



# Unidades Tecnológicas de Santander

Departamento de Ciencias Básicas

Bucaramanga, 15 de octubre de 2024

Capacitación de interés social:

## Diferencias Finitas Miméticas (DFM): Instalación de librería y primeros pasos



Prof. Giovanni Calderón  
Departamento de Ciencias Básicas  
Unidades Tecnológicas de Santander  
E-mail: [gi.calderon@correo.uts.edu.co](mailto:gi.calderon@correo.uts.edu.co)



Time: Oct 15, 2024 08:30 AM Bogota

Join Zoom Meeting

<https://cedia.zoom.us/j/84603936840>

Meeting ID: 846 0393 6840



UNIVERSIDAD  
**YACHAY**  
TECH

## Contenido del curso:



### Contenido del curso:

#### Primera Parte: Instalación de librerías y primeros pasos

- Breve recordatorio de las Diferencias Finitas Miméticas (DFM).
- Instalación de la librería: directorio de comandos 1D, 2D y 3D, aplicaciones.
- Primeros ejemplos: Operadores **G**, **D**, **B**. Problema 1D estacionario: Ejemplo 1 (Dirichlet BC) , Ejemplo 2 (Robin BC), Ejemplo 3 (Ecuación conservativa).



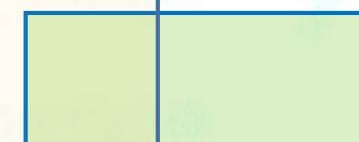
#### Segunda Parte: Problemas en 1D: convectivo, transitorio.

- Recordatorio de las DFM. Operadores miméticos de segundo orden. La idea detrás de los operadores miméticos
- **Problema 1:** Problema de convección - difusión 1D.
- **Problema 2:** Problema transitorio 1D: ecuación parabólico, ecuación de convección difusión
- **Problema 3:** Problemas con condiciones de frontera Robin.



#### Tercera parte: Implementación de Problemas 2D

- **Problema 1:** Problema estacionario 2D.
- **Problema 2:** Implementación de condiciones de frontera.
- Generalidades: orden superior, estabilidad, convergencia, aplicaciones.



## Primera Parte: Introducción a las Diferencias Finitas Miméticas (DFM)

Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP):

Elípticas

Parabólicas

Hiperbólicas

Métodos numéricos para encontrar soluciones aproximadas

Método de los elementos finitos

Volúmenes Finitos

Diferencias Finitas

Otros

[1] J. Castillo, R. D. Grone, *A matrix analysis approach to higher-order approximations for divergence and gradients satisfying a global conservation law*, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 25 (1) (2003) 128–142.

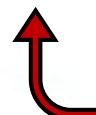
[2] J. Castillo, M. Yasuda, *Linear systems arising for second-order mimetic divergence and gradient discretizations*, Journal of Mathematical Modelling and Algorithms 4 (1) (2005) 67–82.

[3] J. Corbino and J. Castillo, *High-order mimetic finite-difference operators satisfying the extended Gauss divergence theorem*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 364, (2020) 112326. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.06.042>

Diferencias Finitas Miméticas



MOLE



<https://github.com/csrc-sdsu/mole>

## Diferencias finitas miméticas (DFM):

Los esquemas miméticos se basan en aproximaciones de alto orden de la divergencia ( $\nabla \cdot$ ) y gradiente ( $\nabla$ ) en mallas miméticas (mallas escalonadas) que satisfacen un análogo discreto del teorema de la divergencia:

### O Teorema de Gauss

$$\iiint_{\Omega} \operatorname{div} F d\Omega = \iint_S F \cdot n dS$$

Dadas dos funciones suaves  $f$  y  $g$  tales que  $F = f\nabla g$ , entonces

$$\iiint_{\Omega} (\nabla \cdot \nabla g) f d\Omega + \iiint_{\Omega} \nabla f \cdot \nabla g d\Omega = \iint_S f \frac{\partial g}{\partial n} dS$$

Que llamaremos Teorema de Green-Stokes-Gauss

En algunos casos el gradiente  $\nabla g$  es sustituido por un campo genérico  $\vec{v}$  resultando la expresión:

$$\iiint_{\Omega} (\nabla \cdot \vec{v}) f dV + \iiint_{\Omega} \vec{v} \cdot \nabla f dV = \iint_{\partial\Omega} f \vec{v} \cdot \vec{n} dS.$$

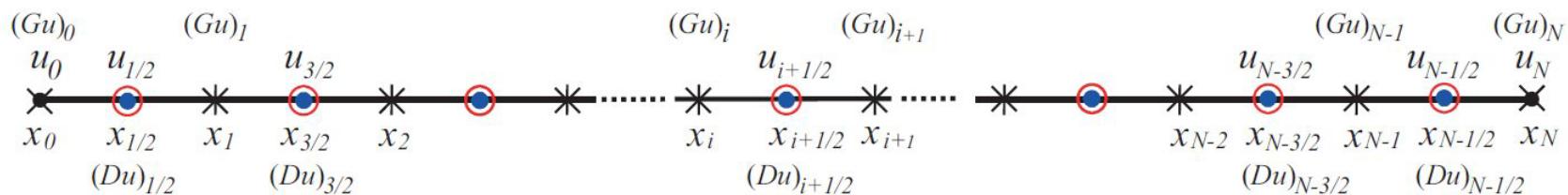
En el caso unidimensional en el intervalo  $[x_l, x_r]$ , este teorema es simplemente la integración por partes:

$$\int_{x_l}^{x_r} \frac{dv}{dx} f dx + \int_{x_l}^{x_r} v \frac{df}{dx} dx = v(x_r)f(x_r) - v(x_l)f(x_l).$$

cumple una ley de conservación

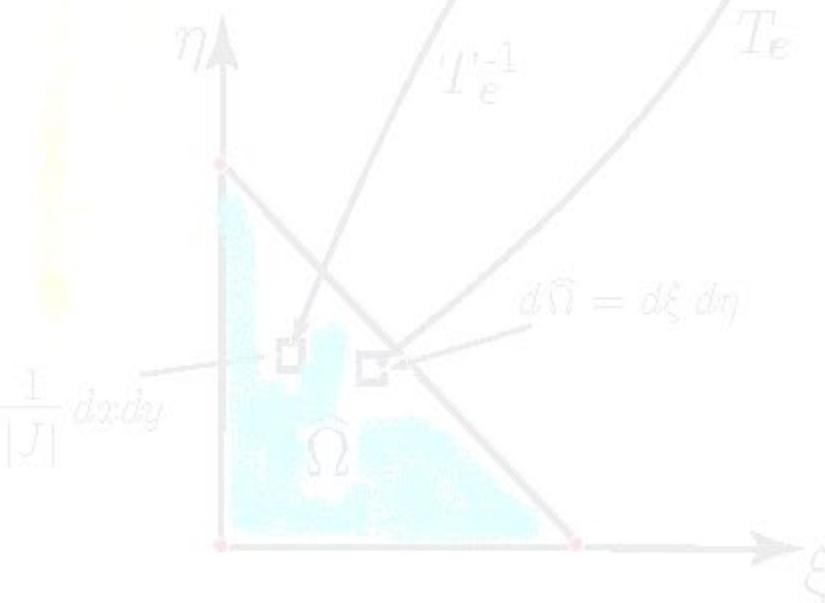
## Diferencias finitas miméticas: Mallas staggers o miméticas

Discretización del dominio físico 1D:



Malla mimética unidimensional

$G$  : Gradiente  
 $D$  : Divergencia



## Diferencias Miméticas: Operadores discretos

### ➤ Operador gradiente:

El operador gradiente de  $u$  se define en cualquier nodo entero  $x_i$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} G_0 u = -\frac{8}{3h}u_0 + \frac{3}{h}u_{1/2} - \frac{1}{3h}u_{3/2}, \\ G_i u = \frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{h}, \quad i = 1, \dots, N-1, \\ G_N u = \frac{8}{3h}u_N - \frac{3}{h}u_{N-1/2} + \frac{1}{3h}u_{N-3/2}. \end{array} \right.$$

### ➤ Operador divergencia:

El operador divergencia de  $\vec{v}$  se define en los nodos  $x_{i+1/2}$  de la malla mimética:

$$(Dv)_{i+1/2} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h} \quad \text{para } i = 0, 1, \dots, N-1,$$

**Observación:** Si denotamos por HC a los nodos de la malla con subíndice fraccionario incluyendo los bordes y por HL los nodos con subíndices enteros, entonces los operadores discretos  $G$  y  $D$  satisfacen la siguiente relación:

$$\mathbf{G} : HC \longrightarrow HL$$

$$\mathbf{D} : HL \longrightarrow HC$$

$$u\left(\frac{h}{2}\right) = u(0) + u'(0)\left(\frac{h}{2}\right) + u''(0)\left(\frac{h}{2}\right)^2 / 2! + \dots$$

