f(x_j - h) + f(x_j - 2h)}{2h}, \quad (18)$$

$$f'(x_j) \approx \frac{3f(x_j + h) + 3f(x_j) - 7f(x_j - h) + f(x_j - 2h)}{8h}, \quad (19)$$

las cuales se obtienen mediante un proceso análogo al ya discutido utilizando el teorema de Taylor 6 en los puntos $x = x_j - 2h$ y $x = x_j + 2h$. Por otro lado, para la aproximación de $f''(x_j)$ se tiene de (12) que:

$$f''(x_j) \approx \frac{f(x_j + h) - 2f(x_j) + f(x_j - h)}{h^2}. \quad (20)$$

En lo que sigue se hará uso exclusivo de la diferenciación central de segundo orden (20) para aproximar los términos de difusión en la ecuación principal

2.3. Esquemas en diferencias finitas para el problema modelo

Un esquema de diferencias finitas es una combinación de operadores discretos que permiten aproximar una ecuación diferencial por una ecuación en diferencias finitas. En particular, acá nos centramos en el problema modelo que sera objeto principal de estudio:

$$\begin{cases} -k \frac{d^2 u}{dx^2} + v \frac{du}{dx} = f(x) & \text{en } \Omega = (0, L), \\ \alpha_0 u(0) - \beta_0 u_x(0) = \gamma_0, \\ \alpha_L u(L) + \beta_L u_x(L) = \gamma_L. \end{cases} \quad (21)$$

Los operadores discretos que son utilizados para aproximar (21) vienen dados por las aproximaciones de la primera y segunda derivada. En el apartado anterior se definieron dichas aproximaciones para las derivadas, ahora lo que se busca es empezar con la deducción de cada uno de los esquemas que serán utilizados en la resolución del problema modelo (21). Como ya se dijo, en la introducción del traba-

jo, se han definido y analizado diferentes tipos de esquemas en diferencias finitas buscando cumplir distintas propiedades numéricas en la resolución del problema. Realizando una revisión pertinente se encontro que se han realizado estudios que abordan el uso de diferentes esquemas de diferencias finitas en la simulación numérica del problema con un alto número de Peclet. Los primeros intentos utilizando la aproximación de diferencia central de segundo orden en los términos de convección no produjeron soluciones libres de ondulaciones para valores altos del número de Reynolds o Peclet ¹⁷¹⁸. Se descubrió que el uso de aproximaciones de primer orden, como el esquema *upwind*, generaba errores significativos de truncamiento, como la producción de un efecto de difusión que aumentaba los efectos de la viscosidad y afectaba la predicción del flujo ¹⁹²⁰. Se propuso entonces un esquema más complejo y sofisticado, como el esquema QUICK ¹¹, el cual mostró reducir la difusión numérica y mejorar la precisión en ciertos casos ²¹²². Sin embargo, estas formulaciones también presentaron problemas de sobreimpulsos y no resolvieron las dificultades asociadas con el término fuente en el flujo dominado por convección. Otra aproximación de diferencias finitas que ha atraído comparativamente poca

¹⁷ Alexander Strang Thom y Colin James Apelt. "Field computations in engineering & physics". En: *(No Title)* (1961).

¹⁸ Odus R Burggraf. "Analytical and numerical studies of the structure of steady separated flows". En: *Journal of Fluid Mechanics* 24.1 (1966), págs. 113-151.

¹⁹ AD Gosman. "Heat and mass transfer in recirculating flows". En: *(No Title)* (1969).

²⁰ Murli M Gupta y Ram P Manohar. "A critique of a second-order upwind scheme for viscous flow problems". En: *AIAA Journal* 16.7 (1978), págs. 759-761.

²¹ MA Leschziner. "Practical evaluation of three finite difference schemes for the computation of steady-state recirculating flows". En: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 23 (1980), págs. 293-312.

²² Mrn A Leschziner y W Rodi. "Calculation of annular and twin parallel jets using various discretization schemes and turbulence-model variations". En: (1981).

atención fue la utilizada por Atias et al.²³, quienes estudiaron un esquema de segundo orden contra el viento (*second-order upwind*) para discretizar los términos de la ecuación de transporte de vorticidad (ecuación fundamental en la modelización y análisis de flujos de fluidos especialmente importante en el estudio de flujos turbulentos y fenómenos de remolino) y se encontró que tiene el potencial de producir suficiente precisión. No se ha realizado un estudio sistemático para este esquema hasta el momento, pero Gupta y Manohar gupta1978critique hicieron comentarios desfavorables sobre la base de un análisis tipo von Neumann. La dificultad de una simulación numérica se complica aún más por el hecho de que para el número de Reynolds de celda mayor que la unidad, los esquemas de diferencia de precisión formal de orden superior no prometen necesariamente un error total más pequeño. Además, Stubbley y Alabama, en²⁴, discutieron que el orden formal de precisión de un algoritmo de diferencia puede no reflejar necesariamente la magnitud de los errores de cálculo para valores grandes del número de Reynolds de celda.

Con lo dicho, en este trabajo se seleccionaron cuatro esquemas de diferencias finitas y un esquema de diferencias finitas miméticas que serán definidos y analizados en el siguiente capítulo. El objetivo es analizar la efectividad de los esquemas con diferentes valores para el número de Péclet y condiciones de frontera Dirichlet o Robin.

La velocidad v del problema será supuesta siempre positiva. Un análisis para el caso negativo resulta análogo. El caso donde la velocidad depende de la variable espacial y puede tomar valores positivos o negativos se escapa del marco del trabajo.

En lo que sigue se definen los esquemas en diferencias finitas suponiendo una

²³ M Atias, M Wolfshtein y M Israeli. "Efficiency of Navier-Stokes Solvers". En: *AIAA Journal* 15.2 (1977), págs. 263-266.

²⁴ GD Stubbley, GD Raithby y AB Strong. "Proposal for a new discrete method based on an assessment of discretization errors". En: *Numerical heat transfer* 3.4 (1980), págs. 411-428.

discretización del dominio en N celdas ($N + 1$ nodos). Los valores aproximados de la solución en estos nodos se representan con el vector U_0, U_1, \dots, U_N , donde U_j es la aproximación a la solución $u(x_j)$, en el nodo x_j . Los valores U_0 y U_N serán definidos a partir de la condición de frontera que defina el problema.

2.3.1. Esquema de diferencias finitas centrales de segundo orden (DFC) A partir de (17) y (20), el esquema numérico para el problema (21) resultante ser:

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} = f_i, \quad (22)$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, N - 1, N$. Cuando el problema modelo se defina con condiciones de frontera tipo Robin, se usa un esquema de diferencial centrales para discretizar la derivada, y se encuentra una definición para los nodos fantasmas que resultan en esta formulación para $i = 0$ y $i = N$. Para el caso de condiciones de frontera Dirichlet se define el sistema de ecuaciones a partir de $i = 1, \dots, N - 1$, dado que los valores de U_0 y U_N son conocidos, y se agrupan a la derecha con el vector de f .

2.3.2. Esquema *Upwind* de segundo orden A partir de 18 y 20 el esquema resultante cuando $v > 0$ es

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{2h} (3U_i - 4U_{i-1} + U_{i-2}) = f_i, \quad (23)$$

para $i = 2, \dots, N - 1$. En el caso de condiciones de frontera Dirichlet los nodos x_0 y x_N son conocidos y solo faltaría definir un esquema de segundo orden para el nodo x_1 , para este caso se usa el esquema de diferencias centradas para la primera derivada, es decir:

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{2h} (U_{i+1} - U_{i-1}) = f_i,$$

para $i = 1$. Para el caso de condiciones de frontera tipo Robin, la deriva es en el nodo x_0 es aproximada por el esquema

$$u_x(0) = \frac{1}{2h} (-3U_0 + 4U_1 - U_2), \quad (24)$$

mientras en el nodo x_N es aproximada por el esquema

$$u_x(L) = \frac{1}{2h} (3U_N - U_{N-1} + U_{N-2}). \quad (25)$$

Al sustituir estos esquemas en las condiciones de frontera surgen la primera y última ecuación del sistema.

2.3.3. Esquema QUICK (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics) De (19) y (20) el esquema resultante cuando $v > 0$ es

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{h} \left(\frac{3}{8}U_{i+1} + \frac{3}{8}U_i - \frac{7}{8}U_{i-1} + \frac{1}{8}U_{i-2} \right) = f_i, \quad (26)$$

para $i = 2, \dots, N - 1$. En el caso de condiciones de frontera Dirichlet los nodos x_0 y x_N son conocidos y solo faltaría definir un esquema de segundo orden para el nodo x_1 , para este caso se usa el esquema de diferencias centradas para la primera derivada, es decir:

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{8}U_{i+2} + \frac{7}{8}U_{i+1} - \frac{3}{8}U_i - \frac{3}{8}U_{i-1} \right) = f_i,$$

para $i = 1$ (usado para el caso en que $v < 0$). Para el caso de condiciones de frontera tipo Robin, la derivada en los nodos x_0 y x_N son aproximadas por los esquemas (136) y (137), respectivamente.

2.3.4. Esquema θ de segundo orden Se considera una aproximación a la primera derivada de la ecuación del problema (21) como una combinación de la diferencia finita centrada y la diferencia finita *upwind* de la siguiente forma

$$u'(x) \approx (1 - \theta) \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} + \theta \frac{U_i - U_{i-1}}{h},$$

para un valor de $\theta > 0$. Entonces, el θ -método para el problema modelo (21) queda definido por

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \left[(1 - \theta) \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} + \theta \frac{U_i - U_{i-1}}{h} \right] = f_i,$$

para $i = 1, \dots, N - 1$. Cuando el problema modelo se define con condiciones de frontera tipo Robin, se usa un esquema centrado para discretizar la derivada, y se encuentra una definición para los nodos fantasmas que resultan para los nodos en $i = 0$ y $i = N$. Para el caso de condiciones de frontera Dirichlet se define el sistema de ecuaciones a partir de $i = 1, \dots, N - 1$, dado que los valores de U_0 y U_N son conocidos, y se agrupan a la derecha con el vector de f .

En el esquema θ , el parámetro θ controla la proporción en la que se combinan dos tipos de diferencias finitas para aproximar la derivada en la ecuación del problema:

- **Diferencia finita centrada:** Usa los puntos U_{i+1} y U_{i-1} para calcular la pendiente en el nodo i . Este método es más preciso en términos de error de truncamiento, pero puede ser inestable para problemas de advección-dominante.
- **Diferencia finita upwind:** Usa los puntos U_i y U_{i-1} para calcular la derivada. Es más estable para problemas de advección pero introduce mayor difusividad numérica, lo que puede distorsionar la solución al suavizar los perfiles de concentración.

El parámetro θ permite ajustar esta combinación mediante un valor de θ entre 0

y 1, proporcionando un equilibrio entre la precisión (usando diferencias centradas) y la estabilidad (introduciendo una componente upwind). Usando el procedimiento de encontrar la ecuación diferencial modificada que resuelve el esquema se puede concluir que el θ óptimo para el esquema resulta en

$$\theta = \frac{2(k-2)h}{vh^2 + 12}.$$

2.4. Errores global y local

Se quiere ver el error que se comete al utilizar un esquema de diferencias finitas para aproximar la solución de una ecuación diferencial. Para esto se toma el problema modelo (21) y el esquema DFC dado en (22) de segundo orden. A partir de las condiciones de frontera Dirichlet, se sabe que $U_0 = u_0$ y $U_N = u_L$, por lo que se tienen $N - 1$ valores desconocidos U_1, \dots, U_{N-1} por calcular mediante el esquema numérico,

$$\frac{-k}{h^2} (U_{j-1} - 2U_j + U_{j+1}) + \frac{v}{2h} (U_{j+1} - U_{j-1}) = f(x_j) \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, N - 1. \quad (27)$$

Se debe tener en cuenta que la primera ecuación ($j = 1$) involucra el valor $U_0 = u_0$ y la última ecuación ($j = N$) involucra el valor $U_N = u_L$. Se tiene así un sistema de $N - 1$ ecuaciones lineales para las $N - 1$ incógnitas, que se puede escribir en la forma

$$AU = F, \quad (28)$$

donde $U = [U_1, U_2, \dots, U_{N-1}]^T$ es el vector de incógnitas y

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & c_i & a_i & b_i & \dots & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & c_{N-2} & a_{N-2} & b_{N-2} \\ & & & & & c_{N-1} & a_{N-1} \end{bmatrix}, \quad \text{con} \quad \begin{cases} a_i = 2k, \\ b_i = -k + \frac{vh}{2}, \\ c_i = -k - \frac{vh}{2}, \end{cases} \quad (29)$$

$$F = \begin{bmatrix} f(x_1) + \left(k + \frac{vh}{2}\right) u_0 \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_{N-1}) + \left(k - \frac{vh}{2}\right) u_N \end{bmatrix}.$$

Ahora nos podemos preguntar qué tan bien aproxima U a la función $u(x)$. Se sabe que la aproximación de diferencia centrada (11), cuando se aplica a una función suave conocida $u(x)$, da una aproximación precisa de segundo orden. Se conocen los valores de u'' en cada punto y se están calculando un conjunto completo de valores discretos U_1, \dots, U_{N-1} con la propiedad de que al aplicar (11) a estos valores discretos dan el resultado deseado, valores para $u(x_j)$. Se espera que este proceso también dé errores de orden $O(h^2)$ (de hecho lo hace), sin embargo esto ciertamente no es obvio.

Primero, se debe aclarar qué se entiende por el error en los valores discretos U_1, \dots, U_{N-1} con respecto a la solución verdadera $u(x)$, que es una función. Dado que se supone que U_j se aproxima a $u(x_j)$, es natural usar los errores puntuales $U_j - u(x_j)$.

Si se define \hat{U} como el vector de valores verdaderos

$$\hat{U} := \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_{N-1}) \end{bmatrix}, \quad (30)$$

entonces el vector de error E definido por

$$E := U - \hat{U},$$

contiene los errores en cada punto de la malla. El objetivo ahora es obtener un límite en la magnitud de este vector, mostrando que es de orden $O(h^2)$ cuando $h \rightarrow 0$. Para medir la magnitud de este vector se debe usar alguna norma, por ejemplo, la norma del máximo:

$$\|E\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq m} |E_j| = \max_{1 \leq j \leq m} |U_j - u(x_j)|.$$

Este es solo el mayor error en el intervalo. Si se puede mostrar que $\|E\|_\infty = O(h^2)$, entonces cada error puntual debe ser también de orden $O(h^2)$.

A menudo se usan otras normas para medir funciones de malla, ya sea porque son más apropiadas para un problema dado o simplemente porque son más fáciles de acotar, ya que algunas técnicas matemáticas funcionan solo con una norma en particular. Otras normas que se utilizan con frecuencia están dadas por:

$$\|E\|_1 = h \sum_{j=1}^m |E_j|, \quad \|E\|_2 = \left(h \sum_{j=1}^m |E_j|^2 \right)^{1/2}.$$

Se debe tener en cuenta el factor de h que aparece en estas definiciones. En ⁹ se puede observar una discusión más completa de las normas de función de malla y cómo se relacionan con las normas de vector estándar.

Consideremos de nuevo el problema de estimar el error en la solución en diferencias finitas obtenida al resolver el sistema (28). La técnica que se utiliza es absolutamente básica para el análisis de métodos de diferencias finitas en general e implica dos pasos clave. Primero, se calcula el error de truncamiento local (LTE) del método y luego se usa alguna forma de estabilidad para mostrar que el error global se puede acotar en términos del LTE.

El error global simplemente se refiere al error $U - \hat{U}$ que se está intentando establecer entre la solución numérica y la solución exacta del problema. El LTE se refiere al error en nuestra aproximación de derivadas por diferencias finitas y, por lo tanto, es algo que se puede estimar fácilmente usando expansiones de la serie de Taylor.

2.4.1. Error de truncamiento local (LTE) El LTE se define reemplazando U_j , con la verdadera solución $u(x_j)$ en la fórmula de diferencias finitas (27). En general, la verdadera solución $u(x_j)$ no cumple exactamente esta ecuación y la discrepancia es el LTE, que se denota por τ_j :

$$\tau_j := \frac{-k}{h^2} (u(x_{j-1}) - 2u(x_j) + u(x_{j+1})) + \frac{v}{2h} (u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})) - f(x_j),$$

para $j = 1, 2, \dots, N - 1$. Por supuesto, en la práctica no se sabe cuál es la verdadera solución $u(x)$, pero si se asume que es suave, o suficientemente derivable, entonces por las expansiones de la serie de Taylor se tiene que

$$\tau_j = -k \left[u''(x_j) + \frac{1}{12} h^2 u''''(x_j) \right] + v \left[u'(x_j) + \frac{h^2}{3!} u'''(x_j) \right] + O(h^4) - f(x_j).$$

Usando la ecuación diferencial original (21) esto se convierte en

$$r_j = -k \left[\frac{1}{12} h^2 u''''(x_j) \right] + v \left[\frac{h^2}{3!} u'''(x_j) \right] + O(h^4).$$

Aunque las funciones u'''' y u''' son en general desconocidas, ellas son fijas e independientes de h , por lo que $r_j = O(h^2)$, con $h \rightarrow 0$.

Definiendo τ como el vector con componentes τ_j , entonces

$$\tau = A\hat{U} - F,$$

donde \hat{U} es el vector de los valores de solución verdaderos (30). Entonces:

$$A\hat{U} = F + \tau. \quad (31)$$

2.4.2. Error global Para obtener una relación entre el error local τ y el error global $E = U - \hat{U}$, restando (31) de (28) que define U , se obtiene

$$AE = -\tau. \quad (32)$$

Esta es simplemente la forma matricial del sistema de ecuaciones

$$\frac{-k}{h^2} (E_{j-1} - 2E_j + E_{j+1}) + \frac{v}{2h} (E_{j+1} - E_{j-1}) = -\tau(x_j) \text{ para } j = 1, 2, \dots, N-1,$$

con las condiciones de frontera

$$E_0 = E_N = 0,$$

ya que se están usando los datos de frontera exactos $U_0 = u_0$ y $U_N = u_L$. Es fácil notar que el error global satisface un conjunto de ecuaciones en diferencias finitas que tiene exactamente la misma forma que las ecuaciones en diferencias originales para U , excepto que el lado derecho está dado por $-\tau$ en lugar de F .

A partir de esto debería quedar claro por qué se espera que el error global sea aproximadamente de la misma magnitud que el error local τ . Se puede interpretar

el sistema (32) como una discretización de la EDO

$$-ke''(x) + ve' = -\tau(x) \quad \text{para } 0 < x < 1, \quad (33)$$

con condiciones de frontera

$$e(0) = 0, \quad e(1) = 0.$$

Dado que $f(x) \approx \frac{1}{12}h^2u'''(x)$, la integración dos veces muestra que el error global debería ser aproximadamente

$$e(x) \approx -\frac{1}{12}h^2u''(x) + \frac{1}{12}h^2(u''(0) + x(u''(1) - u''(0))),$$

y por lo tanto el error debería ser $O(h^2)$.

2.5. Análisis de los esquemas

Existen tres propiedades fundamentales en el análisis de los esquemas en diferencias finitas o de cualquier método numérico. Estas son estabilidad, consistencia y convergencia, las cuales son analizadas a continuación.

2.5.1. Estabilidad El argumento dado anteriormente no es completamente convincente porque se confía en la suposición de que resolver las ecuaciones en diferencias da una aproximación decente a la solución de las ecuaciones diferenciales subyacentes (en realidad lo contrario ahora, que la solución a la ecuación diferencial (33) da una buena indicación de la solución de las ecuaciones en diferencias (32). Dado que es exactamente esta suposición lo que se está tratando de probar, el razonamiento es bastante circular.

En cambio, se considera el sistema discreto (32), que se reescribirá en la forma

$$A^h E^h = -\tau^h, \quad (34)$$

donde el superíndice h indica que se está en una malla con espaciado de tamaño h . Esto sirve como recordatorio de que estas cantidades cambian a medida que se refina la malla. En particular, la matriz A^h es una matriz de orden $N \times N$ con $h = 1/(N + 1)$, por lo que su dimensión crece cuando $h \rightarrow 0$.

Sea $(A^h)^{-1}$ la inversa de esta matriz. Luego, al resolver el sistema (34) da que

$$E^h = - (A^h)^{-1} \tau^h,$$

y tomando normas:

$$\begin{aligned} \|E^h\| &= \left\| (A^h)^{-1} \tau^h \right\| \\ &\leq \left\| (A^h)^{-1} \right\| \|\tau^h\|. \end{aligned} \quad (35)$$

Se sabe que $\|\tau^h\| = O(h^2)$ y se espera que lo mismo suceda con $\|E^h\|$, pues está claro lo que se necesita para que esto sea cierto es que $\left\| (A^h)^{-1} \right\|$ esté acotado por alguna constante independiente de h cuando $h \rightarrow 0$, es decir, que

$$\left\| (A^h)^{-1} \right\| \leq C$$

para todo h suficientemente pequeño.

Entonces se tendrá que

$$\|E^h\| \leq C \|\tau^h\|,$$

y así $\|E^h\|$ va a cero al menos tan rápido como $\|\tau^h\|$. Esto motiva la siguiente definición de estabilidad.

Definición 2.5.1. Se supone que un método de diferencias finitas para un Problema

lineal da una sucesión de ecuaciones matriciales de la forma $A^h U^h = F^h$, donde h es el ancho de la malla. Se dice que el método es estable si $(A^h)^{-1}$ existe para todo h suficientemente pequeño (para $h < h_0$) y si existe una constante C , independiente de h , tal que:

$$\left\| (A^h)^{-1} \right\| \leq C \quad \text{para todo } h < h_0. \quad (36)$$

2.5.2. Consistencia Un método numérico se considera consistente con una ecuación diferencial y las condiciones de frontera si el término de error local, denotado por τ^h , tiende a cero cuando el tamaño de paso h tiende a cero. En otras palabras, un método es consistente si la aproximación numérica se acerca cada vez más a la solución exacta a medida que se refina la discretización, es decir,

$$\|\tau^h\| \rightarrow 0 \text{ cuando } h \rightarrow 0. \quad (37)$$

La ecuación anterior establece que la norma del error local $|\tau^h|$ debe tender a cero cuando h tiende a cero. La norma del error local se mide en relación con el tamaño de paso h , y su convergencia a cero indica que el método proporciona una discretización apropiada y sensible del problema. Por lo general, se espera que la norma del error local $|\tau^h|$ sea de orden $O(h^p)$ para algún entero $p > 0$, lo que significa que el error local disminuye a medida que se reduce el tamaño de paso h . Cuanto mayor sea el valor de p , más rápido se espera que converja el método hacia la solución exacta. Si el método es consistente y el orden del error local es mayor que cero, se puede afirmar que el método es consistente y proporciona una buena aproximación numérica de la solución exacta del problema.

2.5.3. Convergencia Un método es convergente si $\|E^h\| \rightarrow 0$ cuando $h \rightarrow 0$.

Combinando las ideas presentadas arriba se concluye que:

$$\text{consistencia} + \text{estabilidad} \implies \text{convergencia.} \quad (38)$$

Esto se demuestra fácilmente usando (36) y (37) para obtener en el límite que

$$\|E^h\| \leq \|(A^h)^{-1}\| \|\tau^h\| \leq C \|\tau^h\| \rightarrow 0 \quad \text{cuando } h \rightarrow 0.$$

Aunque esto se ha demostrado solo para el problema en cuestión, de hecho, la mayoría de los análisis de métodos de diferencias finitas para ecuaciones diferenciales siguen este mismo enfoque de dos niveles, y el enunciado (38), que a veces se denomina teorema fundamental de los métodos de diferencias finitas. De hecho, como indica nuestro análisis anterior, esto generalmente se puede fortalecer para decir que

$$O(h^p) \text{ Error de truncamiento local} + \text{estabilidad} \implies O(h^p) \text{ error global.}$$

La consistencia (y el orden de precisión) suele ser la parte fácil de verificar. La parte difícil de verificar es la estabilidad. Incluso para problema que se acaba de analizar, no está del todo claro cómo comprobar la condición (36), ya que estas matrices se hacen mayores cuando $h \rightarrow 0$. Para otros problemas, puede que ni siquiera esté claro cómo definir la estabilidad de manera adecuada. El desafío en el análisis de métodos de diferencias finitas para nuevas clases de problemas a menudo es encontrar una definición apropiada de “estabilidad” que permita probar la convergencia usando (38), mientras que al mismo tiempo sea lo suficientemente manejable como para que se pueda verificar que se cumple para problemas de métodos específicos de diferencias finitas.

Ya sea que se tenga o no una prueba formal de convergencia para un método dado,

siempre es una buena práctica verificar que el programa de computadora esté dando un comportamiento convergente, a la tasa esperada.

Es común que con el objeto de probar la convergencia de un esquema, en los textos dedicados al Análisis Numérico se incluya el Teorema, atribuido a P. Lax, en ²⁵¹² y el cual se enunciara a continuación. [Teorema de Equivalencia Lax-Richtmyer] Para un problema con valores iniciales bien planteado matemáticamente, que es uniformemente solucionable (existe una solución única para el problema matemático en derivadas parciales, y esta solución es bien condicionada respecto a la estabilidad. Esto implica que la solución del problema no debe variar de manera descontrolada bajo pequeñas perturbaciones en los datos iniciales o en las condiciones de contorno.) y tiene una aproximación consistente, la estabilidad del esquema es necesaria y suficiente para la convergencia.

²⁵ KW Morton y DF Mayers. *Numerical Solution of Partial Differential Equations* (1994).

3. Los métodos de discretización miméticos

Es cada vez más frecuente la definición de nuevos métodos a partir de modificaciones del método clásico de Diferencias Finitas (DF). Uno de estos métodos son los esquemas conocido como métodos miméticos²⁶. Dentro de estos esquemas están los desarrollados por Castillo et al. en²⁷ y conocidos como métodos de discretización miméticos (MDM), que son sobre los que nos centraremos en este trabajo.

Estos esquemas se formulan a partir de versiones discretas de los operadores de divergencia, gradiente y rotacional, comúnmente empleados en la definición de EDP. Los operadores discretos imitan algunas propiedades fundamentales de sus contrapartes continuas, resultando en esquemas conservativos y manteniendo el orden de convergencia en todos los nodos del dominio discreto, por lo cual se hace referencia a ellos como operadores miméticos.

A lo largo de las dos últimas décadas, se ha observado y reportado en la literatura especializada que los esquemas numéricos basados en estos operadores ofrecen ventajas significativas en comparación con los esquemas clásicos de DF al resolver una variedad de problemas aplicados en ingeniería y ciencias. Estos problemas abarcan áreas como propagación de ondas, estudios sísmicos, fluidos, fenómenos

²⁶ Mikhail Shashkov y Stanly Steinberg. "Support-Operator Finite-Difference Algorithms for General Elliptic Problems". En: *Journal of Computational Physics* 118.1 (1995), págs. 131-151; James M. Hyman y Mikhail Shashkov. "The Approximation of Boundary Conditions for Mimetic Finite Difference Methods". En: *Computers Math. Applic.* 36.5 (1998), págs. 79-99; James M. Hyman, Mikhail Shashkov y S. Steinberg. "Mimetic Finite Difference Methods for Diffusion Equations". En: *Computers Math. Applic.* 6.3-4 (2002), págs. 333-352.

²⁷ J.E. Castillo y R. D. Grone. "A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law". En: *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 25.1 (2003), págs. 128-142; J.E. Castillo y Mark Yasuda. "Linear Systems Arising for Second-Order Mimetic Divergence and Gradient Discretizations". En: *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms* 4.1 (2005), págs. 67-82.

térmicos, reacciones químicas, electrodinámica y procesamiento de imágenes²⁸.

Existen versiones discretas de los operadores miméticos en cualquier dimensión ($n = 1, 2, 3$) y para distintos ordenes de convergencia que van desde 2, 4, 6 y 8. En este trabajo, pensado como un inicio en el estudio de estos esquemas MDM, se deducen los operadores gradiente y divergencia de segundo orden. La generalización a varias variables involucra un gran volumen de cálculos pero sin ningún concepto teórico adicional que justifique un análisis distinto al que se realiza para el caso unidimensional. La definición de los operadores miméticos de orden mayor a 2 se deja como trabajo futuro y por lo tanto queda fuera del análisis que se presentará de los MDM en este trabajo. Resulta apropiado señalar, que este trabajo de tesis sigue muchas de las ideas presentadas por el Profesor J.M. Guevara en²⁹.

El contenido del capítulo se ha dispuesto de la siguiente forma. En un primer apartado, buscando una monografía autocontenida y un mejor entendimiento, se presentan algunos resultados del cálculo vectorial a fin de poder mostrar explícitamente las relaciones integrales y ecuaciones que serán usadas para la implementación de los MDM. A continuación se establecerán las discretizaciones del dominio y de los operadores gradiente y divergencia. Posteriormente se expone la versión semidiscreta

²⁸ J.M. Guevara, M. Freitas y J.E. Castillo. "A New Second Order Finite Difference Conservative Scheme". En: *Divulgaciones Matemáticas* 13.1 (2005), págs. 107-122; F. Solano-Feo et al. "A new mimetic scheme for the acoustic wave equation". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 295 (2016). VIII Pan-American Workshop in Applied and Computational Mathematics, págs. 2-12; Juan S Carrillo et al. "Glaucoma Detection using Fundus Images with Mimetic Anisotropic Filtering and Convolutional Neural Networks". En: *2022 E-Health and Bioengineering Conference (EHB)*. IEEE. 2022, págs. 01-04; Jorge Villamizar et al. "Mimetic finite difference methods for restoration of fundus images for automatic detection of glaucoma suspects". En: *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering: Imaging & Visualization* 10.5 (2022), págs. 492-499. DOI: 10.1080/21681163.2021.1914733; Lola Bautista et al. "Mimetic Finite Difference Methods for Restoration of Fundus Images for Automatic Glaucoma Detection". En: *VipIMAGE 2019*. Ed. por João Manuel R. S. "Tavares y Renato Manuel Natal Jorge. Cham: Springer International Publishing, 2019, págs. 104-113.

²⁹ JM Guevara-Jordan. "Sobre los Esquemas Miméticos de Diferencias Finitas para la Ecuación Estática de Difusión". En: *Trabajo de Ascenso, UCV Caracas, Venezuela* (2005).

del teorema de Green-Stokes-Gauss en una dimensión. Luego se demostrará que las discretizaciones del gradiente y la divergencia son miméticas y conservativas. Finalmente, se propone el esquema MDM para distintas configuraciones del problema modelo.

El capítulo debería terminar con la demostración de la convergencia del esquema MDM del problema modelo. No obstante, dado lo extenso que resulta la prueba, esta se desarrolla completamente en el siguiente capítulo. Al mismo tiempo, la experimentación numérica de los MDM y su comparación con DF se deja para el capítulo posterior al de convergencia. Vale resaltar, que para la implementación y experimentación numérica se apoyó en la librería MOLE (MATLAB) donde se tiene implementados la mayoría de los operadores a usar en MDM.

3.1. Definiciones básicas

Para expresar las relaciones integrales de forma apropiada es necesario definir los operadores **divergencia**, **gradiente** y **derivada direccional**. Se ha dejado a un lado el **rotacional** porque los problemas de ecuaciones diferenciales objeto de estudio no hacen uso de dicho operador y no se necesita en el establecimiento de los esquemas MDM que surgen.

El operador gradiente para una función f lo suficientemente suave en coordenadas cartesianas rectangulares viene dado por la expresión

$$\nabla f := \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right), \quad (39)$$

donde los coeficientes del vector son las derivadas parciales de f respecto a cada una de las direcciones coordenadas.

Similarmente, en el mismo contexto, se define el operador divergencia de un campo

vectorial $\vec{F} = (F_1, F_2, F_3)$ por la relación

$$\nabla \cdot \vec{F} := \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{\partial F_2}{\partial y} + \frac{\partial F_3}{\partial z}, \quad (40)$$

donde se supone que las componentes del campo deben ser lo suficientemente suaves para que existan sus derivadas parciales.

Por otro lado, el operador derivada direccional de la función f respecto a un vector unitario \vec{n} se establece como el producto interno de su gradiente con el vector unitario, lo cual bajo las condiciones apropiadas se expresa simbólicamente por la relación

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{n}} = \nabla f \cdot \vec{n}. \quad (41)$$

Es importante indicar que todos estos operadores tienen motivaciones e interpretaciones físicas muy concretas, además de ser indispensables para enunciar el teorema de Green-Stokes-Gauss.

El teorema de Green-Stokes-Gauss tiene un papel fundamental en el desarrollo del concepto de método mimético. En efecto, el **Teorema de la Divergencia de Gauss** establece que el flujo de un campo vectorial \vec{F} a través de una superficie $\partial\Omega$ cerrada simple y suave a trozos que acota a una región cerrada y acotada Ω del espacio es igual a la integral triple de la divergencia de \vec{F} , $\nabla \cdot \vec{F}$, es decir,

$$\iiint_{\Omega} \nabla \cdot \vec{F} d\Omega = \iint_{\partial\Omega} \vec{F} \cdot \vec{n} dS, \quad (42)$$

donde \vec{n} representa el vector normal exterior unitario a $\partial\Omega$, la frontera de Ω . Si φ es un campo escalar y \vec{F} es un campo vectorial que son suaves en Ω , entonces

$$\nabla \cdot (\varphi \vec{F}) = \nabla \varphi \cdot \vec{F} + \varphi (\nabla \cdot \vec{F}). \quad (43)$$

Considerando $\varphi = f$ y $\vec{F} = \nabla g$ donde f y g son dos campos escalares suaves en Ω ,

entonces se tiene que

$$\nabla \cdot (f \nabla g) = \nabla f \cdot \nabla g + f(\nabla \cdot \nabla g). \quad (44)$$

A partir de este resultado y del Teorema de la Divergencia se dice que

$$\iiint_{\Omega} \nabla f \cdot \nabla g d\Omega + \iiint_{\Omega} f(\nabla \cdot \nabla g) d\Omega = \int_{\partial\Omega} f \nabla g \cdot \vec{n} dS, \quad (45)$$

el cual se llama el **Teorema de Green-Stokes-Gauss**. En este teorema, en algunas ocasiones el gradiente ∇g es sustituido por un campo vectorial genérico \vec{v} que sea suave en Ω , de lo cual resulta la expresión

$$\iiint_{\Omega} \nabla f \cdot \vec{v} d\Omega + \iiint_{\Omega} f(\nabla \cdot \vec{v}) d\Omega = \int_{\partial\Omega} f \vec{v} \cdot \vec{n} dS. \quad (46)$$

A este resultado se suele conocer como el **Teorema de integración por partes**, o **Identidad de Green**, aunque no refleja directamente el hecho de ser una fórmula de integración por partes, tal definición es consecuencia de (43). No obstante, las relaciones integrales (45) y (46) son fundamentales porque relacionan todos los operadores diferenciales que se han definido y sus versiones discretas permiten caracterizar los esquemas MDM.

3.2. Operadores miméticos unidimensionales de segundo orden: Gradiente y Divergencia

Para la discretización espacial del dominio $\Omega = [a, b]$, se considera una partición uniforme

$$x_0 < x_1 < \cdots < x_{N-1} < x_N$$

del intervalo $[a, b]$. En ella, los puntos $x_i = x_0 + ih = a + ih$, con $i = 0, 1, \dots, N$, definen las celdas o elementos $[x_{i-1}, x_i]$ cada uno de tamaño $h = (b - a)/N$. Los

nodos intermedios de cada celda quedan dados por

$$x_{i+1/2} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, \quad i = 0, 1, \dots, N - 1.$$

Se define como *mallá escalonada* (staggered mesh) o *mallá mimética* al conjunto de estos puntos (nodos x_i , nodos intermedios $x_{i+1/2}$ y los nodos de frontera) (ver Figura 3).

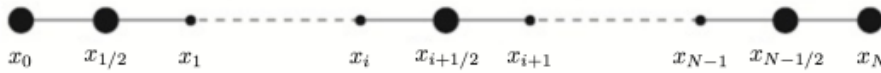


Figura 3. Mallá escalonada unidimensional utilizada por los métodos miméticos.

Por simplicidad para la presentación se ha definido una mallá escalonada uniforme (h constante). No obstante, en la literatura existen versiones de los operadores en mallá no uniformes. Trabajar en este tipo de mallá no uniforme resulta apropiado cuando se quiere tener un control estimado del error o cuando la solución de la ecuación diferencial presenta variaciones rápidas en el dominio.