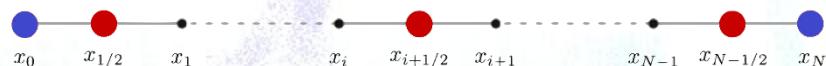
$$u\left(\frac{3h}{2}\right) = u(0) + u'(0)\left(\frac{3h}{2}\right) + u''(0)\left(\frac{3h}{2}\right)^2 / 2! + \dots$$

representa un sistema lineal de ecuaciones para la primera y la segunda derivada de  $u$  puesto que el valor de  $u$  en cualquier nodo se supone que es conocida.

$$u'(0) = -\frac{8}{3h}u(0) + \frac{3}{h}u\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3h}u\left(\frac{3h}{2}\right) + O(h^2)$$

$$u\left(\frac{2-h}{2}\right) = u(1) - u'(1)\left(\frac{h}{2}\right) + u''(1)\left(\frac{h}{2}\right)^2 / 2! + \dots$$

$$u\left(\frac{2-3h}{2}\right) = u(1) - u'(1)\left(\frac{3h}{2}\right) + u''(1)\left(\frac{3h}{2}\right)^2 / 2! + \dots$$



## Diferencias Miméticas: Gradiente y Divergencia 1D

Los operadores en forma matricial:

$$\mathbf{G}\vec{u} = \mathbf{G}_{1d}^N \vec{u} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -\frac{8}{3} & 3 & -\frac{1}{3} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{3} & -3 & \frac{8}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_{\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ u_{N-\frac{1}{2}} \\ u_N \end{bmatrix}$$

→  $\mathbf{G}\vec{u} = \frac{1}{h} \widehat{\mathbf{G}}\vec{u}$

$$\mathbf{D}\vec{v} = \mathbf{D}_{1d}^N \vec{v} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{N-2} \\ v_{N-1} \\ v_N \end{bmatrix}$$

→  $\mathbf{D}\vec{v} = \frac{1}{h} \widehat{\mathbf{D}}\vec{v}$

donde  $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{(N+1) \times (N+2)}$  y  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{(N+2) \times (N+1)}$ .

## Análisis del método en 1D:

El estudio se hará de manera unidimensional, entonces el Teorema Green-Stokes-Gauss se reduce a:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} dx = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$

**Observación.** Cuando la función  $f$  o  $v$  son constantes entonces la ecuación se reduce al teorema fundamental del cálculo.

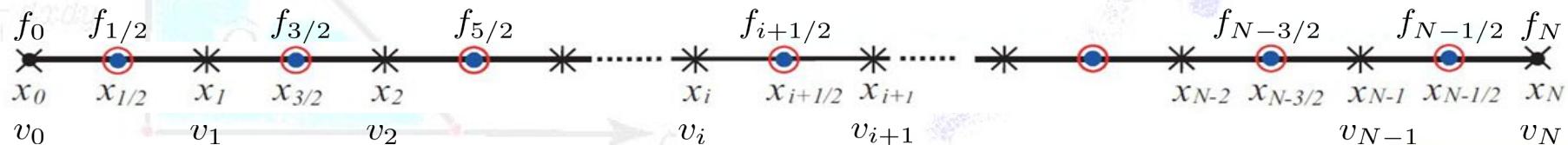
En esta expresión,  $\frac{dv}{dx}$  juega el papel del operador divergencia y  $\frac{df}{dx}$  representa el operador gradiente.

Para obtener la versión semidiscreta de la fórmula de integración por partes sobre la malla mimética se debe buscar las restricciones apropiadas de las funciones  $v$  y  $f$  en los nodos de la malla.

Como  $v$  está evaluada en el operador divergencia y  $f$  está evaluada por el operador gradiente

$$\vec{v} = (v(x_0), v(x_1), \dots, v(x_{N-1}), v(x_N))^T$$

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



## Análisis del método en 1D:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} dx = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$

Es necesario definir las fórmulas de integración que evaluaran la integrales que aparecen. La primera integral, cuyo integrando esta definido en los centros de las celdas de la malla, la fórmula del punto medio nos da:



$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx \simeq \sum_{i=0}^{N-1} \text{Div} \left( v \left( x_{i+\frac{1}{2}} \right) \right) f \left( x_{i+\frac{1}{2}} \right) h$$

donde  $\text{Div}(\cdot)$  es el operador divergencia continuo unidimensional. La segunda integral esta definida en los bordes o lados de los bloques que conforman la malla. En consecuencia, ella puede ser aproximada por la formula de Newton Cotes de 3/8



$$\begin{aligned} \int_0^1 v \frac{df}{dx} dx &\simeq h \frac{3}{8} v(x_0) \text{Grad}(f(x_0)) + h \frac{9}{8} v(x_1) \text{Grad}(f(x_1)) \\ &+ \sum_{i=2}^{N-2} h v(x_i) \text{Grad}(f(x_i)) + h \frac{9}{8} v(x_{N-1}) \text{Grad}(f(x_{N-1})) + h \frac{3}{8} v(x_N) \text{Grad}(f(x_N)) \end{aligned}$$

donde  $\text{Grad}(\cdot)$  denota al operador gradiente continuo unidimensional.

Usando el producto interior  $\langle x, y \rangle_A = x^T A y$

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx \simeq \langle \overrightarrow{\text{Div}}(v), \vec{f} \rangle_{hI}$$

$$\int_0^1 v \frac{df}{dx} dx \simeq \langle \vec{v}, \overrightarrow{\text{Grad}}(f) \rangle_{hP}$$

$$P = \begin{bmatrix} 3/8 & 0 & \cdots & & 0 \\ 0 & 9/8 & \ddots & & \\ \ddots & \ddots & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & \cdots & & 1 & \ddots \\ & & & \ddots & 9/8 & 0 \\ & & & & 0 & 3/8 \end{bmatrix}$$

## Análisis del método en 1D:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} dx = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$

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 produzcan exactamente la diferencia  $v(1)f(1) - v(0)f(0)$  que aparece en la versión continua. En vista de esta observación la suma de los productos internos se denotará por una función, que llamaremos  $BO()$ . En consecuencia la versión semidiscreta del teorema de Green-Stokes-Gauss viene representada por la siguiente expresión:

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

## Concepto de esquema mimético:

Se dice que la discretización de los operadores gradiente y divergencia sobre una malla mimética forman un esquema mimético si satisfacen las siguientes condiciones:

1. La sustitución de los operadores gradiente, Grad, y divergencia, Div, por sus discretizaciones **G** y **D** en alguna versión semidiscreta del teorema de Green-Stokes-Gauss sobre una malla mimética debe 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  $v(1)f(1) - v(0)f(0)$  como término independiente sin que sus componentes,  $v(1)f(1)$  y  $v(0)f(0)$ , se repitan en otra parte.
2. La versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss obtenida en la parte (1) debe reducirse a una versión discreta y exacta del teorema fundamental del cálculo cuando  $v$  o  $f$  sean constantes.
3. 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.

## Análisis del método en 1D:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} dx = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$

Para verificar la condición (1) se sustituyen las versiones continuas de divergencia,  $\overrightarrow{\text{Div}}(v)$ , y gradiente,  $\overrightarrow{\text{Grad}}(f)$ , en la fórmula semidiscreta por sus discretizaciones  $\mathbf{D}\vec{v}$  y  $\mathbf{G}\vec{f}$ . Después de dicha sustitución los productos internos que aparecen se transforman en dos sumatorias, en las cuales la mayoría de sus términos son semejantes pero de signos contrarios, obteniéndose la siguiente expresión para la función  $BO$ .

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

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

$$\lim_{h \rightarrow 0} BO(\vec{f}, \vec{v}) = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$

Se observa fácilmente que la diferencia  $v(1)f(1) - v(0)f(0)$  aparece explícitamente como término independiente y que ella puede ser escrita  $v(x_N)f(x_N) - v(x_0)f(x_0)$ , lo cual prueba que los productos  $v(1)f(1)$  y  $v(0)f(0)$  no se repiten. Finalmente,  $BO$  puede ser escrita en forma matricial.

$$BO(\vec{f}, \vec{v}) = \langle \mathbf{B}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1/8 & -1/8 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1/8 & 1/8 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1/8 & 1/8 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/8 & -1/8 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

## Análisis del método en 1D:

$$\int_0^1 \frac{dv}{dx} f dx + \int_0^1 v \frac{df}{dx} dx = v(1)f(1) - v(0)f(0)$$

Por último obtenemos la versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss

$$\langle \mathbf{D}\vec{v}, \vec{f} \rangle_{hI} + \langle \vec{v}, \mathbf{G}\vec{f} \rangle_{hP} = \langle \mathbf{B}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I$$

$$\langle \widehat{\mathbf{D}}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I + \langle \vec{v}, \widehat{\mathbf{G}}\vec{f} \rangle_P = \langle \mathbf{B}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I$$

### Ley de conservación:

Las discretizaciones  $\mathbf{D}\vec{v}$  y  $\mathbf{G}\vec{f}$  satisfacen una versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss cuyo lado derecho es asintóticamente igual a la diferencia  $v(1)f(1) - v(0)f(0)$  y por lo tanto no es evidente que el esquema sea conservativo. A fin de verificar esta condición se asume que la función  $v$  es constante y se sustituye en la versión discreta del teorema de Green-Stokes-Gauss resultando la expresión.

$$\langle \vec{v}, \mathbf{G}\vec{f} \rangle_{hP} = \langle \vec{v}, \widehat{\mathbf{G}}\vec{f} \rangle_P = \langle \mathbf{B}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I$$

De manera análoga, si se supone que  $f$  es constante se produce la siguiente relación

$$\langle \mathbf{D}\vec{v}, \vec{f} \rangle_{hI} = \langle \widehat{\mathbf{D}}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I = \langle \mathbf{B}\vec{v}, \vec{f} \rangle_I$$

En ambas ecuaciones al observar la expresión para la función  $BO$  se obtiene que

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

Por los tanto, las ecuaciones representan versiones discretas exactas del teorema fundamental del cálculo obtenidas directamente del teorema de GreenStokes-Gauss discreto.