Para desarrollar las discretizaciones de los operadores gradiente y divergencia para un modelo unidimensional usando como referencia la mallá mimética, introducida en la Figura 3, supongamos que $u(x)$ y $v(x)$ son dos funciones escalares de valor real. La función u es evaluada en los nodos intermedios y los dos nodos de frontera, formando el vector $u = (u_0, u_{1/2}, u_{3/2}, \dots, u_{N-1/2}, u_N)$, mientras v será evaluada en los nodos de las celdas, es decir, $v = (v_0, v_1, v_2, \dots, v_{N-1}, v_N)$. En la práctica, se puede suponer que u será usada para definir los valores de la solución de la ED unidimensional. La versión discreta del operador divergencia, $\nabla \cdot$, se define en el centro de las celdas (nodos internos) y se aplica sobre la forma discreta del funcional v . Mientras, la versión discreta del operador gradiente, ∇ , queda definido en los nodos x_i que definen las celdas al ser aplicado sobre la forma discreta del funcional u .

(ver Figura 4). En la práctica, el operador divergencia se aplica sobre el operador gradiente que en la exposición está representado por v .

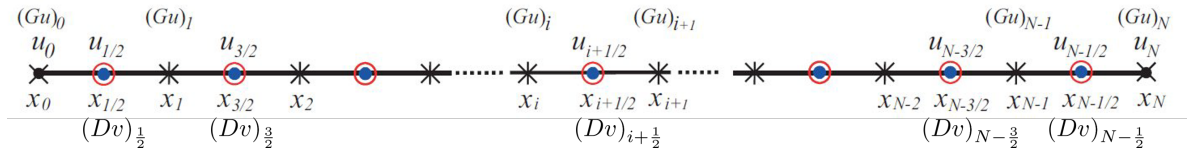


Figura 4. Discretización de los operadores gradiente y divergencia en la malla unidimensional escalonada (staggered mesh).

La discretización del operador gradiente en un punto arbitrario x_i , en el interior de la malla se define mediante la fórmula de diferencias finitas centrales de la primera derivada como:

$$(u)_i = \frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{h_i}, \quad \text{con } 1 \leq i \leq N - 1, \quad (47)$$

cuyo orden de convergencia es cuadrático.

En cuanto a la discretización del gradiente en los nodos x_0 y x_N se requiere de un enfoque distinto, dado que ellos se encuentran en los bordes de la malla mimética y que además en este tipo de malla no se hace uso de los nodos fantasmas que usa el método de diferencias finitas ya que los métodos miméticos están diseñados para conservar propiedades físicas clave (como la conservación de masa o energía) en la versión discreta del modelo, lo cual es esencial para la precisión y estabilidad en problemas físicos. Los nodos fantasma, comunes en métodos de diferencias finitas, pueden agregar valores extrapolados en los bordes que, en algunos casos, afectan esta conservación al introducir información artificial.

Es conocido del Análisis Numérico elemental que aproximaciones que contengan el mismo número de variables que las usadas por aproximaciones centradas en el interior del dominio tienen un orden de aproximación menor, lo que en este caso implicaría que tales aproximaciones serían de primer orden, como se puede ver

en el primer capítulo de³⁰. Es por ello que se necesita utilizar una variable lateral adicional a fin de obtener una aproximación de segundo orden en los extremos. En este caso, se considera primero un desarrollo o expansión de Taylor de la función u en x_0 como:

$$x_{1/2} - x_0 = \left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - x_0 = \frac{h}{2}, \quad (48)$$

y de forma análoga se hace para $x_{3/2}$, entonces se obtienen las expresiones

$$\begin{aligned} u(x_{1/2}) &= u(x_0) + u'(x_0) \left(\frac{h}{2}\right) + \frac{u''(x_0)}{2!} \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \frac{u'''(x_0)}{3!} \left(\frac{h}{2}\right)^3 + \dots, \\ u(x_{3/2}) &= u(x_0) + u'(x_0) \left(\frac{3h}{2}\right) + \frac{u''(x_0)}{2!} \left(\frac{3h}{2}\right)^2 + \frac{u'''(x_0)}{3!} \left(\frac{3h}{2}\right)^3 + \dots, \end{aligned} \quad (49)$$

las cuales resultan de evaluar a u en los nodos $x_{1/2}$ y $x_{3/2}$. Como $\alpha \frac{h}{2} - \beta \frac{3h}{2} = 1$ entonces $\alpha = \frac{3}{h}$ y $\beta = \frac{1}{3h}$.

Las expresiones en (49) representan un sistema de ecuaciones lineales para la primera y la segunda derivada de u , donde es conocido el valor de u en cualquier

³⁰ Gordon D Smith. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*. Oxford university press, 1985.

nodo. Para resolver este sistema para $u'(x_0)$ se tiene en cuenta que

$$\begin{aligned}
\frac{3}{h}u(x_{1/2}) - \frac{1}{3h}u(x_{3/2}) &= u(x_0) \cdot \frac{3}{h} + u'(x_0) \cdot \frac{3h}{4} \\
&\quad + \frac{u''(x_0)}{2!} \cdot \frac{3h^2}{8} + \frac{u'''(x_0)}{3!} \cdot \frac{3h^3}{16} + \dots \\
&\quad - \left(u(x_0) \cdot \frac{1}{3h} + u'(x_0) \cdot \frac{h}{2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{u''(x_0)}{2!} \cdot \frac{3h^2}{8} + \frac{u'''(x_0)}{3!} \cdot \frac{3h^3}{16} + \dots \right) \\
&= \frac{8}{3h}u(x_0) + u'(x_0) - \frac{h^2}{8}u'''(x_0) + \dots
\end{aligned} \tag{50}$$

Por lo tanto,

$$u'(x_0) = -\frac{8}{3h}u(x_0) + \frac{3}{h}u(x_{1/2}) - \frac{1}{3h}u(x_{3/2}) + O(h^2).$$

Mediante esta expresión se define el operador gradiente en x_0 como

$$(u)_0 = -\frac{8}{3h}u_0 + \frac{3}{h}u_{1/2} - \frac{1}{3h}u_{3/2}. \tag{51}$$

De manera similar, se encuentra el operador gradiente en el borde derecho del intervalo $[x_{N-1}, x_N]$. En x_N se obtiene el sistema de ecuaciones lineales para la primera y segunda derivada de u ,

$$\begin{aligned}
u(x_{N-1/2}) &= u(x_N) - u'(x_N) \left(\frac{h}{2}\right) + \frac{u''(x_N)}{2!} \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \frac{u'''(x_N)}{3!} \left(\frac{h}{2}\right)^3 + \dots, \\
u(x_{N-3/2}) &= u(x_N) - u'(x_N) \left(\frac{3h}{2}\right) + \frac{u''(x_N)}{2!} \left(\frac{3h}{2}\right)^2 + \frac{u'''(x_N)}{3!} \left(\frac{3h}{2}\right)^3 + \dots
\end{aligned}$$

Para resolver este sistema para $u'(x_N)$, se tiene en consideración que

$$\begin{aligned}
\frac{3}{h}u(x_{N-1/2}) - \frac{1}{3h}u(x_{N-3/2}) &= \left(u(x_N) \left(\frac{3}{h} \right) - u'(x_N) \left(\frac{h}{2} \right) \left(\frac{3}{h} \right) + \right. \\
&\quad \left. \frac{u''(x_N)}{2!} \left(\frac{h}{2} \right)^2 \left(\frac{3}{h} \right) - \frac{u'''(x_N)}{3!} \left(\frac{h}{2} \right)^3 \left(\frac{3}{h} \right) + \dots \right) \\
&\quad - \left(u(x_N) \left(\frac{1}{3h} \right) - u'(x_N) \left(\frac{3h}{2} \right) \left(\frac{1}{3h} \right) + \right. \\
&\quad \left. \frac{u''(x_N)}{2!} \left(\frac{3h}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{3h} \right) - \frac{u'''(x_N)}{3!} \left(\frac{3h}{2} \right)^3 \left(\frac{1}{3h} \right) + \dots \right) \\
&= \frac{8}{3h}u(x_N) - u'(x_N) + \frac{h^2}{8}u''(x_N) + \dots \quad (52)
\end{aligned}$$

de lo cual se tiene que

$$u'(x_N) = \frac{8}{3h}u(x_N) - \frac{3}{h}u(x_N) + \frac{1}{3h}u(x_N) + O(h^2),$$

que al ser truncada en su término de orden cuadrático produce la discretización de segundo orden para el gradiente en el nodo x_N ,

$$(u)_N = \frac{8}{3h}u_N - \frac{3}{h}u_{N-1/2} + \frac{1}{3h}u_{N-3/2}. \quad (53)$$

Esta expresión es casi idéntica a (51) en el nodo x_0 pero invierte los signos y el orden de las variables independientes.

Las ecuaciones (47), (51) y (53) representan la aproximación del operador gradiente.

Por conveniencia, esta discretización se puede representar en forma matricial de la

forma

$$\overrightarrow{Gu} = \begin{bmatrix} (u)_0 \\ (u)_1 \\ \vdots \\ (u)_{N-1} \\ (u)_N \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -\frac{8}{3} & 3 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{3} & -3 & \frac{8}{3} \end{bmatrix}_{(N+1) \times (N+2)} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_{1/2} \\ u_{3/2} \\ \vdots \\ u_{N-3/2} \\ u_N \end{bmatrix}. \quad (54)$$

Al denotar por \widehat{G} a la matriz de los coeficientes de la discretización del gradiente, la anterior ecuación matricial toma la forma

$$\overrightarrow{Gu} = \frac{1}{h} \widehat{G}u.$$

Por su parte, el operador divergencia está asociado a nodos internos de la malla mímica, en los cuales se considera el tradicional esquema de diferencias centradas de segundo orden,

$$(v)_{i+1/2} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h}, \quad i = 1, \dots, N - 1, \quad (55)$$

la cual produce la discretización de cualquier función escalar v definida en los nodos enteros interiores x_i , con $i = 0, 1, \dots, N - 1$, como lo indica la Figura 4. La función v es en la mayoría de los casos el gradiente de una función escalar.

Al igual que en el caso del operador gradiente, es conveniente agrupar la discretiza-

ción de la divergencia en la forma matricial de la forma

$$\overrightarrow{Dv} = \begin{bmatrix} 0 \\ (u)_{1/2} \\ \vdots \\ (u)_{N-1/2} \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{N+2 \times N+1} \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N-2} \\ v_{N-1} \\ v_N \end{bmatrix}. \quad (56)$$

En esta fórmula se han agregado por conveniencia una fila de ceros al comienzo y al final para obtener una matriz cuadrada al componer los operadores divergencia y gradiente.

Denotando a D como la matriz bidimensional de los coeficientes correspondientes a la discretización del operador divergencia, la ecuación anterior se puede escribir de la forma

$$\overrightarrow{Dv} = \frac{1}{h} \widehat{v}. \quad (57)$$

Como se verá, la formulación matricial de los operadores gradiente y divergencia es de suma utilidad cuando se establezca la discretización de la ecuación diferencial a resolver.

A manera de resumen, la definición de los operadores gradiente y divergencia en los nodos de la malla mimética está dada por las relaciones

$$G : NF \rightarrow NE \quad (58)$$

$$D : NE \rightarrow NF \quad (59)$$

donde NF representa los nodos con subíndice fraccionario, incluyendo los bordes, y NE representa los nodos con subíndice entero. Cabe resaltar que en un modelo

mimético unidimensional, la motivación para ubicar el operador de divergencia en los nodos internos y el operador de gradiente en los nodos intermedios viene dada por:

- **La conservación del flujo se mantenga en cada celda:** La divergencia, ubicada en los nodos internos, permite calcular el flujo neto que entra o sale de cada celda, garantizando que la conservación de propiedades físicas (como masa o energía) se respete en el esquema discreto.
- **Los operadores mantengan una relación coherente entre gradiente y divergencia:** La disposición de estos operadores en la malla mimética permite que se preserve la relación fundamental entre gradiente y divergencia, reflejando propiedades de cálculo vectorial en el contexto discreto. Esto es esencial para que el operador de divergencia aplicado al operador de gradiente sea consistente con el operador laplaciano en el caso continuo.
- **Se evite la necesidad de nodos fantasma y se respeten las condiciones de frontera de forma directa:** La ubicación del gradiente en los nodos intermedios y de la divergencia en los nodos internos permite una adecuada definición de los operadores en los bordes de la malla, sin necesidad de extrapolaciones adicionales. Esto facilita la aplicación de condiciones de frontera en el modelo.

Esta disposición en la malla discreta, propia del enfoque mimético, permite preservar las propiedades estructurales del problema físico, asegurando una representación fiel y precisa del sistema en el dominio discreto.

3.3. Versión semidiscreta del teorema de Green-Stokes-Gauss

El teorema de Green-Stokes-Gauss tiene un papel fundamental en el desarrollo del concepto de métodos miméticos. Debido a que el estudio teórico a realizar en

este trabajo es de carácter unidimensional se tiene que tal teorema, dado en su forma tridimensional en (46), se reduce en este contexto a la tradicional formula de integración por partes:

$$\int_a^b u(x)dv = uv \Big|_a^b - \int_a^b v(x)du. \quad (60)$$

Mediante los cambios de variable,

$$u = f(x), \quad du = f'(x)dx \quad \text{y} \quad v = v(x), \quad dv = v'(x)dx, \quad (61)$$

y asumiendo que $a = 0$ y $b = 1$ se tiene que

$$\int_0^1 v'(x)f(x)dx + \int_0^1 v(x)f'(x)dx = v(1)f(1) - v(0)f(0). \quad (62)$$

Se debe recordar que en esta expresión $v'(x)$ juega el papel de operador divergencia y $f'(x)$ el papel del operador gradiente. También es importante tener en cuenta que cuando en (62) la función f o v es constante, la ecuación se reduce al Teorema Fundamental del Cálculo, lo cual establece que la fórmula de integración por partes es una ampliación de este último teorema.

Para obtener la versión semidiscreta de la fórmula de integración por partes sobre la malla mimética descrita en la Figura 3 se deben buscar las restricciones apropiadas de las funciones v y f en los nodos de la malla. Observando que la función v esta evaluada en el operador divergencia de la fórmula de integración por partes entonces se define su restricción sobre la malla mediante el vector \vec{v} dado por la expresión

$$\vec{v} = (v(x_0), v(x_1), \dots, v(x_N))^T. \quad (63)$$

De forma análoga, la función f evaluada en el operador gradiente, su restricción a

la malla mimética debe venir especificada por el vector f definido de la forma

$$\vec{f} = (f(x_0), f(x_{1/2}), \dots, f(x_{N-1/2}), f(x_N))^t \quad (64)$$

Una vez obtenidos los vectores y de forma consistente con las discretizaciones de los operadores gradiente y divergencia es necesario definir las fórmulas de integración que evaluarán las integrales que aparecen en la fórmula de integración por partes (62). En el caso de la primera integral, cuyo integrando está definido en los nodos intermedios, la *fórmula de cuadratura del punto medio* permite obtener la representación

$$\int_0^1 v'(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} Div(v(x_{i+1/2}))f(x_{i+1/2})h + E_1, \quad (65)$$

donde $Div(\cdot)$ denota el operador divergencia unidimensional y E_1 el error de aproximación de la cuadratura numérica del punto medio. Por otro lado, el integrando de la segunda integral en la fórmula de integración por partes (62), está definido en los nodos que definen las celdas de la malla. En consecuencia, tal integral se puede aproximar por la *fórmula de Newton-Cotes de 3/8*, es decir

$$\begin{aligned} \int_0^1 v(x)f'(x)dx &= \frac{3h}{8}v(x_0) Grad(f(x_0)) + \frac{9h}{8}v(x_1) Grad(f(x_1)) \\ &+ \sum_{i=2}^{N-2} hv(x_i) Grad(f(x_i)) + \frac{9h}{8}v(x_{N-1}) Grad(f(x_{N-1})) \\ &+ \frac{3h}{8}v(x_N) Grad(f(x_N)) + E_2, \end{aligned} \quad (66)$$

donde $Grad(\cdot)$ denota al operador gradiente continuo unidimensional y E_2 el error de aproximación de la cuadratura numérica. Estas dos expresiones para las integrales pueden ser escritas en forma de ciertos productos internos.

Para ello se define el producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$ de dos vectores x y y en un espacio vectorial finito dimensional de la forma

$$\langle x, y \rangle_A = x^T A y, \quad (67)$$

en la cual A es una matriz simétrica y definida positiva, que en este caso en particular representa una matriz diagonal de pesos.

De acuerdo con esta notación, se tiene para (65) que

$$\int_0^1 v'(x) f(x) dx = \langle \overrightarrow{\text{Div}(v)}, \vec{f} \rangle_{hI} + E_1, \quad (68)$$

donde hI representa el producto de la matriz identidad I y el tamaño h de las celdas de la malla, y $\overrightarrow{\text{Div}(v)}$ representa el vector cuyas entradas contiene la evaluación del operador divergencia continuo de v en los nodos centrales $x_{i+1/2}$. De igual modo, la aproximación en (66) se puede escribir en términos del producto interno (67) de la forma

$$\int_0^1 v(x) f'(x) dx = \langle \vec{v}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)} \rangle_{hP} + E_2, \quad (69)$$

donde P es la matriz diagonal

$$P = \begin{bmatrix} \frac{3}{8} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \frac{9}{8} & 0 & & & & \vdots \\ \vdots & 0 & 1 & 0 & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & 0 & 1 & 0 & \vdots \\ \vdots & & & & 0 & \frac{9}{8} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{3}{8} \end{bmatrix}, \quad (70)$$

cuyos coeficientes están determinados por la fórmula de Newton-Cotes, $\text{Grad}(f)$ es el vector cuyas entradas tienen la evaluación del operador gradiente continuo de f en los puntos x_i , y hP es el producto escalar-matriz análogo a (67).

Debido a que se están empleando distintas fórmulas para aproximar las integrales y ellas están evaluadas en puntos diferentes entonces es imposible, en general, que la suma de los productos internos (68) y (69) produzcan exactamente la diferencia $v(1)f(1) - v(0)f(0)$ que aparece en la versión continua de la fórmula de integración por partes (62); en otras palabras, que los errores E_1 y E_2 sean iguales a cero.

En vista de esta observación, la suma de los productos internos (68) y (69) se denotará por una función, que se llamará BO, la cual depende de la divergencia continua de v , el gradiente continuo de f , los vectores \vec{f} y \vec{v} , y el nivel de discretización h . En consecuencia, la versión semidiscreta del teorema de Green-Stokes-Gauss viene representada por la expresión

$$\langle \overrightarrow{\text{Div}(v)}, \vec{f} \rangle_{hI} + \langle \vec{v}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)} \rangle_{hP} = \text{BO}(\overrightarrow{\text{Div}(v)}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)}, \vec{f}, \vec{v}, h). \quad (71)$$

Esta fórmula semidiscreta, aunque bastante general, está completamente asociada a la malla mimética de la figura (3) y a las fórmulas de cuadraturas utilizadas para discretizar las integrales. Por lo tanto, es evidente que la versión semidiscreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss (71) es solamente una de las muchas que se pueden generar cambiando la fórmulas de cuadraturas, sin embargo todas ellas tendrán una formulación análoga donde solamente cambiarán las matrices de pesos en los productos internos.

Por construcción, cualquier versión semidiscreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss (71) es consistente con su versión continua puesto que se están usando los operadores continuos $\text{Div}(\cdot)$, $\text{Grad}(\cdot)$ y las fórmulas de cuadraturas convergentes en su formulación.

3.4. Concepto de esquema mimético

No existe en la literatura consultada una definición clara y precisa del concepto de método mimético. Sin embargo, todas mencionan una versión discretizada del teorema de Green-Stokes-Gauss, los esquemas conservativos como casos particulares y la consistencia matricial de la composición de las discretizaciones de los operadores. Estas propiedades se agrupan en la siguiente definición.

Definición 3.4.1. (Esquema mimético). Se asume que la discretización de los operadores gradiente y divergencia sobre una malla escalonada o malla mimética forman un esquema mimético si ellos satisfacen las siguientes condiciones:

- a) La sustitución de los operadores gradiente, $\text{Grad}(\cdot)$, y divergencia, $\text{Div}(\cdot)$, por sus discretizaciones y en alguna versión semidiscreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss sobre una malla mimética, deben producir una fórmula discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss. Esta última debe ser consistente con la fórmula continua del Teorema de integración por partes y su expresión explícita para la función BO debe ser algebraicamente invariante bajo refinamientos de malla conteniendo la diferencia $v(1)(1) - v(0)(0)$ como término independiente sin que sus componentes, $v(1)f(1)$ y $v(0)f(0)$, se repitan en ninguna otra parte.
- b) La versión discreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss obtenida en la parte (a) debe reducirse a una versión discreta y exacta del Teorema Fundamental del Cálculo cuando v o f sean constantes.
- c) La composición de los operadores discretos G con D debe resultar en una discretización consistente con el Laplaciano en todos los centros de bloques de la malla mimética.

Todas estas condiciones son típicas para caracterizar los métodos miméticos, excepto la parte (a), en la cual generalmente se exige que la función BO sea exacta-

mente igual a $v(1)f(1) - v(0)f(0)$. Sin embargo, esta condición ha sido relajada en la definición considerada debido a que ella no puede ser satisfecha para discretizaciones del operador gradiente de orden superior en los bordes como lo mencionan Castillo y Hyman en³¹. Por otro lado, la parte (b) garantiza que el esquema es conservativo a cualquier nivel de discretización y (c) establece que los operadores discretos y producirán discretizaciones consistentes de las ecuaciones diferenciales parciales en las cuales ellos aparezcan.

En las próximas secciones se demuestra que las discretizaciones (54) y (56) correspondientes a los operadores gradiente y divergencia satisfacen la definición dada.

3.5. Versión discreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss

Para verificar la condición (a) de la Definición 3.4.1 se sustituyen las versiones continuas de divergencia, $\overrightarrow{\text{Div}(v)}$, y gradiente, $\overrightarrow{\text{Grad}(f)}$, en la fórmula semidiscreta (71) por sus discretizaciones v y f . Después de dicha sustitución los productos internos (68) y (69) en (71) se tiene que

$$\text{BO}(\overrightarrow{\text{Div}(v)}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)}, \vec{f}, \vec{v}, h) = \langle \overrightarrow{\text{Div}(v)}, \vec{f} \rangle_{hI} + \langle \vec{v}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)} \rangle_{hP},$$

³¹ Castillo y Grone, "A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law", ver n. 27.

esta expresión es equivalente a

$$\begin{aligned}
& \langle \overrightarrow{\text{Div}(v)}, \vec{f} \rangle_{hI} + \langle \vec{v}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)} \rangle_{hP} = \\
& \sum_{i=0}^{N-1} \text{Div}(v(x_{i+1/2})) f(x_{i+1/2}) h + \frac{3h}{8} v(x_0) \text{Grad}(f(x_0)) + \frac{9h}{8} v(x_1) \text{Grad}(f(x_1)) \\
& + \sum_{i=2}^{N-2} hv(x_i) \text{Grad}(f(x_i)) + \frac{9h}{8} v(x_{N-1}) \text{Grad}(f(x_{N-1})) + \frac{3h}{8} v(x_N) \text{Grad}(f(x_N)) \\
& = \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{v(x_{i+1}) - v(x_i)}{h} \right) f(x_{i+1/2}) h + \frac{3h}{8} v(x_0) \left(-\frac{8}{3h} f(x_0) + \frac{3}{h} f(x_{1/2}) - \frac{1}{3h} f(x_{3/2}) \right) \\
& + \frac{9h}{8} v(x_1) \left(\frac{f(x_{3/2}) - f(x_{1/2})}{h} \right) + \sum_{i=2}^{N-2} hv(x_i) \left(\frac{f(x_{i+1/2}) - f(x_{i-1/2})}{h} \right) \\
& + \frac{9h}{8} v(x_{N-1}) \left(\frac{f(x_{N-1/2}) - f(x_{N-3/2})}{h} \right) \\
& + \frac{3h}{8} v(x_N) \left(\frac{8}{3h} f(x_N) - \frac{3}{h} f(x_{N-1/2}) + \frac{1}{3h} f(x_{N-3/2}) \right) \\
& = \sum_{i=0}^{N-1} (v(x_{i+1}) - v(x_i)) f(x_{i+1/2}) + v(x_0) \left(-f(x_0) + \frac{9}{8} f(x_{1/2}) - \frac{1}{8} f(x_{3/2}) \right) \\
& + \frac{9}{8} v(x_1) (f(x_{3/2}) - f(x_{1/2})) + \sum_{i=2}^{N-2} v(x_i) (f(x_{i+1/2}) - f(x_{i-1/2})) \\
& + \frac{9}{8} v(x_{N-1}) (f(x_{N-1/2}) - f(x_{N-3/2})) + v(x_N) \left(f(x_N) - \frac{9}{8} f(x_{N-1/2}) + \frac{1}{8} f(x_{N-3/2}) \right) \\
& = v(x_N) f(x_N) - v(x_0) f(x_0) + \frac{1}{8} (v(x_1) - v(x_0)) (f(x_{3/2}) - f(x_{1/2})) \\
& + \frac{1}{8} (v(x_N) - v(x_{N-1})) (f(x_{N-3/2}) - f(x_{N-1/2})),
\end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned}
BO(\vec{f}, \vec{v}) &= v(1)f(1) - v(0)f(0) + \frac{1}{8} (v(x_1) - v(x_0)) (f(x_{3/2}) - f(x_{1/2})) \\
& + \frac{1}{8} (v(x_N) - v(x_{N-1})) (f(x_{N-3/2}) - f(x_{N-1/2})),
\end{aligned} \tag{72}$$

donde la diferencia de los términos $v(1)f(1)$ y $v(0)f(0)$ aparece explícitamente como términos independiente en esta expresión, y que su producto no se repite. Esta

expresión en muy interesante pues sus términos o factores no cambian bajo refinamientos de malla, es decir (72) es una expresión algebraicamente invariante bajo refinamientos de malla. Sin embargo, esta expresión es numéricamente variable, pero la continuidad de las funciones f y v garantizan que bajo refinamientos de malla se satisface la consistencia de la función BO y el término $v(1)f(1) - v(0)f(0)$, de lo cual establece que

$$\lim_{h \rightarrow 0} BO(\vec{f}, \vec{v}) = v(1)f(1) - v(0)f(0), \quad \text{donde} \quad BO(\vec{f}, \vec{v}) = BO(\overrightarrow{\text{Div}(v)}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)}, \vec{f}, \vec{v}, h). \quad (73)$$

Finalmente, de (72) se obtiene que la expresión de BO se puede escribir en forma matricial como

$$BO(\vec{f}, \vec{v}) = \langle \vec{v}, \vec{f} \rangle_I, \quad (74)$$

donde es la matriz

$$= \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{8} & \frac{1}{8} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{8} & -\frac{1}{8} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{(N+2) \times (N+1)}, \quad (75)$$

que multiplica al vector \vec{v} , siendo este orden consistente con la notación de la integral de volumen que aparece en la versión continua del Teorema de Green-Stokes-

Gauss. Los coeficientes de la matriz B son motivados directamente por la expresión, algebraicamente invariante, de la función BO .

Por otro lado, mediante la sustitución de las discretizaciones v y f en la versión semidiscreta del teorema de Green-Stokes-Gauss permite establecer que la relación entre sus respectivos productos internos está dada como

$$\langle \overrightarrow{Dv}, \vec{f} \rangle_{hI} + \langle \vec{v}, \overrightarrow{Gf} \rangle_{hP} = \langle \hat{D}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I + \langle \vec{v}, \hat{G}\vec{f} \rangle_P. \quad (76)$$

Por construcción de las fórmulas de cuadratura y la discretizaciones v y f , la consistencia de los productos internos en (76) respecto de las integrales que aparecen en la fórmula de integración por partes en (62) esta garantizada. Por lo tanto, se pueden establecer los correspondientes límites asociados a la consistencia dados a continuación, con lo cual quedan demostrados todos los puntos de la parte (a) de la definición de esquema mimético:

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \langle \overrightarrow{Dv}, \vec{f} \rangle_{hI} &= \lim_{h \rightarrow 0} \langle \vec{v}, \vec{f} \rangle_I = \int_0^1 v'(x) f(x) dx, \\ \lim_{h \rightarrow 0} \langle \vec{v}, \overrightarrow{Gf} \rangle_{hP} &= \lim_{h \rightarrow 0} \langle \vec{v}, \hat{f} \rangle_P = \int_0^1 v(x) f'(x) dx. \end{aligned} \quad (77)$$

Por último, de las ecuaciones (74) y (76) se obtiene la versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss,

$$\begin{aligned} \langle \overrightarrow{Dv}, \vec{f} \rangle_{hI} + \langle \vec{v}, \overrightarrow{Gf} \rangle_{hP} &= \langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle_I, \\ \langle \vec{v}, \vec{f} \rangle_I + \langle \vec{v}, \hat{f} \rangle_P &= \langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle_I. \end{aligned} \quad (78)$$

La relación dada por (78) permite calcular la matriz B . Como se indica en el siguiente corolario. A partir de la versión discreta del Teorema Green-Stokes-Gauss, se cumple que

$$B = Q +^T P.$$

Demostración. Se tiene que

$$\langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle_I = \langle \overrightarrow{\text{Div}(v)}, \vec{f} \rangle_Q + \langle \vec{v}, \overrightarrow{\text{Grad}(f)} \rangle_P. \quad (79)$$

Desarrollando los anteriores productos internos se tiene que

$$(Bv)^T I f = (D\vec{v})^T Q f + v^T P f,$$

$$v^T B^T f = v^T D^T Q f + v^T P f,$$

$$v^T B^T f = v^T ({}^T Q + P) f,$$

$$B^T = ({}^T Q + P),$$

$$(B^T)^T = ({}^T Q + P)^T,$$

$$B = ({}^T Q)^T + (P)^T,$$

$$B = Q^T + {}^T P^T,$$

donde a la matriz Q se le han aumentado dos filas de ceros (primera y última) para hacer la suma consistente, donde la entrada en la diagonal es uno (puesto que es definida positiva), así que $Q^T = Q$ donde Q es de tamaño $(N+2) \times (N+2)$; Además, P es una matriz diagonal de dimensión $(N+1) \times (N+1)$, de modo que $P^T = P$. Cabe recordar que el gradiente es de dimensión $(N+1) \times (N+2)$, mientras que la divergencia es de dimensión $(N+2) \times (N+1)$, después de haber agregado una fila de ceros al comienzo y al final, como se indicó en (56), y al trasponer a se obtienen las dimensiones deseadas, por lo tanto se cumple que

$$B = Q + {}^T P. \quad \square$$

3.6. Ley de conservación

Si bien se estableció que las discretizaciones \overrightarrow{Dv} y \overrightarrow{Gf} satisfacen una versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss, cuyo lado derecho es asintóticamente igual a la diferencia $v(1)f(1) - v(0)f(0)$, aún no es evidente que el esquema sea conservativo. A fin de verificar esta condición se supone que la función v es constante y se sustituye en la versión discreta del Teorema de Green-Stokes-Gauss, con lo cual

$$\langle \vec{v}, \overrightarrow{Gf} \rangle_{hP} = \langle \vec{v}, \widehat{f} \rangle_P = \langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle_I. \quad (80)$$

De forma análoga, si se supone que f es constante se tiene que

$$\langle \overrightarrow{Dv}, \vec{f} \rangle_{hI} = \langle \widehat{v}, \vec{f} \rangle_I = \langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle_I. \quad (81)$$

En ambas ecuaciones, de la expresión de la función BO en (74) se tiene que:

$$\langle B\vec{v}, \vec{f} \rangle_I = \begin{cases} (f(1) - f(0)) \cdot v & \text{si } v \equiv \text{constante,} \\ (v(1) - v(0)) \cdot f & \text{si } f \equiv \text{constante,} \end{cases} \quad (82)$$

de lo cual se sigue que (80) y (81) representan las versiones discretas exactas del Teorema Fundamental del Cálculo obtenidas del Teorema de Green-Stokes-Gauss discreto. Por lo tanto, las discretizaciones \overrightarrow{Dv} y \overrightarrow{Gf} son conservativas y cumplen cabalmente la condición (b) de la definición de esquema mimético.

Es importante señalar que el carácter conservativo de \overrightarrow{Dv} y \overrightarrow{Gf} se puede demostrar sin hacer uso de la versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss. Sin embargo, ello no implicaría que se cumple la condición (a), pues es posible encontrar discretizaciones conservativas donde una función no constante posee gradiente discreto nulo, la cual no podrá satisfacer ninguna versión del Teorema de Green-Stokes-Gauss.

3.7. Consistencia

La última condición en la Definición 3.4.1 considerada de esquema mimético usualmente no se impone en algunos trabajos de investigación, pues se supone que las condiciones (a) y (b) en la definición implican automáticamente la consistencia del esquema. Un ejemplo de esta situación puede verse en algunos esquemas conservativos propuestos en³².

La composición de las discretizaciones de la divergencia y el gradiente, \vec{v} y \vec{f} , es equivalente al producto matricial $(1/h)\hat{\cdot}(1/h)\hat{\cdot}$ lo cual se puede apreciar en la siguiente secuencia de formulas.

$$\circ\vec{u} = (\vec{u}) = \left(\frac{1}{h}\hat{\cdot}\vec{u}\right) = \left(\frac{1}{h}\hat{\cdot}\frac{1}{h}\hat{\cdot}\right)\vec{u} = \left(\frac{1}{h^2}\hat{\cdot}\right)\vec{u}$$

La matriz $(1/h^2)\hat{\cdot}$ es cuadrada de orden $N + 2 \times N + 2$, con sus primera y última filas nulas como resultado de la definición de $\hat{\cdot}$. Siendo esto muy conveniente pues la composición del gradiente con la divergencia produce el operador Laplaciano, el cual no debe estar definido en los bordes. La estructura resultante del producto de

³² Mikhail Shashkov. "Conservative Finite-Difference Methods on General Grids". En: *Symbolic & Numeric Computation. Taylor & Francis* 1 (1995).

estas matrices se presenta a continuación:

$$\frac{1}{h^2} \hat{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{8}{3h^2} & -\frac{4}{h^2} & \frac{4}{3h^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & -\frac{1}{h^2} & 0 \\ 0 & \dots & & 0 & \frac{4}{3h^2} & -\frac{4}{h^2} & \frac{8}{3h^2} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{N+2 \times N+2} \quad (83)$$

Del análisis numérico elemental se sabe que las discretizaciones correspondientes a las filas con coeficientes 1, -2 y 1 satisfacen

$$\frac{u_{i+\frac{3}{2}} - 2u_{i+\frac{1}{2}} + u_{i-\frac{1}{2}}}{h^2} - u''(x_{i+\frac{1}{2}}) = O(h^2),$$

y por lo tanto son consistentes con el operador Laplaciano continuo.

Por otro lado los desarrollos de Taylor producidos por la expresiones provenientes de la segunda y penúltima filas verifican:

$$\frac{\frac{8}{3}u_0 - 4u_{\frac{1}{2}} + \frac{4}{3}u_{\frac{3}{2}}}{h^2} - u''(x_{\frac{1}{2}}) = O(h)$$

$$\frac{\frac{8}{3}u_N - 4u_{N-\frac{1}{2}} + \frac{4}{3}u_{N-\frac{3}{2}}}{h^2} - u''(x_{N-\frac{1}{2}}) = O(h),$$

lo cual quiere decir que son también linealmente consistentes con el operador Laplaciano continuo.

En consecuencia, se ha establecido que las discretizaciones de divergencia y gradientes propuestas satisfacen la condición (c) de la definición de esquema mimético,

probándose que ellas representan un esquema mimético.