## Instalación de la librería MOLE

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, podrás llamar a cualquiera de las 29 funciones proporcionadas por MOLE para construir un EDM para cualquier modelo de EDP.

The screenshot shows the GitHub repository page for 'mole'. At the top, there are buttons for 'master', '8 Branches', and '1 Tags'. A search bar says 'Go to file' and a 'Code' button is highlighted. To the right, there's an 'About' section with the title 'The Mimetic Operators Library Enhanced' and tags for 'numerical-methods', 'finite-differences', 'pde', 'vector-calculus', and 'mimetic'. Below this are links for 'Readme', 'GPL-3.0 license', 'Code of conduct', 'Cite this repository', 'Activity', 'Custom properties', '16 stars', '8 watching', and '35 forks'. A red arrow points from the bottom right towards the 'mole\_MATLAB' commit in the list below. The commit list shows various commits, with the 'mole\_MATLAB' commit being the most recent and highlighted by a red box. The commit details show it was a fix for mixedBC2D.m. Other commits include updates to workflows, JOSS, compact\_operators, doc\_MATLAB, examples\_C++, examples\_MATLAB, images, mole\_C++, tests\_C++, tests\_MATLAB, .gitattributes, .gitignore, .zenodo.json, CITATION.cff, CODE\_OF\_CONDUCT.md, CONTRIBUTING.md, and a report on MOLE.pdf.

Commit	Description	Date
jcorbino Update README.md	added update to github test sequence, fix for error	2 months ago
.github/workflows	Update paper.md	2 months ago
JOSS	Create README.md	last year
compact_operators	Create README.md	last year
doc_MATLAB	Cosmetic	2 months ago
examples_C++	Using MOLE interpolators, and notes about grids, and what ...	2 months ago
examples_MATLAB	Add files via upload	10 months ago
images	Fixed bug in mixedBC.cpp	2 months ago
mole_C++	Fixed bug in mixedBC2D.m	2 months ago
<b>mole_MATLAB</b>	Fixed bug in mixedBC2D.m	2 months ago
tests_C++	Added fifth test. Improved formatting	2 months ago
tests_MATLAB	Added 6th test and fixed bug on mixedBC3D	2 months ago
.gitattributes	Update .gitattributes	3 years ago
.gitignore	Update .gitignore	2 months ago
.zenodo.json	Create .zenodo.json	2 months ago
CITATION.cff	Update CITATION.cff	2 months ago
CODE_OF_CONDUCT.md	Create CODE_OF_CONDUCT.md	7 years ago
CONTRIBUTING.md	Update CONTRIBUTING.md	2 months ago
CSPC Report on MOLE.pdf	Add files via upload	last year

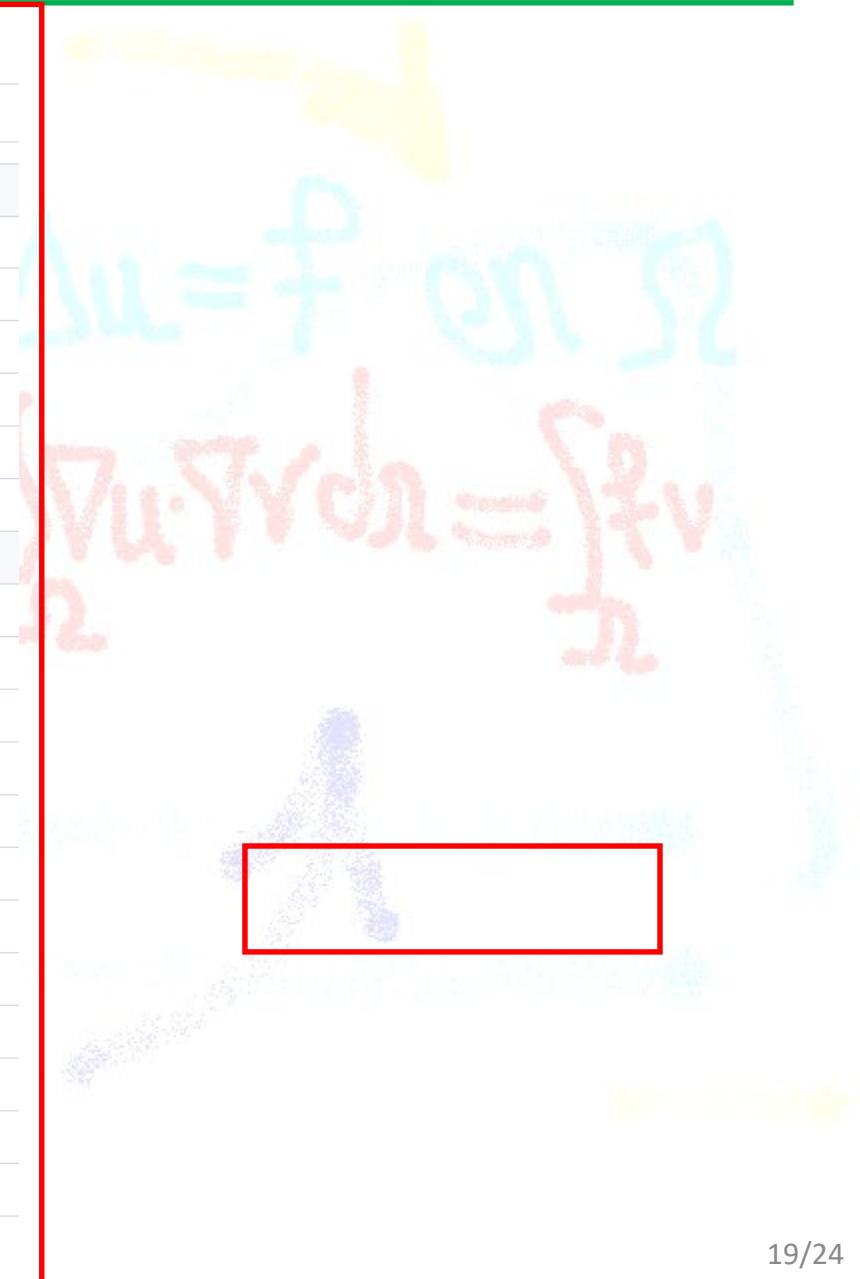
# Instalación de la librería MOLE

Files

master

Go to file

- > .github
- > JOSS
- > compact\_operators
- > doc\_MATLAB
- > examples\_C++
- > examples\_MATLAB
- > images
- > mole\_C++
- ✓ mole / mole\_MATLAB /
- jcorbino Fixed bug in mixedBC2D.m ✓
- Name
- ..
- grids
- DI2.m
- DI3.m
- GI1.m
- GI13.m
- GI2.m
- amean.m
- boundaryIdx2D.m
- curl2D.m
- div.m
- div2D.m
- div2DCurv.m
- div2DNonUniform.m
- div3D.m
- div3DCurv.m
- div3DNonUniform.m
- divNonUniform.m
- grad.m



## Implementación mimética 1D: Ejemplo 1

### ➤ Problema modelo:

$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dx^2} = f(x) & a \leq x \leq b \\ u(a) = \alpha \\ u(b) = \beta \end{cases} \text{ Dirichlet}$$



$$\begin{cases} \frac{d^2u}{dx^2} = 1 & 0 < x < 2 \\ u(0) = 1 \\ u(2) = 0 \end{cases}$$

$$u(x) = 1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^2$$

### ➤ Esquema mimético:

$$[\mathbf{B} + \mathbf{DG}]U = F + f_b$$

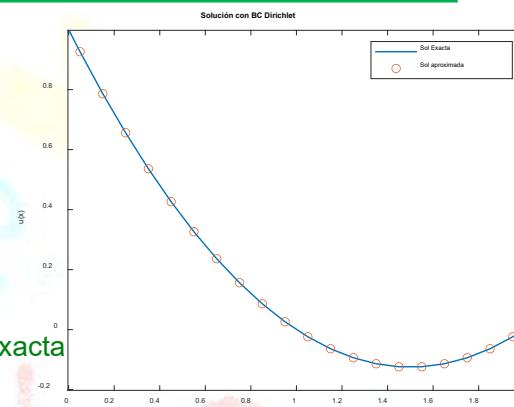
$$U = (U_0, U_{1/2}, \dots, U_{N-1/2}, U_N)^T$$