3.8. Esquema mimético para la ecuación de convección-difusión en régimen estacionario

Se comienza recordando que el problema de valor de frontera modelo a resolver está dado por la ecuación estacionaria de convección-difusión no conservativa,

$$-k \frac{d^2 u}{dx^2} + v \frac{du}{dx} = f(x) \quad \text{en } \Omega = (0, L), \quad (84)$$

sujeta a condiciones de frontera tipo Robin:

$$\begin{aligned} \alpha u(0) - \beta u'(0) &= C_0, \\ \alpha u(L) + \beta u'(L) &= C_1. \end{aligned} \quad (85)$$

La aproximación de ecuaciones diferenciales mediante las discretizaciones miméticas de los operadores gradiente y divergencia se obtiene por medio de su sustitución directa en la ecuación reemplazando los operadores continuos. El esquema numérico resultante para la ecuación será mimético puesto que las discretizaciones de los operadores que la conforman también lo son. Debido a que las discretizaciones miméticas en cualquier dimensión pueden ser representadas matricialmente, entonces la aproximación mimética de toda ecuación diferencial parcial, basada en los operadores gradiente y divergencia puede ser descrita de forma matricial incluyendo sus condiciones de borde.

A continuación se presenta, de forma matricial, el esquema mimético para la ecuación de convección-difusión (84) junto a las condiciones de frontera (85) para una región unidimensional.

Se considera el esquema con los operadores miméticos discretos considerados anteriormente en una malla uniforme en el espacio con paso h con $U_i \approx u(x_i)$. Así que

la discretización para la ecuación diferencial del anterior problema es:

$$-kU + v\tilde{I}U = F, \quad (86)$$

donde F representa la restricción de f a la malla mimética, es decir,

$$F = (0, f(x_{1/2}), \dots, f(x_{N-1/2}), 0)^T,$$

\tilde{I} es un operador de interpolación de segundo orden de los nodos fraccionarios a los nodos enteros y $U = (U_0, U_{1/2}, \dots, U_{N-1/2}, U_N)^T$ es el vector solución (nodos fraccionarios).

Para la condición de frontera, se tiene que

$$[[\alpha] + [\beta]B]U = f_{ab}, \quad (87)$$

donde, B es el operador de frontera dado en (75), $f_{ab} = (C_0, 0, \dots, 0, C_L)^T$ y las matrices $[\alpha]$ y $[\beta]$ son tales que

$$[\alpha] = \begin{bmatrix} \alpha_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_L \end{bmatrix}_{(N+2) \times (N+2)}, \quad [\beta] = \begin{bmatrix} \beta_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \beta_L \end{bmatrix}_{(N+2) \times (N+2)}.$$

Cada matriz $[\alpha]$ y $[\beta]$, contiene únicamente dos entradas no nulas porque la malla utilizada contiene solamente dos bordes que son los extremos del intervalo.

Por lo tanto, combinando (131) y (132) se obtiene el esquema mimético para resolver

numéricamente el problema de convección-difusión considerado,

$$\left[-k + v\tilde{I} + [\alpha] + [\beta]B \right] U = F + f_{ab}. \quad (88)$$

4. Análisis de Convergencia

A continuación se expondrá una prueba analítica de convergencia para el esquema mimético de la ecuación de convección difusión en una dimensión (84). Dicho esquema se basa en las discretizaciones miméticas de segundo orden para los operadores gradientes y divergencia desarrollados en el capítulo anterior.

La presentación del análisis tiene el siguiente orden. Inicialmente se describe el método mimético obteniéndose simultáneamente un esquema conservativo asociado. Después se procede a demostrar la convergencia del esquema conservativo usando una versión modificada del tradicional principio de módulo máximo. En seguida se invoca un estudio de perturbación demostrando que la diferencia de las aproximaciones obtenidas mediante los esquemas mimético y el conservativo asociado son asintóticamente iguales bajo refinamientos de malla. Por último, se obtiene la convergencia cuadrática del esquema mimético.

4.1. Problema: La ecuación de Poisson unidimensional

Para el análisis del esquema mimético se simplificará el problema modelo (84) tomando los parámetros del problema $-k, \beta_0, \beta_L$ iguales a 1 y $v = 0$ con la intención de simplificar y generar más claridad en algunos cálculos llevados a cabo. Realizando los ajustes ya mencionados se obtiene como resultado la ecuación de Poisson unidimensional

$$\frac{d^2 u}{dx^2}(x) = f(x) \quad x \in (0, 1), \quad (89)$$

sujeta a las siguientes condiciones de Robin en sus extremos:

$$\begin{aligned} \alpha_0 u(0) - u_x(0) &= C_0, \\ \alpha_L u(L) + u_x(L) &= C_1. \end{aligned} \quad (90)$$

Se supone que los coeficientes α_0 y α_L son no nulos para garantizar el buen planteamiento del problema de contorno.

En los próximos dos apartados se plantearán dos discretizaciones para el problema de contorno (89) y (90). La primera de ellas corresponde al esquema mimético propuesto y la segunda es un esquema conservativo del cual el primer esquema es una perturbación. El esquema numérico resultante satisface la condición (b) de ley de conservación en la definición de esquema mimético.

4.2. Esquema mimético propuesto

Si se parte de una discretización del dominio $[0, 1]$ en una malla escalonada y de las discretizaciones de los operadores, la aproximación MDM para la ecuación (89) queda dada por

$$U = F, \quad (91)$$

donde U representa la solución aproximada MDM a la solución exacta, u , del problema en los nodos fraccionarios de la malla:

$$U = (U_0, U_{1/2}, U_{3/2}, \dots, U_{i+1/2}, \dots, U_{N-1/2}, U_N)^t,$$

y F representa la restricción de f a la malla mimética:

$$F = (0, f(x_{1/2}), \dots, f(x_{N-1/2}), 0)^t.$$

Los valores iguales a cero en los nodos de frontera de F es debido a que el operador divergencia discreto no actúa sobre la frontera.

Para la discretización de las condiciones de contorno Robin (90) se obtiene

$$[\mathbf{A} +]U = f_{ab}, \quad (92)$$

donde, es el operador de frontera dado en (75), el vector f_{ab} resulta de restringir el término no homogéneo de (90) a la malla mimética, es decir, $f_{ab} = (C_0, 0, \dots, 0, C_1)^t$. A es una matriz de ceros con las entradas $A(1, 1) = \alpha_0$ y $A(N + 2, N + 2) = \alpha_L$. A partir de (91) y (92), el esquema mimético para el problema (89)-(90) queda dado por

$$[+\mathbf{A} + B]U = F + f_{ab}, \quad (93)$$

donde

$$F + f_{ab} = (C_0, f(x_{1/2}), \dots, f(x_{N-1/2}), C_1)^T.$$

De esta manera, el esquema (93) queda formado por un sistema de $N + 2$ ecuaciones lineales detalladas a continuación. La primera ecuación viene dada por la siguiente expresión

$$\left(\frac{8}{3h} + \alpha_0\right)U_0 - \frac{3}{h}U_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{3h}U_{\frac{3}{2}} = C_0, \quad (94)$$

que representa la discretización de segundo orden de la condición de Robin en el extremo izquierdo, $x_0 = 0$, del intervalo.

La segunda ecuación del sistema,

$$\left(\frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h}\right)U_0 - \left(\frac{4}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)U_{\frac{1}{2}} + \left(\frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h}\right)U_{\frac{3}{2}} = f_{\frac{1}{2}} \quad (95)$$

representa una discretización de primer orden de la ecuación de Poisson y esta centrada en el nodo $x_{\frac{1}{2}}$.

La tercera ecuación del sistema viene dada por

$$\left(\frac{1}{3h}\right)U_0 + \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)U_{\frac{1}{2}} - \left(\frac{2}{h^2} - \frac{1}{6h}\right)U_{\frac{3}{2}} + \left(\frac{1}{h^2}\right)U_{\frac{5}{2}} = f_{\frac{3}{2}}, \quad (96)$$

la cual es una discretización consistente de primer orden y completamente atípica de la ecuación de Poisson basada en el nodo $x_{\frac{3}{2}}$.

El siguiente conjunto de ecuaciones en el sistema lineal

$$\left(\frac{1}{h^2}\right)U_{i-\frac{1}{2}} - \left(\frac{2}{h^2}\right)U_{i+\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{h^2}\right)U_{i+\frac{3}{2}} = f_{i+\frac{1}{2}}, \quad i = 2, \dots, N-3 \quad (97)$$

corresponde a la discretización estándar, centrada, consistente y de segundo orden, para la ecuación de Poisson en los nodos $x_{i+\frac{1}{2}}$ para $i = 2, \dots, N-3$.

La antepenúltima ecuación,

$$\left(\frac{1}{h^2}\right)U_{N-\frac{5}{2}} - \left(\frac{2}{h^2} - \frac{1}{6h}\right)U_{N-\frac{3}{2}} + \left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)U_{N-\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{3h}\right)U_N = f_{N-\frac{3}{2}} \quad (98)$$

es una discretización atípica y consistente de primer orden para la ecuación de Poisson. Esta basada en el nodo $x_{N-\frac{3}{2}}$.

La penúltima ecuación,

$$\left(\frac{4}{3h^2} - \frac{1}{6h}\right)U_{N-\frac{3}{2}} - \left(\frac{4}{h^2} - \frac{1}{2h}\right)U_{N-\frac{1}{2}} + \left(\frac{8}{3h^2} - \frac{1}{3h}\right)U_N = f_{N-\frac{1}{2}} \quad (99)$$

representa una discretización de primer orden de la ecuación de Poisson y esta centrada en el nodo $x_{N-\frac{1}{2}}$.

Por último, se tiene la ecuación

$$\left(\frac{1}{3h}\right)U_{N-\frac{3}{2}} - \left(\frac{3}{h}\right)U_{N-\frac{1}{2}} + \left(\frac{8}{3h} + \alpha_L\right)U_N = C_1, \quad (100)$$

que aproxima cuadráticamente la condición de Robin en el extremo derecho del intervalo correspondiente al nodo $x_N = 1$.

Se denota al vector de los errores de truncación asociado a cada una de las ecuaciones anteriores por \vec{T} . Entonces, utilizando la expansión de Taylor sus entradas pueden ser escritas de la siguiente manera. Para la ecuación (94) se tiene la si-

guiente expresión

$$\alpha_0 u(x_0) - u'(x_0) + \frac{h^2}{8} u'''(x_0) + O(h^3) - C_0.$$

Por lo tanto, (94) tiene orden

$$T_0 = O(h^2).$$

Mediante un proceso análogo para la ecuación (95), se obtiene la siguiente expresión:

$$-\frac{h}{8} u''(x_{\frac{1}{2}}) + O(h^2) - f_{\frac{1}{2}}.$$

Por lo tanto, para (95) se tiene que

$$T_{\frac{1}{2}} = O(h).$$

Realizando este mismo proceso para las ecuaciones restantes se obtiene que

$$\begin{aligned} T_N &= O(h^2), \\ T_{\frac{3}{2}} &= T_{N-\frac{3}{2}} = T_{N-\frac{1}{2}} = O(h), \\ T_{i+\frac{1}{2}} &= O(h^2) \quad \text{para } i = 2, \dots, N-3. \end{aligned}$$

4.3. Esquema Conservativo Asociado

La formulación del esquema mimético se basa de manera fundamental en la discretización lateral de segundo orden del operador gradiente, dado por las ecuaciones (51) y (53), y la matriz , (75), generada por la versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss. Ciertamente la matriz no está motivada por la discretización de la ecuación de Poisson y por lo tanto es posible generar, siguiendo el procedimiento usual de diferencias finitas, una nueva discretización alterna para la ecuación de Poisson utilizando las ecuaciones (54), (56) pero sin tomar en cuenta la matriz . El

esquema numérico resultante se llama *esquema conservativo asociado* porque satisface la condición (b) de ley de conservación en la definición de esquema mimético. Denotando a la aproximación de u por el esquema conservativo asociado al vector \vec{u}_C de la forma

$$\vec{u}_C = \left(uc_0, uc_{\frac{1}{2}}, \dots, uc_{N-\frac{1}{2}}, uc_N \right)^T,$$

entonces el sistema lineal de $N + 2$ ecuaciones, para este esquema, queda conformado de la siguiente manera.

La primera ecuación,

$$\left(\frac{8}{3h} + \alpha_0 \right) uc_0 - \left(\frac{3}{h} \right) uc_{\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{3h} \right) uc_{\frac{3}{2}} = C_0 \quad (101)$$

es idéntica a la del esquema mimético y representa la discretización de la condición de borde.

La segunda ecuación del sistema es

$$\left(\frac{8}{3h^2} \right) uc_0 - \frac{4}{h^2} uc_{\frac{1}{2}} + \frac{4}{3h^2} uc_{\frac{3}{2}} = F_{\frac{1}{2}}, \quad (102)$$

la cual representa una discretización de primer orden para la ecuación de Poisson centrada en $x_{\frac{1}{2}}$.

Las siguientes ecuaciones en el sistema son

$$\left(\frac{1}{h^2} \right) uc_{i-\frac{1}{2}} - \left(\frac{2}{h^2} \right) uc_{i+\frac{1}{2}} + \left(\frac{1}{h^2} \right) uc_{i+\frac{3}{2}} = F_{i+\frac{1}{2}} \quad \text{para } i = 1, \dots, N-2, \quad (103)$$

son las discretizaciones de la ecuación de Poisson mediante el tradicional esquema de diferencias finitas de segundo orden y están centradas en los nodos $x_{i+\frac{1}{2}}$ para $i = 1, \dots, N-2$, respectivamente.

La penúltima ecuación,

$$\left(\frac{4}{3h^2}\right)uc_{N-\frac{3}{2}} - \left(\frac{4}{h^2}\right)uc_{N-\frac{1}{2}} + \left(\frac{8}{3h^2}\right)uc_N = F_{N-\frac{1}{2}} \quad (104)$$

es una aproximación de primer orden a la ecuación de Poisson y esta centrada en el nodo $x_{N-\frac{1}{2}}$.

Por último se tiene la discretización de la condición de borde,

$$\left(\frac{1}{3h}\right)uc_{N-\frac{3}{2}} - \left(\frac{3}{h}\right)uc_{N-\frac{1}{2}} + \left(\frac{8}{3h} + \alpha_L\right)uc_N = C_1 \quad (105)$$

en el nodo $x_N = 1$ correspondiente al extremo derecho del intervalo, siendo igual a la del esquema mimético.

En analogía, a la presentación del esquema mimético, se utilizará la expansión de Taylor y se llama \vec{TC} al vector formado por los errores de truncación de cada ecuación de esquema conservativo asociado. Sus entradas vienen dadas por la siguientes ecuaciones.

Para (105) se tiene,

$$\alpha_L uc(x_N) + uc'(x_N) - \frac{h^2}{6}uc'''(x_N) + O(h^4) - C_1.$$

Por tanto,

$$TC_N = O(h^2).$$

De la misma manera, para (104) se tiene

$$\frac{4}{3}u''(x_{N-\frac{1}{2}}) - \frac{h}{6}u'''(x_{N-\frac{1}{2}}) + O(h^3).$$

Luego,

$$TC_{N-\frac{1}{2}} = O(h).$$

Así bien, realizando este mismo proceso para las ecuaciones restantes se obtiene que,

$$\begin{aligned} TC_0 &= TC_N = O(h^2) \\ TC_{\frac{1}{2}} &= TC_{N-\frac{1}{2}} = O(h) \\ TC_{i+\frac{1}{2}} &= O(h^2) \text{ para } i = 1, \dots, N-2. \end{aligned}$$

Se observa claramente que el esquema conservativo asociado posee menos errores de truncación lineales que el esquema mimético. Además todas las ecuaciones que forman el sistema lineal tienen moléculas de discretización de tres puntos, las cuales se adaptan mejor a las técnicas de análisis de diferencias finitas.

La similitud entre ambos esquemas indica la existencia de algún tipo de relación entre ellos que será establecida y formalizada a continuación.

4.4. Relación Matricial entre Esquemas

Se representa en forma matricial al esquema conservativo asociado mediante la siguiente expresión

$$M \cdot \vec{u}_C = F + f_{ab}, \quad (106)$$

donde M es la matriz $N + 2 \times N + 2$ formada a partir de los coeficientes de la ecuaciones y $F + f_{ab}$ es el vector de orden $N + 2 \times 1$,

$$F + f_{ab} = (C_0, f(x_{\frac{1}{2}}), \dots, f(x_{N-\frac{1}{2}}), C_1)^T,$$

formado por los lados derechos de las ecuaciones de ambos esquemas.

Definiendo la matriz \tilde{M}

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{N+2 \times N+1},$$

entonces la matriz M puede ser escrita mediante la ecuación

$$[\mathbf{A} + \tilde{M}] \vec{u}_C = F + f_{ab}, \quad (107)$$

que es prácticamente igual a la misma expresión matricial del esquema mimético (93). Mediante simple inspección y comparación de la ecuaciones (107) y (93), es posible determinar que la matriz perturbacion E definida por

$$E = (-\tilde{M}), \quad (108)$$

es la perturbación que transforma al esquema conservativo asociado en esquema mimético. Simbólicamente esto quiere decir que el esquema mimético puede ser escrito en forma matricial en función de E y M mediante la siguiente expresión:

$$(M + E) \cdot \vec{U} = F + f_{ab}. \quad (109)$$

Las ecuaciones (107), (108) y (109) serán fundamentales para establecer la convergencia del esquema mimético.

4.5. Convergencia del esquema conservativo asociado

La convergencia del esquema se obtiene mediante la aplicación de la versión discreta del principio de módulo máximo para ecuaciones elípticas y el uso de la función de malla

$$\phi(x) = (x - p)^2, \quad (110)$$

donde p es una constante arbitraria que sera determinada posteriormente.

Para la prueba se tomarán en cuenta los argumentos dados en³³, por tanto, a continuación se enuncia un teorema importante para la demostración. Supongamos que el conjunto J_Ω se divide en dos conjuntos disjuntos:

$$J_\Omega = J_1 \cup J_2, \quad J_1 \cap J_2 = \emptyset,$$

donde la función de malla no negativa Φ se define en $J_\Omega \cup J_{\partial\Omega}$ y satisface

$$\begin{cases} L_h \Phi_P \geq C_1 > 0 & \text{para todo } P \in J_1, \\ L_h \Phi_P \geq C_2 > 0 & \text{para todo } P \in J_2, \end{cases}$$

y el error de truncamiento de la aproximación satisface

$$\begin{cases} |T_P| \leq T_1 & \text{para todo } P \in J_1, \\ |T_P| \leq T_2 & \text{para todo } P \in J_2. \end{cases}$$

Entonces, el error en la aproximación está acotado por

$$|e_P| \leq \left[\max_{A \in J_{\partial\Omega}} \Phi_A \right] \max \left\{ \frac{T_1}{C_1}, \frac{T_2}{C_2} \right\}.$$

³³ KW Morton y DF Mayers. *Numerical Solution of Partial Differential Equations* (1994).