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

$$f_b = (C_0, 0, \dots, 0, C_1)^T$$

```
clc, clear, close all
addpath('..//mole_MATLAB')
```

```
west = 0; % Domain's limits
east = 2;
C0 = 1; % West BC
C1 = 0; % East BC
fuente = @(x)0*x+1; % f(x)
SOL = @(x)1-1.5*x+0.5*x.^2; % Sol exacta
```



```
nelem = 20; % number of cells
dx =(east-west)/nelem;% Step size
orden = 2; % Order of accuracy
xgridSca = [west west+.5*dx: dx :east-.5*dx east]; % 1D Staggered grid
d = west+.5*dx: dx :east-.5*dx; % Staggered grid sin frontera
G = grad(orden,nelem,dx);
D = div(orden,nelem,dx);
BC = robinBC GECS(orden,nelem,dx,1,0);
f = fuente(d);
F = [C0 f C1];
KK = BC + D*G;
UDM = (KK\F'); % Calculo de la Solución Usando Mimeticos.
```



Algo más se debe decir

```
% Plot result
plot(xgridSca, SOL(xgridSca))
hold on
plot(xgridSca, UDM, 'o')
legend('Sol Exacta', 'Sol aproximada', 'Location', 'NorthEast')
title('Solución con BC Dirichlet')
xlabel('x')
ylabel('u(x)')
```

## Implementación mimética 1D

```
function BC = robinBC(k, m, dx, a, b)
% Returns a m+2 by m+2 one-dimensional
% mimetic boundary operator that
% imposes a boundary condition of Robin's type
%
% Parameters:
% k : Order of accuracy
% m : Number of cells
% dx : Step size
% a : Dirichlet Coefficient
% b : Neumann Coefficient
```

```
A = sparse(m+2, m+2);
A(1, 1) = a;
A(end, end) = a;

B = sparse(m+2, m+1);
B(1, 1) = -b;
B(end, end) = b;

G = grad(k, m, dx);
BC = A + B*G;
end
```

Función original  
de MOLE

Condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} au(0) - bu'(0) &= C_0 \\ au(2) + bu'(2) &= C_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} au(\text{west}) - bu'(\text{west}) &= C_0 \\ au(\text{east}) + bu'(\text{east}) &= C_1 \end{aligned}$$

La función `robinBC_GECS()` no es de **MOLE**, fue creada para poder implementar el operador de frontera **B**, dado explícitamente acá, pues la función `robinBC()` de **MOLE** está pensada para el operador **G** definido por Castillo con un orden uno de convergencia en los nodos de frontera.

```
A = sparse(m+2, m+2);
A(1, 1) = a;
A(end, end) = a;

G = grad(k, m, dx);
B = mimeticB(k,m);
BC = A + b*B*G;
```

## Implementación mimética 1D: Ejemplo 2

### ➤ Problema modelo:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = 1 \quad 0 \leq x \leq 2$$

$$u(0) - u'(0) = 5/2 \quad \left. \begin{array}{l} \\ \text{Robin} \end{array} \right.$$

$$u(2) + u'(2) = 1/2$$

$$u(x) = 1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^2$$

```
clc, clear, close all
addpath('..../mole_MATLAB')
```

```
west = 0; % Domain's limits
east = 2;
```

```
C0 = 1; % West BC
```

```
C1 = 0; % East BC
```

```
fuente = @(x)0*x+1; % f(x)
```

```
SOL = @(x)1-1.5*x+0.5*x.^2; % Sol exacta
```

```
nelem = 20; % number of cells
```

```
dx =(east-west)/nelem;% Step size
orden = 2; % Order of accuracy
```

```
xgridSca = [west west+.5*dx: dx :east-.5*dx east]; % 1D Staggered
grid
```

```
d = west+.5*dx: dx :east-.5*dx; % Staggered grid sin frontera
```

```
G = grad(orden,nelem,dx);
```

```
D = div(orden,nelem,dx);
```

```
BC = robinBC_GECS(orden,nelem,dx,1,1);
```

```
f = fuente(d);
```

```
F = [C0 f C1];
```

```
KK = BC + D*G;
```

```
UDM = (KK\F'); % Calculo de la Solución Usando Míméticos.
```

% Plot result

```
plot(xgridSca, SOL(xgridSca))
```

```
hold on
```

```
plot(xgridSca, UDM, 'o')
```

```
legend('Sol Exacta', 'Sol aproximada', 'Location', 'NorthEast')
```

```
title('Solución con BC Robin')
```

```
xlabel('x')
```

```
ylabel('u(x)')
```

### ➤ Esquema mimético:

$$[\mathbf{B} + \mathbf{DG}]U = F + f_b$$

$$U = (U_0), U_{1/2}, \dots, U_{N-1/2}, U_N)^T$$

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

$$f_b = (C_0, 0, \dots, 0, C_1)^T$$

## Implementación mimética 1D: Ejemplo 3

### ➤ Problema modelo:

$$\begin{cases} (k(x)u_x)_x = f(x) & a < x < b \\ u(a) = \alpha \\ u(b) = \beta \end{cases} \text{ Dirichlet}$$

$$u(x) = -\frac{11}{6}x^3 + \frac{15}{2}x^2 - \frac{20}{3}x + 1$$

$$f(x) = -\frac{33}{2}x^2 + 30x - \frac{20}{3}$$

$$k(x) = x$$

$$a = 0, \quad b = 2; \quad \alpha = 1, \quad \beta = 3$$

### ➤ Esquema mimético:

$$[\mathbf{B} + \mathbf{DZG}]U = F + f_b$$

$$U = (U_0, U_{1/2}, \dots, U_{N-1/2}, U_N)^T$$

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

$$f_b = (C_0, 0, \dots, 0, C_1)^T$$

```
clc, clear, close all
addpath('..../mole_MATLAB')
```

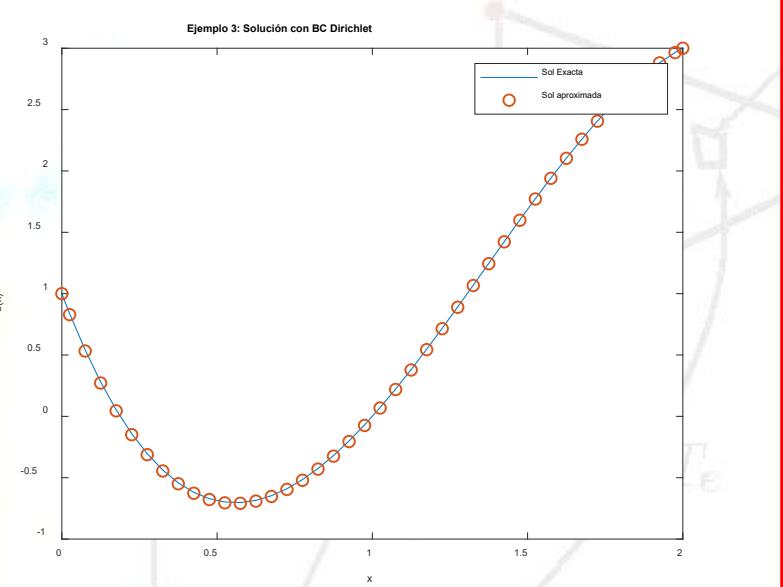
```
west = 0; % Domain's limits
east = 2;
C0 = 1; % West BC
C1 = 3; % East BC
fuente = @(x)-33/2*x.^2 + 30*x - 20/3; %f(x)
SOL = @(x)-(11/6)*x.^3 + (15/2)*x.^2 - (20/3)*x + 1; % Sol exacta
K = @(x);
```

```
nelem = 20; % number of cells
dx =(east-west)/nelem;% Step size
orden = 2; % Order of accuracy
xgridSca = [west west+.5*dx: dx :east-.5*dx east]; % 1D Staggered
grid
d = west+.5*dx: dx :east-.5*dx; % Staggered grid sin frontera
G = grad(orden,nelem,dx);
D = div(orden,nelem,dx);
BC = robinBC_GECS(orden,nelem,dx,1,0);
f = fuente(d);
F = [C0 f C1];
Z = diag(K(xgridVec),0);
```

```
KK = BC + D*Z*G;
UDM = (KK\F'); % Calculo de la Solución Usando Mimiticos.
```

```
% Plot result
plot(xgridSca, SOL(xgridSca))
hold on
plot(xgridSca, UDM, 'o')
legend('Sol Exacta', 'Sol aproximada', 'Location', 'NorthEast')
title('Ejemplo 3: Solución con BC Dirichlet')
xlabel('x')
ylabel('u(x)')
```

## Implementación mimética 1D: Ejemplo 3



## Discusión final:

Por hacer:

### Segunda Parte: Problemas en 1D: convectivo, transitorio.

- Recordatorio de las DFM. Operadores miméticos de segundo orden. La idea detrás de los operadores miméticos
- **Problema 1:** Problema de convección - difusión 1D.
- **Problema 2:** Problema transitorio 1D: ecuación parabólico, ecuación de convección difusión
- **Problema 3:** Problemas con condiciones de frontera Robin.

### Tercera parte: Implementación de Problemas 2D

- **Problema 1:** Problema estacionario 2D.
- **Problema 2:** Implementación de condiciones de frontera.
- Generalidades: orden superior, estabilidad, convergencia, aplicaciones.

Gracias...





## Implementación mimética 1D

➤ Problema modelo:

$$k(x) \frac{d^2}{dx^2} u + \nu(x) \frac{d}{dx} u = f, \quad \text{en } \Omega = (a, b),$$

$$\alpha_a u(a) + \beta_a \frac{d}{dx} u(a) = \gamma_a \quad \alpha_b u(b) + \beta_b \frac{d}{dx} u(b) = \gamma_b$$

➤ Esquema mimético:

$$[[\alpha] + [\beta](\mathbf{B}\mathbf{G}) + k\mathbf{D}\mathbf{G} + \nu\mathbf{G}]U = F + f_b.$$

$$B = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/8 & -1/8 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1/8 & 1/8 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1/8 & 1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1/8 & -1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{N+2 \times N+2}$$

$$U = (U(x_0), U(x_{1/2}), \dots, U(x_{N-1/2}), U(x_N))^t,$$

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

$f_b = (\gamma_a, 0, \dots, 0, \gamma_b)^t$  y las matrices  $[\alpha]$  y  $[\beta]$  son tales que

$$\alpha_{1,1} = \alpha_a, \quad \alpha_{N+2,N+2} = \alpha_b, \quad \beta_{1,1} = \beta_a, \quad \beta_{N+2,N+2} = \beta_b$$

y el resto de entradas son cero.

## Experimentación numérica 1D estacionario:

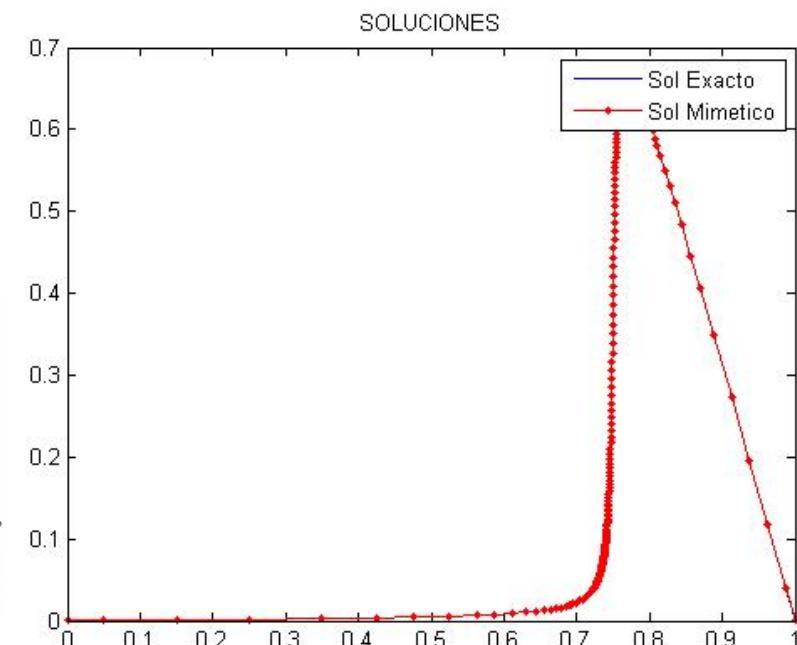
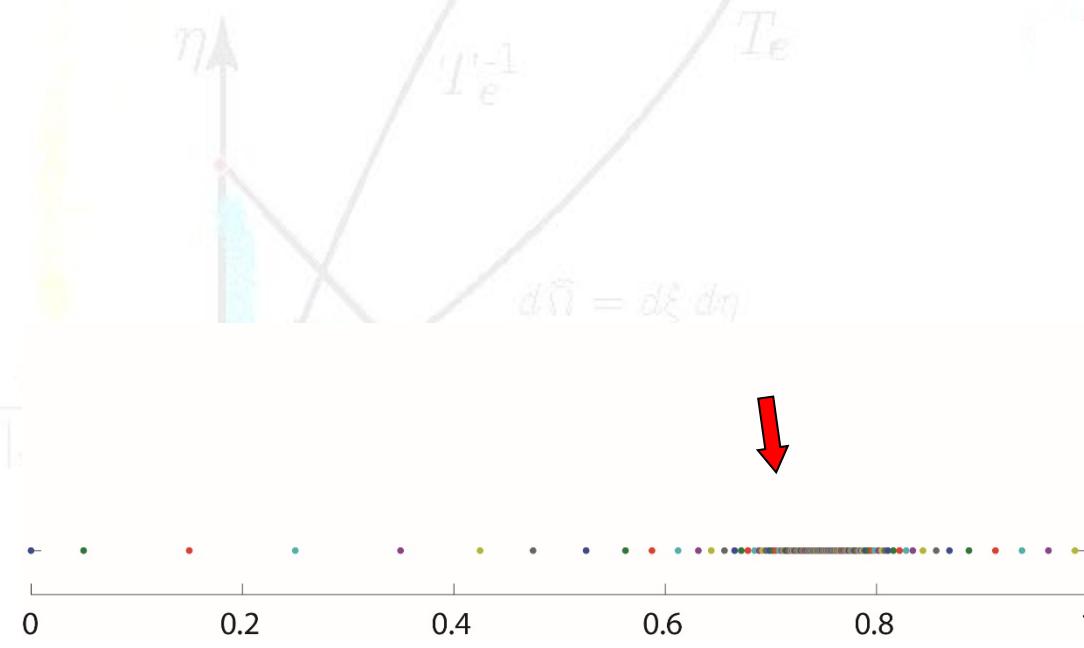
Se resuelve el problema

$$k(x) \frac{d^2}{dx^2} u + \nu(x) \frac{d}{dx} u = f, \quad \text{en } \Omega = (0, 1),$$

$$u(0) + u'(0) = \alpha/(1 + \alpha^2 x_0^2), \quad u(1) + u'(1) = -\arctan(\alpha(1 - x_0)) - \arctan(\alpha x_0),$$

con,  $k(x) = 1/\alpha + \alpha(x - x_0)^2$ ,  $\nu(x) = k'(x)$ ,  $\alpha = 250$  y  $x_0 = 0.75$ , y un término fuente,  $f(x)$ , definido tal que la solución analítica del problema viene dada por

$$u(x) = (1 - x) [\arctan(\alpha(x - x_0)) + \arctan(\alpha x_0)]$$

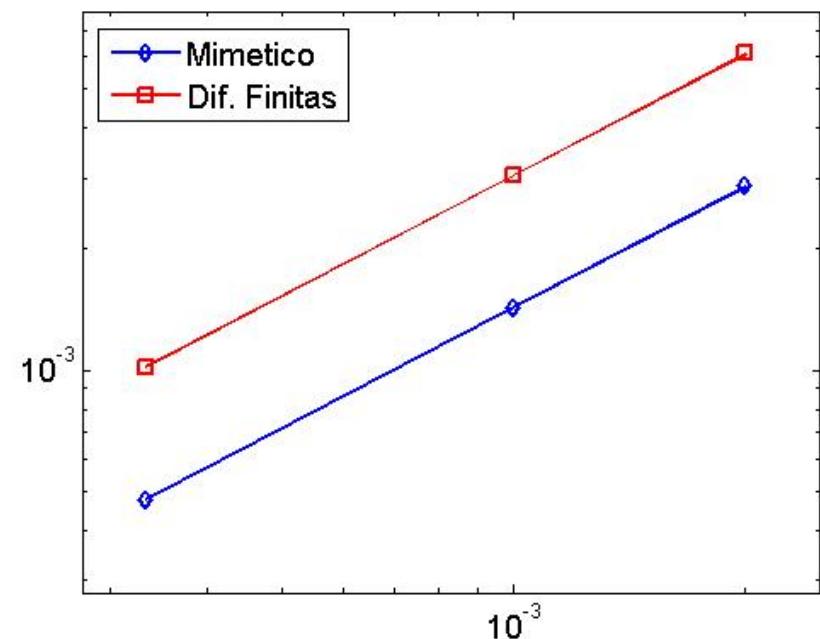
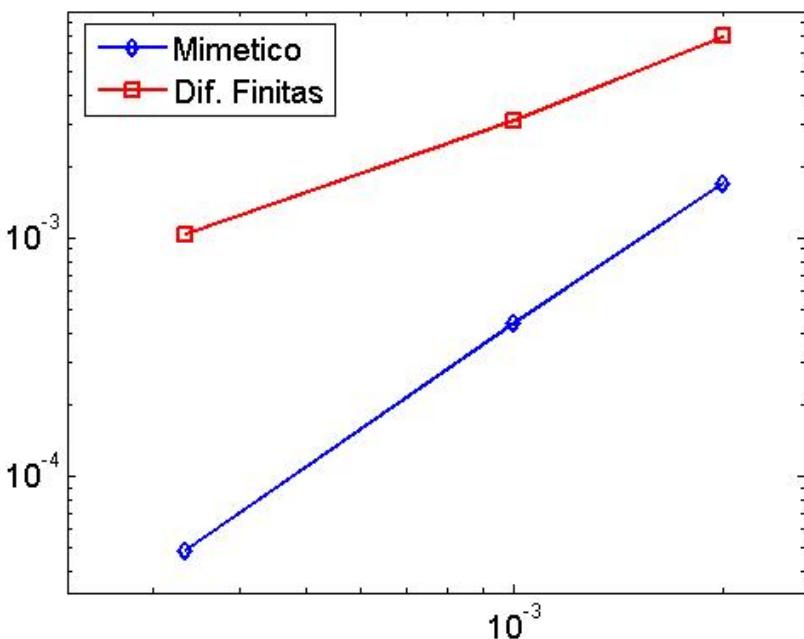