Ahora, sustituyendo las condiciones de borde dadas por (101) y (105), resolviendo las variables uc_0 y uc_N respectivamente, en las ecuaciones (102) y (104). Al realizar esta operación las ecuaciones toman la siguiente forma

$$4 \left(\frac{2 + \alpha_0 h}{h^2 (8 + 3\alpha_0 h)} \right) uc_{\frac{3}{2}} - 4 \left(\frac{2 + 3\alpha_0 h}{h^2 (8 + 3\alpha_0 h)} \right) uc_{\frac{1}{2}} + \frac{8C_0}{h (8 + 3\alpha_0 h)} = f_{\frac{1}{2}}, \quad (111)$$

$$4 \left(\frac{2 + \alpha_1 h}{h^2 (8 + 3\alpha_1 h)} \right) uc_{N-\frac{3}{2}} - 4 \left(\frac{2 + 3\alpha_1 h}{h^2 (8 + 3\alpha_1 h)} \right) uc_{N-\frac{1}{2}} + \frac{8C_1}{h (8 + 3\alpha_1 h)} = f_{N-\frac{1}{2}}, \quad (112)$$

donde la variables uc_0 y uc_N no aparecen. Observamos que sustituciones de las ecuaciones (101) y (105) en las ecuaciones restantes no es necesario puesto que ellas no contienen a las variables uc_0 y uc_N dentro de sus incógnitas.

Denotando por T_0 y T_N los errores de truncación de las ecuaciones (111) y (112) entonces los errores de truncación del esquema conservativo asociado \vec{TC} permiten establecer las siguientes estimaciones:

$$\begin{aligned} |TC_0| &\leq O(h), \\ |TC_N| &\leq O(h). \end{aligned} \quad (113)$$

Se observa que el resto de las ecuaciones en el esquema conservativo asociado no requieren una nueva estimación de sus errores de truncación debido a que ellas permanecen inalteradas en sus formulación.

A continuación se define una función L_h formada por las discretizaciones (111), (88) y (112) truncadas de sus términos independientes. Al componerla con la función de

mallas (114) se obtiene la siguiente expresión:

$$L_h \circ \phi \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = \begin{cases} \frac{4(2+\alpha_0 h)}{h^2(8+3\alpha_0 h)} \phi \left(x_{\frac{3}{2}} \right) - \frac{4(2+3\alpha_0 h)}{h^2(8+3\alpha_0 h)} \phi \left(x_{\frac{1}{2}} \right) & \text{en } x_{\frac{1}{2}}, \\ \frac{1}{h^2} \left(\phi \left(x_{i+\frac{3}{2}} \right) - 2\phi \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) + \phi \left(x_{i-\frac{1}{2}} \right) \right) & \text{en } x_{i+\frac{1}{2}}, \\ \frac{4(2+\alpha_1 h)}{h^2(8+3\alpha_1 h)} \phi \left(x_{N-\frac{3}{2}} \right) - \frac{4(2+3\alpha_1 h)}{h^2(8+3\alpha_1 h)} \phi \left(x_{N-\frac{1}{2}} \right) & \text{en } x_{N-\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (114)$$

En ella se puede apreciar que las evaluaciones corresponden solamente a los nodos interiores de la malla puesto que las ecuaciones (111) y (112) contienen las condiciones de borde de forma implícita. Desarrollando cada uno de los casos en la ecuación (114) con las correspondientes simplificaciones se obtiene la relación.

$$L_h \circ \phi \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = \begin{cases} 2 - \frac{8p(2+\alpha_0 p)}{h(8+3\alpha_0 h)} & \text{en } x_{\frac{1}{2}}, \\ 2 & \text{en } x_{i+\frac{1}{2}}, \\ 2 - \frac{8(p-1)(\alpha_1 p - 2 - \alpha_1)}{h(8+3\alpha_1 h)} & \text{en } x_{N-\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (115)$$

Por otro lado, es siempre posible escoger un valor apropiado de p de manera que existan constantes positivas K_0 y K_1 tales que satisfagan la siguiente desigualdad:

$$L_h \circ \phi \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) = \begin{cases} \frac{K_0}{h} & \text{en } x_{\frac{1}{2}}, \\ 2 & \text{en } x_{i+\frac{1}{2}}, \\ \frac{K_1}{h} & \text{en } x_{N-\frac{1}{2}}. \end{cases} \quad (116)$$

Combinando esta desigualdad con los errores de truncación (113), y el principio de

modulo máximo discreto para funciones de malla se obtiene la siguiente estimación:

$$|u - \vec{u}\hat{c}| \leq \left(\max_{x \in [0,1]} \phi(x) \right) \cdot \max \left(\frac{|T_0|}{K_0/h}, \frac{|TC_{i+\frac{1}{2}}|}{2}, \frac{|T_N|}{K_1/h} \right) \leq O(h^2), \quad (117)$$

la cual prueba la convergencia cuadrática del esquema.

4.6. Análisis de la Perturbación

En esta sección se presenta un resumen de los resultados más importantes obtenidos en³⁴ para obtener un estimación de $|M^{-1}E|$, donde E es la matriz de perturbación y M^{-1} es la inversa de la matriz de sistema lineal para el esquema conservativo asociado.

Por conveniencia, de ahora en adelante se llamará matriz de perturbación a las matrices E y $M^{-1}E$. De las ecuaciones (106) y (109) es evidente que ambas matrices son perturbaciones de la matriz M y la identidad I , indicando el contexto cual de los dos es la pertinente en cada caso.

La matriz M es una matriz casi tridiagonal mientras que E contiene solamente cuatro filas no nulas a saber, la segunda, la tercera, la N y la $N + 1$. Luego las columnas correspondientes de M^{-1} serán la únicas necesarias para estimar $|M^{-1}E|$. Denotando por e'_i s a los vectores de la base canónica en el espacio euclídeo $N + 2$ dimensional entonces las columnas de M^{-1} , mencionadas anteriormente, pueden ser obtenidas mediante la solución de los siguientes sistema de ecuaciones:

$$M \cdot z_2 = e_2, M \cdot z_3 = e_3, M \cdot z_N = e_N, M \cdot z_{N+1} = e_{N+1}. \quad (118)$$

³⁴ Castillo y Yasuda, "Linear Systems Arising for Second-Order Mimetic Divergence and Gradient Discretizations", ver n. 27.

Debido a las propiedades de simetría de la matriz M sólo es necesario trabajar los resultados para los primeros dos sistemas con los vectores z_2 y z_3 . Resolviendo los sistemas (118) se obtiene para el vector z_2 las entradas

$$\begin{aligned}
 z_2(1) &= -\frac{h(8 + \alpha_0 h(8N - 3))}{8\alpha_0(2 + \alpha_0 hN)}, \\
 z_2(j) &= -\frac{h(8 + 3\alpha_0 h)(2 + \alpha_0 h(2N - 2j + 3))}{16\alpha_0(12 + \alpha_0 hN)} \quad \text{para } 2 \leq j \leq N + 1, \\
 z_2(N + 2) &= -\frac{h(8 + 3\alpha_0 h)}{8\alpha_0(2 + \alpha_0 hN)},
 \end{aligned} \tag{119}$$

mientras que las componentes del vector z_3 tienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
 z_3(1) &= -\frac{h(1 + \alpha_0 h(N - \frac{3}{2}))}{\alpha_0(2 + \alpha_0 hN)}, \\
 z_3(2) &= -\frac{h(2 + \alpha_0 h)(1 + \alpha_0 h(N - \frac{3}{2}))}{2\alpha_0(2 + \alpha_0 hN)}, \\
 z_3(j) &= -\frac{h(2 + 3\alpha_0 h)(1 + \alpha_0 h(N - \frac{2j-3}{2}))}{2\alpha_0(2 + \alpha_0 hN)} \quad \text{para } 3 \leq j \leq N + 1, \\
 z_3(N + 2) &= -\frac{h(2 + 3\alpha_0 h)}{2\alpha_0(2 + \alpha_0 hN)}.
 \end{aligned} \tag{120}$$

Denotando por w_1, w_2 y w_3 las primeras tres columnas de la matriz $M^{-1}E$, se tiene que la estructura de la matriz E se deduce de la siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
 w_1(j) &= \frac{1}{3h}(z_3(j) - z_2(j)), \quad w_2(j) = \frac{1}{2h}(z_2(j) - z_3(j)), \\
 w_3(j) &= \frac{1}{6h}(z_3(j) - z_3(j)).
 \end{aligned}$$

Sustituyendo los valores z_2 y z_3 dados por las ecuaciones (119) y (120) resultan las

siguientes expresiones para los vectores w_1, w_2 y w_3 :

$$\begin{aligned}
 w_1(1) &= -w_1(N+2) = -\frac{3h}{16+8\alpha_0}, \\
 w_2(1) &= -w_2(N+2) = -\frac{9h}{32+16\alpha_0}, \\
 w_3(1) &= -w_3(N+2) = -\frac{3h}{32+16\alpha_0}, \\
 w_1(2) &= \left(\frac{14-2\alpha_0+9\alpha_0h}{96+48\alpha_0} \right) h, \\
 w_2(2) &= -\left(\frac{14-2\alpha_0+9\alpha_0h}{64+32\alpha_0} \right) h, \\
 w_3(2) &= \left(\frac{14-2\alpha_0+9\alpha_0h}{192+96\alpha_0} \right) h, \\
 w_1(j) &= -3 \left(\frac{2+2\alpha_0-2\alpha_0jh+3\alpha_0h}{32+16\alpha_0} \right) h \quad \text{si } 3 \leq j \leq N+1, \\
 w_2(j) &= 9 \left(\frac{2+2\alpha_0-2\alpha_0jh+3\alpha_0h}{64+32\alpha_0} \right) h \quad \text{si } 3 \leq j \leq N+1, \\
 w_3(j) &= -3 \left(\frac{2+2\alpha_0-2\alpha_0j+3\alpha_0h}{64+32\alpha_0} \right) h \quad \text{si } 3 \leq j \leq N+1.
 \end{aligned}$$

Las entradas para estos vectores y sus contrapartes, w_N, w_{N+1} y w_{N+2} , son de orden $O(h)$. Por lo tanto, se concluye que la matriz de perturbación $M^{-1}E$ satisface la siguiente estimación:

$$|M^{-1}E| \leq O(h). \quad (121)$$

4.7. Convergencia esquema mimético

Denotemos por \vec{u} al vector con la solución exacta del problema de contorno (89) y (90) evaluado en los nodos centrales y extremos de la malla mimética. De las

ecuaciones 106 y (109) resulta la relación,

$$M \cdot \vec{u}_C = (M + E) \cdot \vec{U}.$$

Luego, sumando y restando el vector $(M + E) \cdot \vec{u}$ se obtiene la expresión:

$$M \cdot (\vec{u}_C - \vec{u}) = (M + E) \cdot (\vec{U} - \vec{u}) + E \cdot \vec{u},$$

la cual al ser multiplicada por la inversa de M resulta en la siguiente identidad:

$$(\vec{u}_C - \vec{u}) = (I + M^{-1}E) \cdot (\vec{U} - \vec{u}) + M^{-1}E \cdot \vec{u}.$$

Transponiendo términos obtenemos.

$$(\vec{U} - \vec{u}) = (\vec{u}_C - \vec{u}) - (M^{-1}E) \cdot (\vec{U} - \vec{u}) - M^{-1}E \cdot \vec{u}. \quad (122)$$

Tomando norma infinita y aplicando desigualdad triangular logramos la siguiente desigualdad:

$$|\vec{U} - \vec{u}| \leq |\vec{u}_C - \vec{u}| + |M^{-1}E| |\vec{U} - \vec{u}| + |M^{-1}E| |\vec{u}|. \quad (123)$$

Por otro lado, sabemos por las ecuaciones (117) y (121) que la siguiente estimación obtenida de (123) es válida:

$$|\vec{U} - \vec{u}| \leq O(h^2) + O(h) |\vec{U} - \vec{u}| + O(h) |\vec{u}|.$$

Resolviendo para los errores del esquema mimético y que $|\vec{u}|$ es una constante se tiene que:

$$|\vec{U} - \vec{u}| \leq \frac{O(h^2)}{1 - O(h)} + \frac{O(h)}{1 - O(h)} |\vec{u}| \leq O(h). \quad (124)$$

Esta última estimación prueba la convergencia del esquema mimético. Se continua con la segunda parte de la prueba. Para ello se establece la siguiente identidad

$$(E \cdot \vec{u}) = (\tilde{B} - B)\vec{G}\vec{u} = (\tilde{B} - B)\vec{v} \quad (125)$$

donde el vector \vec{v} tiene la forma.

$$\vec{v} = \left(0, \frac{u'(x_0) - u'(x_{\frac{1}{2}}) + O(h^2)}{8}, \frac{-u'(x_0) + u'(x_{\frac{1}{2}}) + O(h^2)}{8}, 0, \dots, \dots, 0, \frac{-u'(x_{N-\frac{1}{2}}) + u'(x_N) + O(h^2)}{8}, \frac{u'(x_{N-\frac{1}{2}}) - u'(x_N) + O(h^2)}{8}, 0 \right)^T$$

Como la solución u se supone que es suave y diferenciable entonces el vector \vec{v} se puede escribir como

$$\vec{v} = O(h^2) \vec{w} \quad (126)$$

donde $\vec{w} = (0, 1, 1, 0, \dots, 0, 1, 1, 0)^T$. Sustituyendo las ecuaciones 126 y 125 en la identidad 122 resulta.

$$(\vec{u}_M - \vec{u}) = (\vec{u}_C - \vec{u}) - (M^{-1}E) \cdot (\vec{u}_M - \vec{u}) - O(h^2) M^{-1} \cdot \vec{w} \quad (127)$$

Aplicando norma infinita y desigualdad triangular a esta identidad obtenemos.

$$\left| \vec{u}_M - \vec{u} \right| \leq \left| \vec{u}_C - \vec{u} \right| + |M^{-1}E| |\vec{u}_M - \vec{u}| + O(h^2) |M^{-1}\vec{w}| \quad (128)$$

Por otro lado, se tiene por las ecuaciones 124, 121 y 117 que la siguiente estimación derivada de 128 es correcta.

$$\left| \vec{u}_M - \vec{u} \right| \leq O(h^2) + (O(h))^2 + O(h^2) |M^{-1}\vec{w}| \leq O(h^2)$$

Por lo tanto queda demostrada la convergencia cuadrática del esquema mimético.

5. Resultados numéricos

En este capítulo se quiere comparar el esquema mimético MDM de segundo orden con los esquemas definidos en el método de diferencias finitas: Esquema de diferencias centradas, θ -método, *Upwing* y el esquema Quick, todos con un segundo orden de convergencia.

Para lograr una rápida implementación de un esquema MDM se acude a la librería MOLE introducida por Corbino y Castillo,³⁵. MOLE es una librería (C++ y MATLAB/Octave) de código abierto diseñada para implementar esquemas de diferencias miméticos para resolver EDP en dimensiones 1D, 2D y 3D. Esta biblioteca proporciona versiones discretas de los operadores de cálculo vectorial más comunes, tales como el gradiente, la divergencia, la curvatura y el laplaciano, además de operadores de frontera y de interpolación. Como ya se hizo anteriormente, estos operadores, representados como matrices, actúan sobre mallas escalonadas, ya sean uniformes, no uniformes o curvilíneas, y cumplen con las leyes de conservación. En este trabajo, se implementa la versión de MATLAB de la librería.

La librería MOLE puede ser descargada de: <https://github.com/csrc-sdsu/mole> y se debe agregar la ruta (path) a su script de MATLAB: `addpath(' ./mole_MATLAB')`. Después de esto, se pueden llamar a cualquiera de las 29 funciones proporcionadas por MOLE para construir esquemas de diferencias miméticos para cualquier modelo de EDP.

La efectividad de los cuatro esquemas DF y el esquema MDM propuestos se mide al variar los parámetros k (difusión) y v (velocidad). Se quiere comparar la eficiencia de

³⁵ Johnny Corbino y Jose E. Castillo. "High-order mimetic finite-difference operators satisfying the extended Gauss divergence theorem". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 364 (2020), pág. 112326. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.042>.

cada esquema en los casos en que el problema modelo es altamente difusivo ($k \ll v$) o altamente convectivo ($v \ll k$) y según la condición de frontera (tipo Dirichlet o Robin). Al mismo tiempo se quiere dejar ver la propiedad de inestabilidad numérica cuando se presenta un número de Péclet mayor a uno.

Para poder medir la efectividad del esquema MDM y los DF se usa las normas l_1 y l_2 :

$$\|e\|_1 := \sum_i |e_i| h_i, \quad \|e\|_2 := \left(\sum_i |e_i|^2 h_i \right)^{1/2},$$

donde h_i es el tamaño de la celda, $e_i := u_i - U_i$ representa el error en cada nodo de la malla, con u_i y U_i el valor exacto y el valor numérico en cada nodo i , respectivamente.

Para verificar el orden de convergencia de los esquemas MDM y DF se supone un error dado por $E := ch^\sigma$, es decir, un error de orden σ . Aplicando $\log(\cdot)$, se obtiene

$$\log(e) = \sigma \log(h) + \log(c).$$

En esta expresión e denota el error, h es el tamaño constante de las celdas (malas uniformes), σ el posible orden de convergencia y c una constante.

Para la experimentación numérica se considera nuevamente el problema modelo a resolver, dado por la ecuación estacionaria de convección-difusión no conservativa unidimensional

$$-k \frac{d^2 u}{dx^2} + v \frac{du}{dx} = f(x) \quad \text{en } \Omega = (0, L), \quad (129)$$

sujeta a condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} \alpha_0 u(0) - \beta_0 u'(0) &= C_0, \\ \alpha_L u(L) + \beta_L u'(L) &= C_1, \end{aligned} \quad (130)$$

donde, si $\beta_0 = \beta_L = 0$ y $\alpha_0 = \alpha_L = 1$, se tendría condiciones de frontera tipo Dirichlet,

en los otros casos resultan condiciones de frontera tipo Robin. El coeficiente difusivo $k > 0$ y el coeficiente de velocidad constante $v > 0$.

5.1. Esquemas numéricos

Se recuerdan brevemente el esquema MDM y los esquemas DF a comparar:

1. Esquema MDM

Al sustituir los operadores discretos gradiente, divergencia, y operador de interpolación en la ecuación (129) resulta

$$-kU + v\tilde{I}U = F, \quad (131)$$

donde F representa la restricción del término fuente, f , de (129) para la malla mimética, es decir,

$$F = (0, f(x_{1/2}), \dots, f(x_{N-1/2}), 0)^T,$$

\tilde{I} es un operador de interpolación de segundo orden de los nodos fraccionarios a los nodos enteros y U es el vector solución (nodos fraccionarios), $U = (U_0, U_{1/2}, \dots, U_{N-1/2}, U_N)^T$. Por otro lado, para la condición de frontera (130), se tiene que

$$[[\alpha] + [\beta]]U = f_{ab}, \quad (132)$$

donde, B es el operador de frontera dado en (75), $f_{ab} = (C_0, 0, \dots, 0, C_1)^T$ y las

matrices $[\alpha]$ y $[\beta]$ son tales que

$$[\alpha] = \begin{bmatrix} \alpha_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_L \end{bmatrix}_{(N+2) \times (N+2)}, \quad [\beta] = \begin{bmatrix} \beta_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \beta_L \end{bmatrix}_{(N+2) \times (N+2)}$$

Cada matriz $[\alpha]$ y $[\beta]$ contiene únicamente dos entradas no nulas porque la malla utilizada contiene solamente dos bordes que son los extremos del intervalo.

Por lo tanto, combinando (131) y (132) se obtiene el esquema mimético para resolver numéricamente el problema de convección-difusión considerado:

$$[-k + v\tilde{I} + [\alpha] + [\beta]]U = F + f_{ab}. \quad (133)$$

2. Esquema DF: Diferencias finitas centradas de segundo orden

Se usa el esquema de diferencias de segundo orden para la segunda derivada y el esquema centrado de segundo orden para la primera derivada:

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} = f_i, \quad (134)$$

para $i = 0, 1, \dots, N-1, N$. Para las condiciones de frontera tipo Robin se imponen los esquemas:

$$\alpha_0 U_0 - \beta_0 \left(\frac{U_1 - U_{-1}}{2h} \right) = C_0 \quad \text{y} \quad \alpha_1 U_N - \beta_1 \left(\frac{U_{N+1} - U_{N-1}}{2h} \right) = C_1.$$

3. Esquema DF: θ -método de segundo orden

Se considera una aproximación a la primera derivada de la ecuación del pro-

blema (21) como una combinación de la diferencia finita centrada y la diferencia finita *upwind* de la siguiente forma:

$$u'(x) \approx (1 - \theta) \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} + \theta \frac{U_i - U_{i-1}}{h},$$

para un valor de $\theta > 0$.

Entonces, el θ - método para el problema modelo (21) queda definido por

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \left[(1 - \theta) \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} + \theta \frac{U_i - U_{i-1}}{h} \right] = f_i,$$

para $i = 1, \dots, N-1$. Cuando el problema modelo se defina con condiciones de frontera tipo Robin, se usa un esquema centrado para discretizar la derivada, y se encuentra una definición para los nodos fantasmas que resultan para los nodos en $i = 0$ y $i = N$. Para el caso de condiciones de frontera Dirichlet se define el sistema de ecuaciones a partir de $i = 1, \dots, N-1$, los valores de U_0 y U_N son conocidos y se agrupan a la derecha con el vector de f .

Usando el procedimiento de encontrar la ecuación diferencial modificada que resuelve el esquema se puede concluir que el θ óptimo para el esquema resulta en

$$\theta = \frac{2(k-2)h}{vh^2 + 12}.$$

4. Esquema DF: *Upwing* de segundo orden

A partir de 18 y 20 el esquema resultante cuando $v > 0$ es

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{2h} (3U_i - 4U_{i-1} + U_{i-2}) = f_i, \quad (135)$$

para $i = 2, \dots, N-1$. En el caso de condiciones de frontera Dirichlet los nodos x_0 y x_N son conocidos y solo faltaría definir un esquema de segundo orden

para el nodo x_1 , para este caso se usa el esquema de diferencias centradas para la primera derivada, es decir:

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{2h} (U_{i+1} - U_{i-1}) = f_i,$$

para $i = 1$. Para el caso de condiciones de frontera tipo Robin, la deriva es en el nodo x_0 es aproximada por el esquema

$$u_x(0) = \frac{1}{2h} (-3U_0 + 4U_1 - U_2), \quad (136)$$

mientras en el nodo x_N es aproximada por el esquema

$$u_x(L) = \frac{1}{2h} (3U_N - U_{N-1} + U_{N-2}). \quad (137)$$

Al sustituir estos esquemas en las condiciones de frontera surgen la primera y última ecuación del sistema.

5. Esquema DF: Quick de segundo orden

De 19 y 20 el esquema resultante cuando $v > 0$ es

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{h} \left(\frac{3}{8}U_{i+1} + \frac{3}{8}U_i - \frac{7}{8}U_{i-1} + \frac{1}{8}U_{i-2} \right) = f_i, \quad (138)$$

para $i = 2, \dots, N-1$. En el caso de condiciones de frontera Dirichlet los nodos x_0 y x_N son conocidos y solo faltaría definir un esquema de segundo orden para el nodo x_1 , para este caso se usa el esquema de diferencias centradas para la primera derivada, es decir:

$$-k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} + v \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{8}U_{i+2} + \frac{7}{8}U_{i+1} - \frac{3}{8}U_i - \frac{3}{8}U_{i-1} \right) = f_i,$$

para $i = 1$ (usado para el caso en que $v < 0$). Para el caso de condiciones

de frontera tipo Robin, la deriva en los nodos x_0 y x_N son aproximadas por los esquemas (136) y (137), respectivamente.

5.2. Ejemplo 1.

Se resuelve el problema modelo (129) - (130) para $x \in [0, 1]$ y con un término fuente, $f(x)$, definido al tomar como solución exacta:

$$u(x) = \cos(\pi x/2) + 10x \sin(\pi x^2). \quad (139)$$

Por lo tanto, en (130), si se definen condiciones de frontera Dirichlet se tiene que $\alpha_0 = \alpha_1 = 1$, $\beta_0 = \beta_1 = 0$, $C_0 = 1$ y $C_1 = 0$. Por otro lado, si se definen condiciones de frontera tipo Robin, entonces $\alpha_0, \alpha_1, \beta_0$ y β_1 son todas iguales a 1, $C_0 = 1$ y $C_1 = -20.5\pi$.

Para condiciones de frontera tipo Dirichlet, el Cuadro 1 muestra los resultado obtenidos en norma $\|\cdot\|_1$ para una malla de 600 celdas y un conjunto de valores de los coeficientes $\{k, v\}$. Al analizar los resultados se tiene que el esquema MDM resulta con mejor precisión que los esquemas DF cuando $k \ll v$. En el caso contrario, $v \ll k$, es el esquema Quick el que presenta mejor precisión. En el caso en que k y v son semejantes pero con valores en $5 \leq k, v \leq 20$ es el esquema θ -método el que resulta con mayor precisión.

El Cuadro 1 muestra el caso particular donde $k = v = 10$, los otros resultados numéricos fueron omitidos. El esquema DFC no resulta apropiado para ninguna configuración de los valores k y v , sin embargo, la precisión del esquema es bastante regular. Es decir, su comportamiento es el mismo para cualquier configuración de los valores de k y v . Al final del Cuadro 1 se muestran dos casos que pueden ser considerados atípicos. No obstante, la precisión de los esquemas sigue presentando el mismo comportamiento.

Coeficiente			Errores en norma $\ \cdot \ _1$ (600 celdas)				
k	v	Peclét	MDM	θ - DF	DFC	Upwing	Quick
0.1	0.1	8.33e-04	1.6303e-05	1.7100e-05	1.6426e-05	3.8772e-05	1.8435e-05
0.1	1.0	8.33e-03	3.8895e-05	4.3289e-05	3.9004e-05	9.1037e-05	1.1672e-05
0.1	10.0	8.33e-02	4.6063e-05	5.0630e-05	4.6122e-05	9.3155e-05	1.1326e-05
0.1	150.0	1.25e+00	4.6519e-05	5.1061e-05	4.6602e-05	9.2891e-05	1.1675e-05
0.1	300.0	2.50e+00	4.6533e-05	5.1075e-05	4.6618e-05	9.2854e-05	1.1688e-05
1.0	0.1	8.33e-05	1.8606e-05	1.8647e-05	1.8643e-05	2.0569e-05	1.9079e-05
1.0	1.0	8.33e-04	1.6303e-05	1.6774e-05	1.6426e-05	3.8772e-05	1.8435e-05
1.0	10.0	8.33e-03	3.8895e-05	4.1229e-05	3.9004e-05	9.1037e-05	1.1672e-05
1.0	150.0	1.25e-01	4.6239e-05	4.8616e-05	4.6299e-05	9.3114e-05	1.1444e-05
1.0	300.0	2.50e-01	4.6406e-05	4.8778e-05	4.6470e-05	9.3040e-05	1.1571e-05
10.0	0.1	8.33e-06	1.9054e-05	1.9082e-05	1.9082e-05	1.9267e-05	1.9128e-05
10.0	1.0	8.33e-05	1.8606e-05	1.8620e-05	1.8643e-05	2.0569e-05	1.9079e-05
10.0	10.0	8.33e-04	1.6303e-05	1.4239e-05	1.6426e-05	3.8772e-05	1.8435e-05
10.0	150.0	1.25e-02	4.1977e-05	2.8290e-05	4.2067e-05	9.2279e-05	1.0896e-05
10.0	300.0	2.50e-02	4.4621e-05	3.0955e-05	4.4691e-05	9.3100e-05	1.0773e-05
150.0	0.1	5.56e-07	1.9103e-05	1.9130e-05	1.9130e-05	1.9142e-05	1.9133e-05
150.0	1.0	5.56e-06	1.9071e-05	1.9107e-05	1.9099e-05	1.9222e-05	1.9129e-05
150.0	10.0	5.56e-05	1.8768e-05	1.9771e-05	1.8801e-05	2.0067e-05	1.9097e-05
150.0	150.0	8.33e-04	1.6303e-05	8.9809e-05	1.6426e-05	3.8772e-05	1.8435e-05
150.0	300.0	1.67e-03	1.8208e-05	1.4765e-04	1.8386e-05	5.9161e-05	1.7468e-05
300.0	0.1	2.78e-07	1.9104e-05	1.9131e-05	1.9131e-05	1.9137e-05	1.9133e-05
300.0	1.0	2.78e-06	1.9089e-05	1.9125e-05	1.9116e-05	1.9177e-05	1.9131e-05
300.0	10.0	2.78e-05	1.8934e-05	2.0075e-05	1.8965e-05	1.9588e-05	1.9115e-05
300.0	150.0	4.17e-04	1.7075e-05	1.0599e-04	1.7152e-05	2.7926e-05	1.8825e-05
300.0	300.0	8.33e-04	1.6303e-05	1.8518e-04	1.6426e-05	3.8772e-05	1.8435e-05
0.005	400	6.67e+01	7.1749e-05	5.1321e-05	4.6634e-05	9.2810e-05	1.1700e-05
400	0.01	1.04e-07	1.9105e-05	1.9132e-05	1.9132e-05	1.9135e-05	1.9133e-05

Tabla 1. Ejemplo 1. Errores en norma $\| \cdot \|_1$ para distintos valores de k (difusión) y v (velocidad). Se divide el dominio $[0, 1]$ en 600 celdas y se definen condiciones de frontera Dirichlet.

Los resultados obtenidos se muestran para una división del dominio en 600 celdas uniformes. Sin embargo, el estudio se lleva a cabo para divisiones de 40, 80, 120, 160, 200, 400, 600 celdas. En la Figura 5 se muestra el orden de convergencia del esquema MDM y los cuatro esquemas DF para valores de $k = 1$ y $v = 300$. Se deja notar, claramente, el mismo orden de convergencia para todos los esquemas pero con un menor error para el caso del esquema Quick (debido a los valores de k y v). Además, para cada discretización del dominio, la clasificación resulta equivalente. la gráfica de MDM, DFC y DF- θ se solapan en la figura. Para el caso de $k = 10$ y $v = 0.1$, en norma l_1 , se muestra en la Figura 6. En este caso las magnitudes de los errores hace que las gráficas se solapen; la gráfica muestra un zoom para lograr clasificar la precisión de los esquemas.

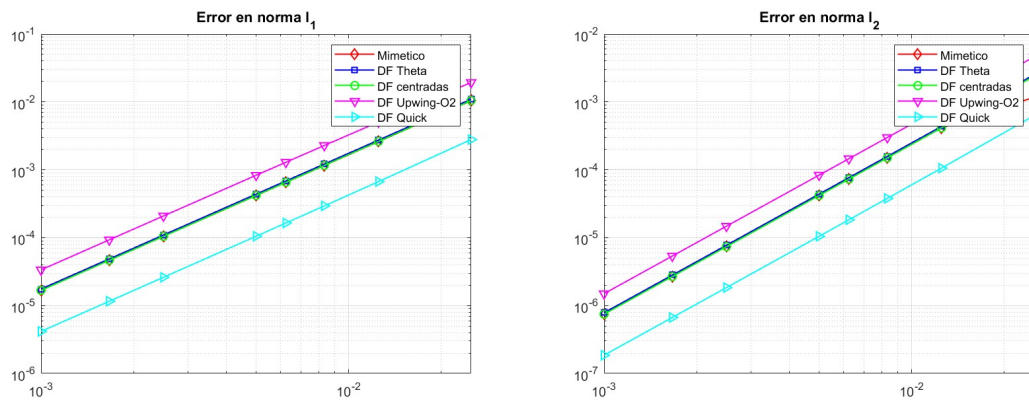


Figura 5. Ejemplo 1. Comportamiento del orden de convergencia de los esquemas MDM y DF para $k = 1$ y $v = 300$. Se utilizan discretizaciones del dominio con 40, 80, 120, 160, 200, 400 y 600 celdas. Condiciones de frontera Dirichlet.

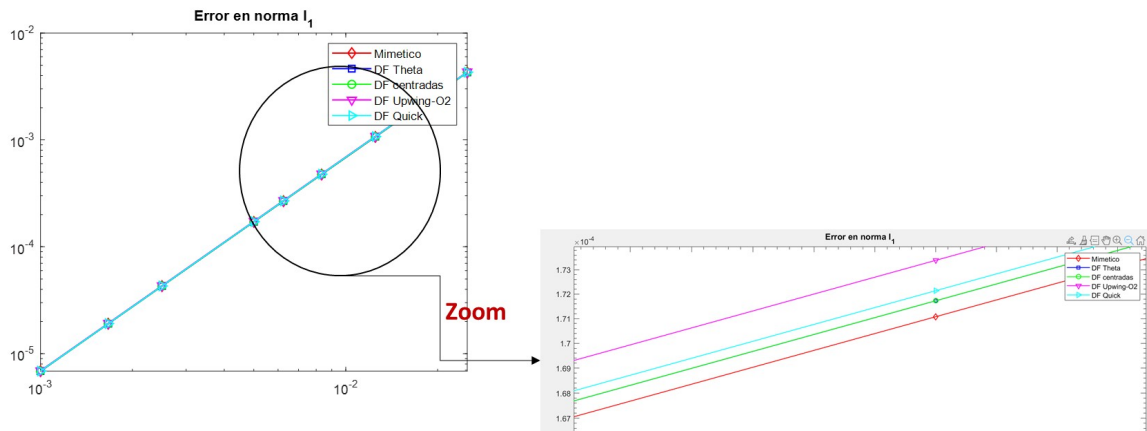


Figura 6. Ejemplo 1. Comportamiento del orden de convergencia en norma l_1 de los esquemas MDM y DF para $k = 10$ y $v = 0.1$. El zoom sobre la gráfica muestra los menores errores alcanzados. Condiciones de frontera Dirichlet.

Para el caso de condiciones de frontera tipo Robin los resultados se muestran en el Cuadro 2. En este caso los resultados dejan notar que el esquema Quick pierde precisión, mientras el esquema DFC resulta apropiado cuando se tiene que $k \ll v$ y el esquema DF- θ se mantiene con una precisión apropiada. Para el momento de finalizar la experimentación numérica no tenemos claro el porque de la perdida de la precisión del esquema Quick, esperamos avanzar en ello en trabajos futuros.

Los resultados de convergencia para condiciones de frontera tipo Robin se muestran en la Figura 7 para $k = 150$ y $v = 1$. Resulta claro la mejor precisión del esquema MDM.