## Experimentación numérica 1D estacionario:

Para el análisis se usan las normas del máximo,  $\|\cdot\|_\infty$ , y la norma  $L_2$  definidas por

$$\|e\|_\infty := \max \{e_j := |\tilde{u}_j - u_j|\}, \quad \|e\|_{L_2}^2 := \int_{\Omega} |e|^2 d\Omega$$

En la norma del máximo,  $\tilde{u}_j$  representa la solución obtenida por alguno de los dos métodos numéricos y  $u_j$  la solución exacta del problema. Para el caso del esquema mimético,  $j = i + 1/2$ . Para la norma  $L_2$ , se usa la forma continua en lugar de su versión discreta,  $\|e\|_{L_2}^2 = h \sum_j |\tilde{u}_j - u_j|^2$ .

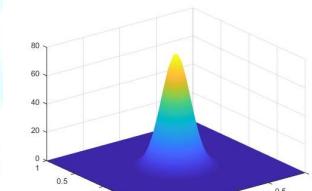


Errores numéricos: en norma del máximo,  $\|\cdot\|_\infty$ , (izquierda) y norma  $L_2$  (derecha).

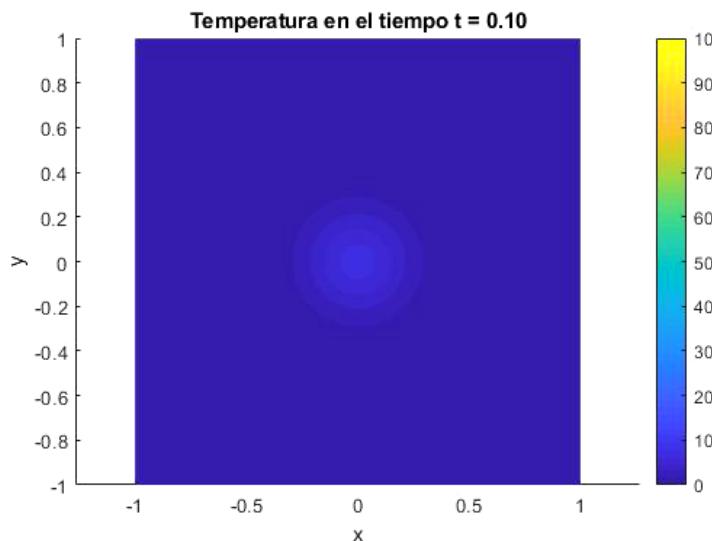
## Experimentación numérica 2D:

El problema de contorno a resolver viene dado por la ecuación que modela la transferencia de calor por reacción-convección-difusión en su forma conservativa:

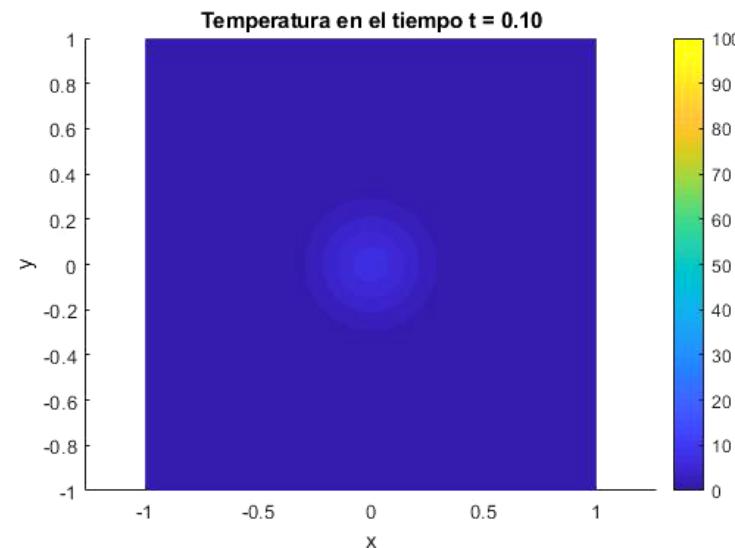
$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} u(x, y, t) &= \nabla \cdot (k(x, y) \nabla u(x, y, t)) + f(x, y, t) \quad \text{en } \Omega = [a, b] \times [c, d] \\ u(x, y, t) &= g_1(x, y) \quad \text{sobre } \partial\Omega_D \\ \alpha u + \langle \beta \nabla u, \mathbf{n} \rangle &= g_2(x, y) \quad \text{sobre } \partial\Omega_N \\ u(x, y, 0) &= g(x, y) \quad \text{condición inicial}\end{aligned}$$



Condición de frontera Neumann  $\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0$



Condición de frontera Dirichlet  $u(x, y, t) = c(x, t)$



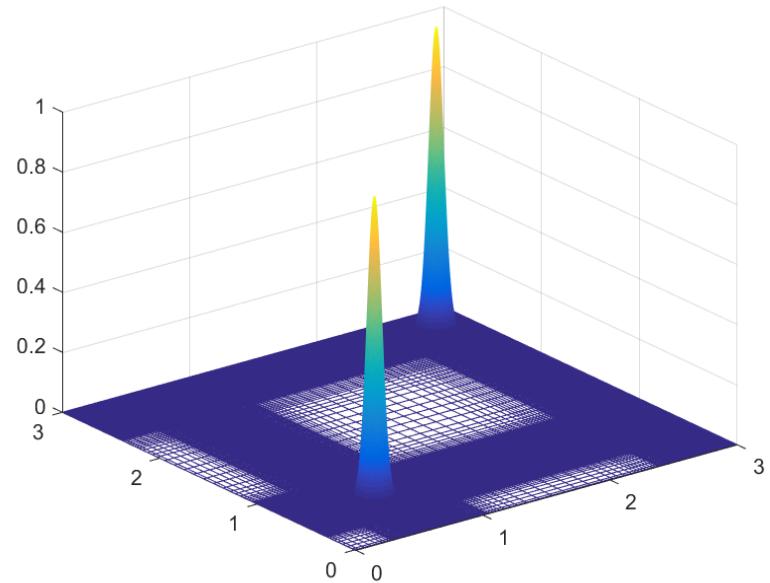
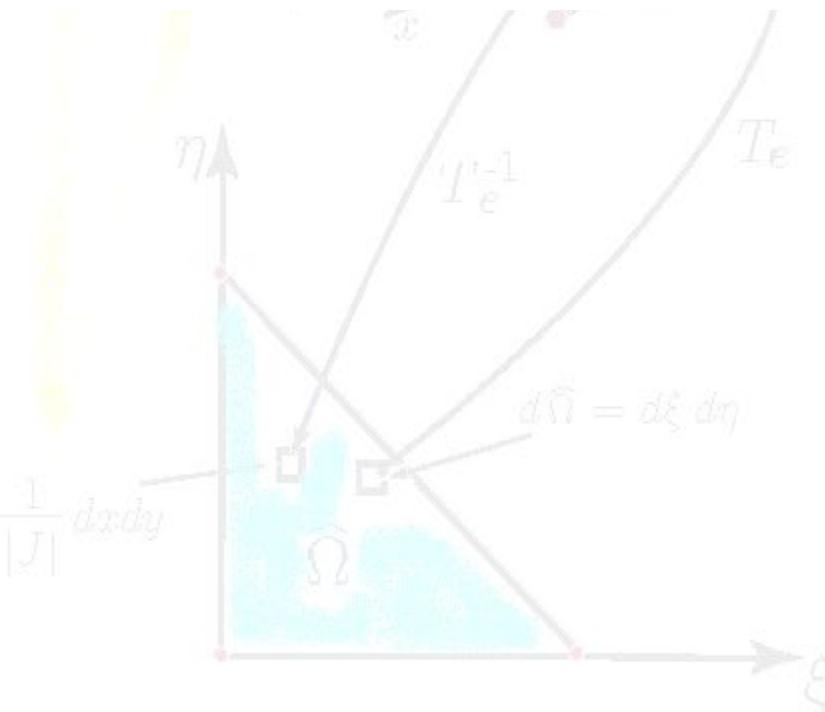
## Segunda Parte: Introducción a las DFM