Coeficiente			Errores en norma $\ \cdot \ _1$ (600 celdas)				
k	v	Péclet	MDM	θ - DF	DFC	Upwing	Quick
0.1	0.1	8.33e-04	2.8916e-04	1.0466e-04	1.1454e-04	5.6702e-04	6.7187e-04
0.1	1.0	8.33e-03	5.7411e-05	4.9283e-05	4.2831e-05	1.0357e-04	1.7342e-04
0.1	10.0	8.33e-02	4.6675e-05	5.1768e-05	4.6995e-05	1.2400e-04	1.8952e-04
0.1	150.0	1.25e+00	5.8057e-04	5.1073e-05	4.6731e-05	4.4239e-04	1.8941e-04
0.1	300.0	2.50e+00	7.9798e-04	5.1045e-05	4.6719e-05	5.0444e-04	1.8939e-04
1.0	0.1	8.33e-05	1.4249e-04	2.3584e-04	2.3664e-04	1.1311e-03	1.1440e-03
1.0	1.0	8.33e-04	9.4161e-05	1.0934e-04	1.1454e-04	5.6702e-04	6.7187e-04
1.0	10.0	8.33e-03	5.1789e-05	4.5977e-05	4.2831e-05	1.0357e-04	1.7342e-04
1.0	150.0	1.25e-01	7.3463e-05	4.9308e-05	4.6918e-05	1.5144e-04	1.8954e-04
1.0	300.0	2.50e-01	1.6626e-04	4.9132e-05	4.6821e-05	2.2330e-04	1.8949e-04
10.0	0.1	8.33e-06	1.1773e-04	2.5068e-04	2.5002e-04	1.1931e-03	1.1944e-03
10.0	1.0	8.33e-05	1.1308e-04	2.4299e-04	2.3664e-04	1.1311e-03	1.1440e-03
10.0	10.0	8.33e-04	7.4740e-05	1.5616e-04	1.1454e-04	5.6702e-04	6.7187e-04
10.0	150.0	1.25e-02	5.3992e-05	4.2544e-05	4.5446e-05	9.6772e-05	1.8103e-04
10.0	300.0	2.50e-02	5.3822e-05	3.4058e-05	4.6999e-05	9.9006e-05	1.8780e-04
150.0	0.1	5.56e-07	1.1506e-04	2.5222e-04	2.5141e-04	1.1996e-03	1.1996e-03
150.0	1.0	5.56e-06	1.1475e-04	2.5862e-04	2.5052e-04	1.1954e-03	1.1963e-03
150.0	10.0	5.56e-05	1.1170e-04	3.2088e-04	2.4159e-04	1.1540e-03	1.1627e-03
150.0	150.0	8.33e-04	7.2727e-05	8.8433e-04	1.1454e-04	5.6702e-04	6.7187e-04
150.0	300.0	1.67e-03	4.5065e-05	8.2756e-04	2.3438e-05	1.5936e-04	2.8907e-04
300.0	0.1	2.78e-07	1.1496e-04	2.5228e-04	2.5146e-04	1.1998e-03	1.1998e-03
300.0	1.0	2.78e-06	1.1481e-04	2.5918e-04	2.5101e-04	1.1977e-03	1.1981e-03
300.0	10.0	2.78e-05	1.1327e-04	3.2736e-04	2.4654e-04	1.1770e-03	1.1813e-03
300.0	150.0	4.17e-04	9.1601e-05	1.1789e-03	1.7895e-04	8.6412e-04	9.2420e-04
300.0	300.0	8.33e-04	7.2655e-05	1.6644e-03	1.1454e-04	5.6702e-04	6.7187e-04
0.005	0.1	1.67e-02	9.4998e-05	5.2994e-05	4.6432e-05	9.7836e-05	1.8498e-04
0.1	0.005	4.17e-05	4.4683e-04	2.4329e-04	2.4406e-04	1.1655e-03	1.1720e-03

Tabla 2. Ejemplo 1. Errores en norma $\| \cdot \|_1$ para distintos valores de k (difusión) y v (velocidad). Se divide el dominio $[0, 1]$ en 600 celdas usando condiciones de frontera tipo Robin.

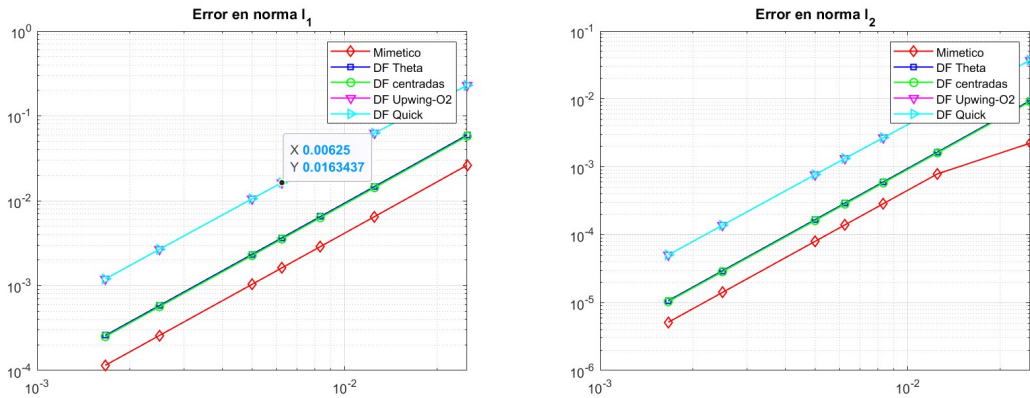


Figura 7. Ejemplo 1. Comportamiento del orden de convergencia de los esquemas MDM y DF para $k = 150$ y $v = 1$. Se utilizan discretizaciones del dominio con 40, 80, 120, 160, 200, 400 y 600 celdas. Condiciones de frontera tipo Robin.

La solución aproximada obtenida con los esquemas en estudio y la distribución del error absoluto en el dominio para el caso de 600 celdas para $k = 150$ y $v = 1$ se muestra en la Figura 8. Las soluciones resultan idénticas y se solapan con la solución exacta. El error absoluto para cada nodo se muestra en la figura de la derecha, se nota el menor error para el caso del esquema MDM.

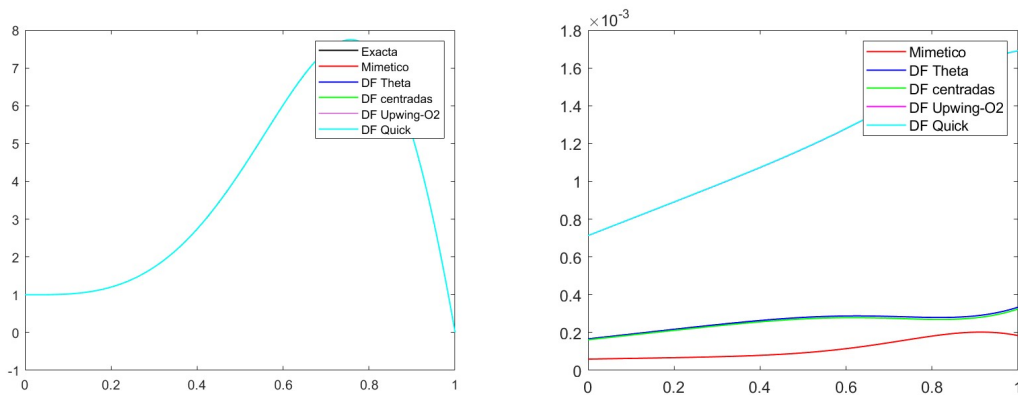


Figura 8. Ejemplo 1. Soluciones aproximadas y exactas para $k = 150$ y $v = 1$. Error absoluto distribuido en el dominio para la discretización de 600 celdas.

La experimentación numérica nos permite concluir que en general el esquema MDM tiene mejor precisión que los cuatro esquema DF cuando $k \gg v$ tanto en condicio-

nes de frontera Dirichlet o Robin. Para el caso de $k \ll v$ y condiciones de frontera Dirichlet el esquema Quick resulta muy eficiente, pero pierde esta condición cuando se tiene condiciones de frontera Robin, siendo superado por DFC.

Después de los resultados obtenidos, se plantea como problema futuro estudiar la posibilidad de definir un operador mimético para aproximar el termino convectivo (divergencia) para el caso de tener definido un problema altamente convectivo. La primera idea es usar una versión adaptada a los esquemas miméticos del esquema DF- θ y después ajustar las propiedades de dicho operador para que resulte mimético (conservativo). Otro problema futuro consiste en hacer un estudio a fondo sobre la definición del esquema Quick para condiciones de frontera Robin.

Cabe destacar que se ha trabajado el caso de $v > 0$, pero el caso de una velocidad negativa resulta totalmente análogo. No obstante, no queda completamente claro el comportamiento del MDM o el DF- θ para este caso. Para el caso de velocidades variables pero que mantengan el signo en todo el dominio debería ser solo un problema de implementación. El caso de velocidades que cambian de signo dentro del dominio de definición se deja también como problema futuro.

BIBLIOGRAFÍA

- Abouali, M. y J. Castillo. "Solving Navier-Stokes equation using Castillo-Grone's mimetic difference operators on GPUs". En: *APS Division of Fluid Dynamics* 57.17 (2012). Ed. por Bulletin of the American Physical Society, págs. 701-720.
- Ames, William F. *Numerical methods for partial differential equations*. Academic press, 2014 (vid. pág. 16).
- Anderson, John David y John Wendt. *Computational fluid dynamics*. Vol. 206. Springer, 1995 (vid. pág. 14).
- Atias, M, M Wolfshtein y M Israeli. "Efficiency of Navier-Stokes Solvers". En: *AIAA Journal* 15.2 (1977), págs. 263-266 (vid. pág. 32).
- Batista, E.d. y J.E. Castillo. "Mimetic schemes on non-uniform structured meshes". En: *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 34.1 (2009), págs. 152-162.
- Bautista, Lola et al. "Mimetic Finite Difference Methods for Restoration of Fundus Images for Automatic Glaucoma Detection". En: *VipIMAGE 2019*. Ed. por João Manuel R. S. "Tavares y Renato Manuel Natal Jorge. Cham: Springer International Publishing, 2019, págs. 104-113 (vid. pág. 47).
- Bazan, C. et al. "Mimetic finite difference methods in image processing". En: *Computational and Applied Mathematics* 30.3 (2011), págs. 701-720.
- Blanco, J. et al. "Tensor formulation of 3-D mimetic finite differences and applications to elliptic problems". En: *Electron. Trans. Numer. Anal.* 45 (2016), págs. 457-475.

- Brzenski, Jared y Jose E. Castillo. "Solving Navier–Stokes with mimetic operators". En: *Computers & Fluids* 254 (2023), pág. 105817. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2023.105817>.
- Burggraf, Odus R. "Analytical and numerical studies of the structure of steady separated flows". En: *Journal of Fluid Mechanics* 24.1 (1966), págs. 113-151 (vid. pág. 31).
- Calderón, G. et al. "Estimation of error and adaptivity in mimetic differences for stationary problems". En: *Bull. Comput. Appl. Math.* 10(1) (2022), págs. 59-80. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13137-023-00232-x>.
- Calderón, Giovanni et al. "Estimation of errors and adaptability in Mimetic Differences for a parabolic type problem". En: *Revista UIS Ingeniería, accepted for publication, 2019* (2019).
- Carrillo, Juan S et al. "Glaucoma Detection using Fundus Images with Mimetic Anisotropic Filtering and Convolutional Neural Networks". En: *2022 E-Health and Bioengineering Conference (EHB)*. IEEE. 2022, págs. 01-04 (vid. pág. 47).
- Castillo, J.E. y R. D. Grone. "A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law". En: *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 25.1 (2003), págs. 128-142 (vid. págs. 12, 46, 64).
- Castillo, J.E. y G. Miranda. *Mimetic Discretization Methods*. Fifth. Boca Raton, Florida: CRC Press, 2013.
- Castillo, J.E. y Mark Yasuda. "Linear Systems Arising for Second-Order Mimetic Divergence and Gradient Discretizations". En: *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms* 4.1 (2005), págs. 67-82 (vid. págs. 12, 46, 87).

- Castillo, Jose E y RD Grone. "A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law". En: *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* 25.1 (2003), págs. 128-142.
- Castillo, José E y Guillermo F Miranda. *Mimetic discretization methods*. CRC Press, 2013.
- Castillo, Jose E y Mark Yasuda. "Linear systems arising for second-order mimetic divergence and gradient discretizations". En: *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms* 4 (2005), págs. 67-82.
- Chorin, Alexandre J, Jerrold E Marsden et al. "A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics [electronic resource]". En: () (vid. pág. 16).
- Corbino, Johnny y Jose E. Castillo. "High-order mimetic finite-difference operators satisfying the extended Gauss divergence theorem". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 364 (2020), pág. 112326. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.042> (vid. pág. 93).
- Cordero, Felipe y Pedro Díez. "XFEM+: una modificación de XFEM para mejorar la precisión de los flujos locales en problemas de difusión con conductividades muy distintas". En: *Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería* 26.2 (2010), págs. 121-133.
- Córdova, L.J. et al. "Compact finite difference modeling of 2-D acoustic wave propagation". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 295 (2016). VIII Pan-American Workshop in Applied and Computational Mathematics, págs. 83-91 (vid. pág. 13).

Delgado, Johnny Corbino y Angel Boada. *jcorbino/mole: v3.0*. Ver. v3.0. Nov. de 2023. DOI: 10.5281/zenodo.10064682.

Freites, MA, J Guevara-Jordan y Jose Castillo. "Un estudio comparativo de los metodos mimeticos para la ecuacion estacionaria de difusion". En: *Trabajo Especial de Grado de Licenciatura no publicado, Escuela de Matemática, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela, Caracas* (2004).

Gomez-Polanco, A, Guevara-Jordan J. M. y B. Molina. "A mimetic iterative scheme for solving biharmonic equations". En: *Mathematical and Computer Modelling* 57.9-10 (2013), págs. 2132-2139.

Gosman, AD. "Heat and mass transfer in recirculating flows". En: *(No Title)* (1969) (vid. pág. 31).

Gresho, Philip M y Robert L Lee. "Don't suppress the wiggles—they're telling you something!" En: *Computers & Fluids* 9.2 (1981), págs. 223-253.

Guevara, J.M., M. Freites y J.E. Castillo. "A New Second Order Finite Difference Conservative Scheme". En: *Divulgaciones Matemáticas* 13.1 (2005), págs. 107-122 (vid. págs. 13, 47).

Petroleum Engineers, Society of, ed. *A second order mimetic approach for tracer flow in oil reservoirs*. 2007, págs. 626-633.

Guevara-Jordan, J. M. et al. "Convergence of a Mimetic Finite Difference Method for Static Diffusion Equation". En: *Advances in Difference Equations* 2007.Article ID 12303, 12 pages (2007). DOI: 10.1155/2007/12303.

- Guevara-Jordan, JM. "Sobre los Esquemas Miméticos de Diferencias Finitas para la Ecuación Estática de Difusión". En: *Trabajo de Ascenso, UCV Caracas, Venezuela* (2005) (vid. pág. 47).
- Guevara-Jordan, JM et al. "A new second order finite difference conservative scheme." En: *Divulgaciones Matemáticas* 13.2 (2005), págs. 107-122.
- Gupta, Murli M y Ram P Manohar. "A critique of a second-order upwind scheme for viscous flow problems". En: *AIAA Journal* 16.7 (1978), págs. 759-761 (vid. pág. 31).
- Gustafsson, Bertil. *High order difference methods for time dependent PDE*. Vol. 38. Springer Science & Business Media, 2007 (vid. pág. 16).
- Hernández, F.F., J.E. Castillo y G.A. Larrazábal. "Large sparse linear systems arising from mimetic discretization". En: *Computers and Mathematics with Applications* 53.1-11 (2007), págs. 215-225.
- Hyman, James M. y Mikhail Shashkov. "The Approximation of Boundary Conditions for Mimetic Finite Difference Methods". En: *Computers Math. Applic.* 36.5 (1998), págs. 79-99 (vid. págs. 12, 46).
- Hyman, James M., Mikhail Shashkov y S. Steinberg. "Mimetic Finite Difference Methods for Diffusion Equations". En: *Computers Math. Applic.* 6.3-4 (2002), págs. 333-352 (vid. págs. 12, 46).
- Leonard, Brian P. "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation". En: *Computer methods in applied mechanics and engineering* 19.1 (1979), págs. 59-98 (vid. págs. 14, 31).

- Leschziner, MA. "Practical evaluation of three finite difference schemes for the computation of steady-state recirculating flows". En: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 23 (1980), págs. 293-312 (vid. pág. 31).
- Leschziner, Mrn A y W Rodi. "Calculation of annular and twin parallel jets using various discretization schemes and turbulence-model variations". En: (1981) (vid. pág. 31).
- LeVeque, Randall J. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. SIAM, 2007 (vid. págs. 14, 38).
- Li, Ben Q. *Discontinuous finite elements in fluid dynamics and heat transfer*. Vol. 578. Springer, 2006.
- Montilla, Orestes, Carlos Cadenas y José Castillo. "Matrix approach to mimetic discretizations for differential operators on non-uniform Grids". En: *Mathematics and Computers in Simulation* 73.1-4 (2006), págs. 215-225.
- Morton, KW y DF Mayers. *Numerical Solution of Partial Differential Equations (1994)* (vid. págs. 45, 84).
- Murio, DA, Carlos E Mejía y S Zhan. "Discrete mollification and automatic numerical differentiation". En: *Computers & Mathematics with Applications* 35.5 (1998), págs. 1-16.
- Rivière, Béatrice. *Discontinuous Galerkin methods for solving elliptic and parabolic equations: theory and implementation*. SIAM, 2008.

- Rojas, Otilio et al. "A dispersion analysis of uniformly high order, interior and boundaries, mimetic finite difference solutions of wave propagation problems". En: *Int J Geomath* 15 (2024), pág. 3. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13137-023-00242-9>.
- Shashkov, Mikhail. "Conservative Finite-Difference Methods on General Grids". En: *Symbolic & Numeric Computation. Taylor & Francis* 1 (1995) (vid. pág. 70).
- Shashkov, Mikhail y Stanly Steinberg. "Support-Operator Finite-Difference Algorithms for General Elliptic Problems". En: *Journal of Computational Physics* 118.1 (1995), págs. 131-151 (vid. págs. 12, 46).
- Smith, Gordon D. *Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods*. Oxford university press, 1985 (vid. págs. 14, 45, 53).
- Solano-Feo, F. et al. "A new mimetic scheme for the acoustic wave equation". En: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 295 (2016). VIII Pan-American Workshop in Applied and Computational Mathematics, págs. 2-12 (vid. págs. 13, 47).
- Sosa Jones, G., J. Arteaga y O. Jiménez. "A study of mimetic and finite difference methods for the static diffusion equation". En: *Computers and Mathematics with Applications* 76.1 (2018), págs. 633-648.
- Stubbley, GD, GD Raithby y AB Strong. "Proposal for a new discrete method based on an assessment of discretization errors". En: *Numerical heat transfer* 3.4 (1980), págs. 411-428 (vid. pág. 32).
- Taylor, Michael E et al. *Partial differential equations III*. Vol. 2. Springer, 1996 (vid. pág. 16).

Thom, Alexander Strang y Colin James Apelt. "Field computations in engineering & physics". En: *(No Title)* (1961) (vid. pág. 31).

Villamizar, Jorge et al. "High order mimetic differences applied to the convection–diffusion equation: a matrix stability analysis". En: *Int J Geomath* 14 (2023), pág. 26. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13137-023-00232-x>.

Villamizar, Jorge et al. "Mimetic finite difference methods for restoration of fundus images for automatic detection of glaucoma suspects". En: *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering: Imaging & Visualization* 10.5 (2022), págs. 492-499. DOI: 10.1080/21681163.2021.1914733 (vid. pág. 47).

Willie Jr, CR. *Advanced engineering mathematics*. Vol. 151. New York, McGraw-Hill, 1966.