Experimentación numérica 2D estacionario:

$$\nabla \cdot (\nu(x, y) \nabla u) = f(x, y) \quad \text{en} \quad \Omega = \Omega_x \times \Omega_y \equiv [a, b] \times [c, d]$$

$$u(x, y) = c_1 \quad \text{sobre} \quad \partial\Omega_D$$

$$\alpha u + \langle \beta \nabla u, \mathbf{n} \rangle = c_2 \quad \text{sobre} \quad \partial\Omega_N$$

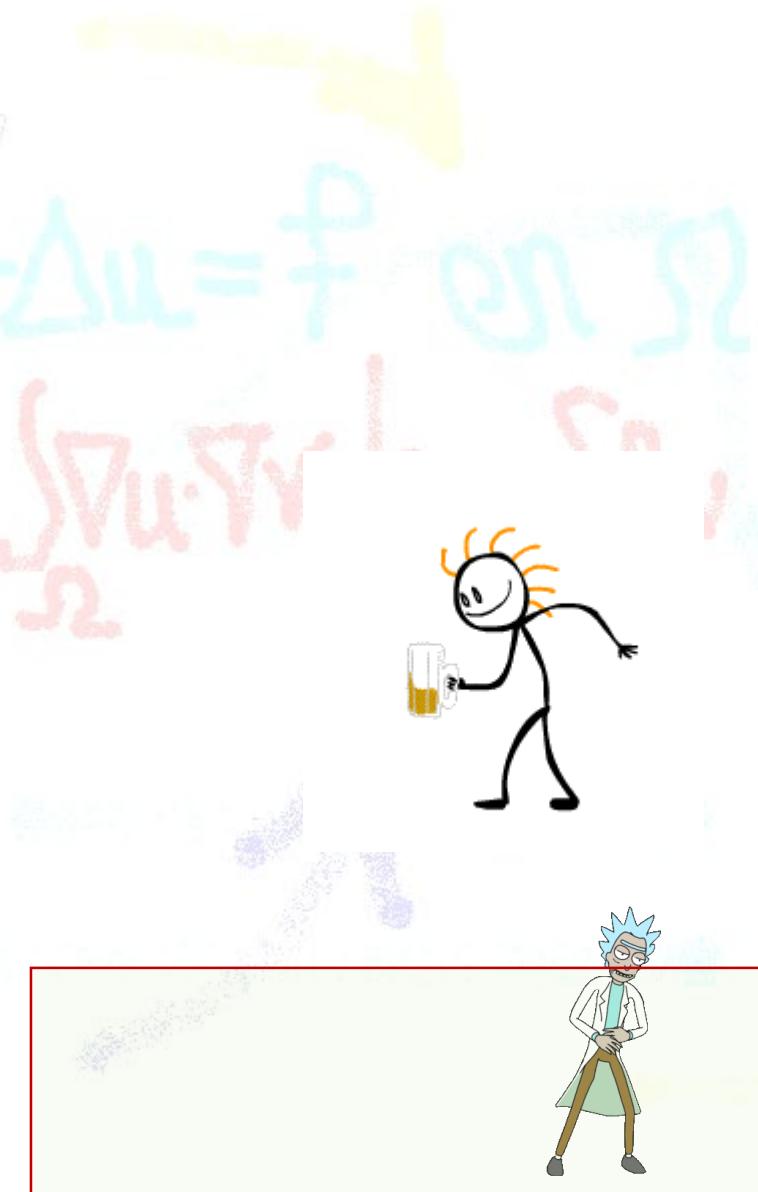


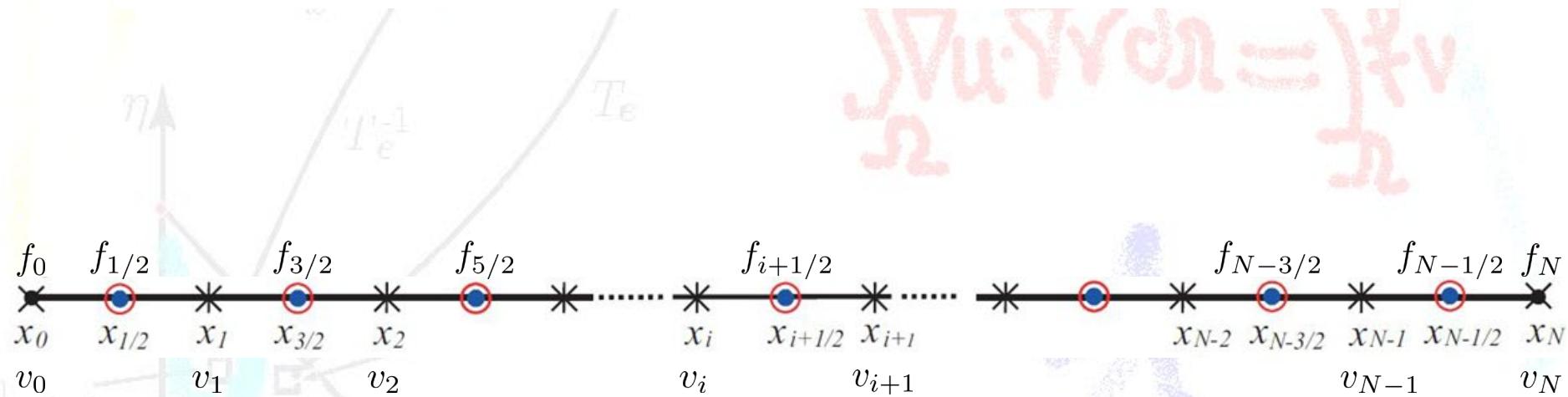
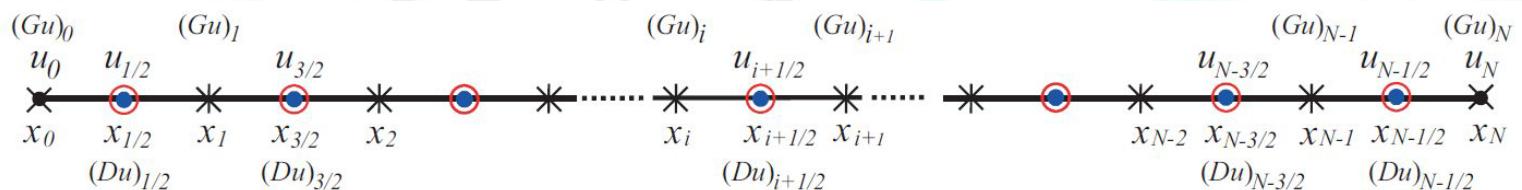
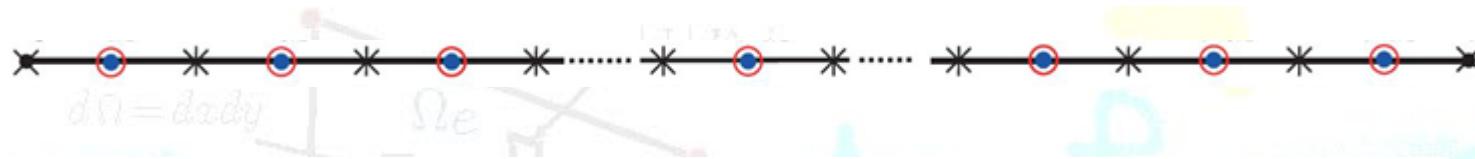
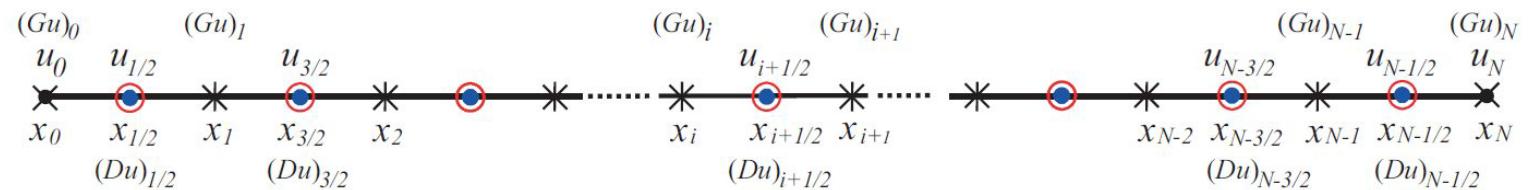
## Discusión final:

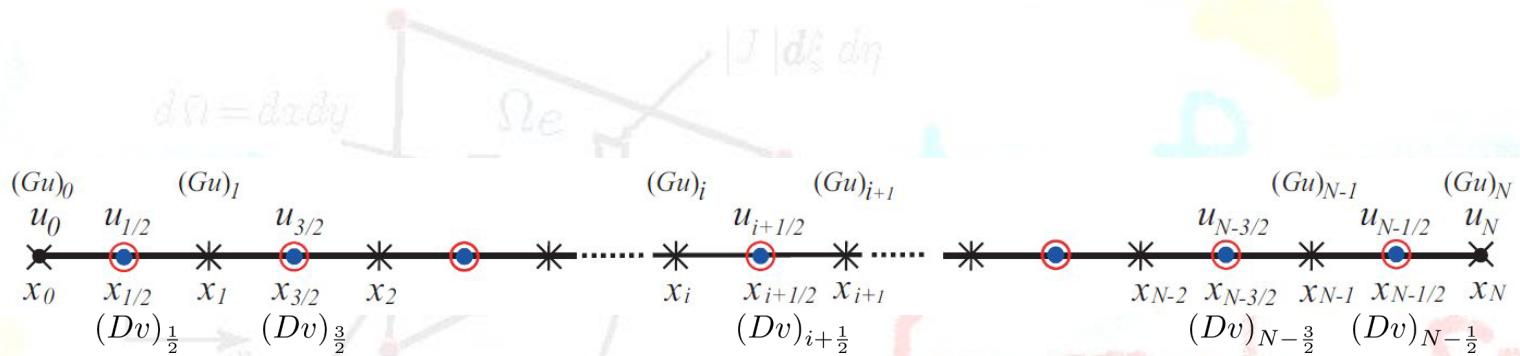
Por hacer: Presentar un tutorial con ejemplos de solución de EDP usando la librería **MOLE**.



Gracias...







`pdflatex.exe -synctex=1 -  
 interaction=nonstopmode %.tex -shell-escape  
 --enable-write18`

## Problema 2: Esquemas de DFM para la ecuación de convección-difusión

¿Qué se quiere?

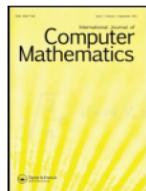


En diferencias finitas se han definido esquemas para la ecuación de convección difusión:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq T$$

En general, estos esquemas buscan mejorar la precisión, la sensibilidad a la estabilidad, orden de convergencia.

**Se quiere llevar estos esquemas a DFM y probar su efectividad, estabilidad y convergencia. Principalmente para condiciones de frontera Robin.**



International Journal of Computer Mathematics

Taylor & Francis  
Taylor & Francis Group

ISSN: 0020-7160 (Print) 1029-0265 (Online) Journal homepage: [www.tandfonline.com/journals/gcom20](http://www.tandfonline.com/journals/gcom20)

A new unconditionally stable explicit scheme for the convection-diffusion equation with Robin boundary conditions

Zhihua Xie, Jianguo Lin & Juntao Zhou

Contents lists available at ScienceDirect

Computers and Fluids

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/compfluid](http://www.elsevier.com/locate/compfluid)



New RK type time-integration methods for stiff convection-diffusion-reaction systems

Vivek S. Yadav, Ankit Singh, Vikas Maurya, Manoj K. Rajpoot\*

Mathematics and Computing Laboratory, Department of Mathematical Sciences, Rajiv Gandhi Institute of Petroleum Technology, Jais, Amethi 229304, UP, India

WILEY  
InterScience  
DISCOVER SOMETHING GREAT

### On the Stability of Alternating-Direction Explicit Methods for Advection-Diffusion Equations

L. J. Campbell, B. Yin

School of Mathematics and Statistics, Carleton University, Ottawa, Ontario, Canada

Received 8 August 2006; accepted 23 December 2006

Published online 2 March 2007 in Wiley InterScience ([www.interscience.wiley.com](http://www.interscience.wiley.com)).

DOI 10.1002/num.20233

Estudio de otros esquemas en DF para llevarlos a esquemas DFM. Por ejemplo: CN, LW, etc.  
Trabajo propuesto a Jorge Ospino

## Problema 3: Esquemas de DFM para la ecuación de difusión-reacción

¿Qué se quiere?



En diferencias finitas se han definido esquemas para la ecuación de convección difusión:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + f(x, \phi), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq T$$

En general, estos esquemas buscan mejorar la precisión, la sensibilidad a la estabilidad, orden de convergencia.

**Se quiere llevar estos esquemas a DFM y probar su efectividad, estabilidad y convergencia. Principalmente para condiciones de frontera Robin.**

Arabian Journal for Science and Engineering (2023) 48:4045–4065

<https://doi.org/10.1007/s13369-022-07367-3>

RESEARCH ARTICLE-MECHANICAL ENGINEERING



### Modeling and Solution of Reaction-Diffusion Equations by Using the Quadrature and Singular Convolution Methods

O. Rabb<sup>1</sup> · Mohamed Salah<sup>1</sup> · M. S. Matbuly<sup>1</sup> · H. Ersoy<sup>2</sup> · O. Civalek<sup>3,4</sup>

Estudio de otros esquemas en DF para llevarlos a esquemas DFM. Por ejemplo: CN, LW, etc.  
Trabajo propuesto a Jorge Villamizar para la tesis doctoral de Andrés.

## Problema 4: Análisis de los operadores **G** y **D** de cuarto orden

¿Qué se quiere?



Los operadores Gradiente (**G**) y Divergencia (**D**) de cuarto orden quedan dependiendo de un conjunto de 6 parámetros.

Se trabajó un primer análisis dado en [1].

**Se quiere realizar un análisis (precisión y estabilidad) de los operadores **G** y **D****

1. Por separado analizar la efectividad de cada operador.
2. En la ecuación de convección-difusión: precisión y estabilidad.
3. En la ecuación de reacción-difusión: precisión y estabilidad.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq T$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + f(x, \phi), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq T$$

[Home](#) > [GEM - International Journal on Geomathematics](#) > Article

### High order mimetic differences applied to the convection–diffusion equation: a matrix stability analysis

Original Paper | Published: 13 September 2023

Volume 14, article number 26, (2023) [Cite this article](#)

## Problema 1: DFM: documento que agrupe los avances en el tema.

Definir un documento propio de DFM



### Contenido:

- **Introducción y leyes de conservación:**  
Resultados teóricos, motivación, ...
- **DFM en 1D:**  
Discretización, aproximación de operadores, ...
- **DFM en 2D:**  
Discretización, aproximación de operadores, ...
- **Orden superior en los operadores**  
Operadores D , G, rot
- **Implementaciones, librerías**  
Mole
- **Aplicaciones**
- **Resultados de la literatura**

### Material que se tiene:

Toda la literatura de los métodos DFM que se tiene en los 20 años de existencia.

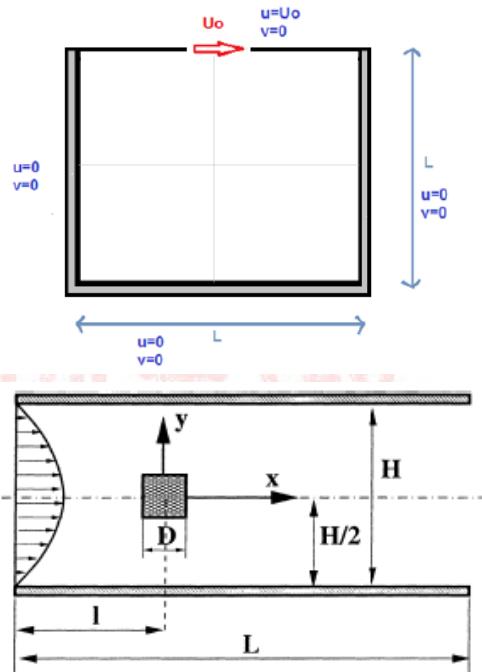


## Problema 5: Aplicaciones de ingeniería usando DFM

### Ecuaciones de Navier-Stokes

Implementar usando DFM y la librería MOLE

- Realizar el estudio de un fluido impulsado dentro de una cavidad cuadrada a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes en dos dimensiones para flujo incompresible.
- Realizar el estudio de un flujo parabólico confinado entre dos paredes, entre las cuales se encuentra un obstáculo bidimensional de sección cuadrada o circular
- Problemas propuestos por el Prof. José Castillo



1) Reentrant corners  
Set  $\Omega = (-1, 1)^2 \setminus ([0, 1] \times [-1, 0])$

The function (in polar coordinates)  $u(r, \theta) = r^{2/3} \sin\left(\frac{2\theta}{3}\right)$  is harmonic.

Note, however, that  $u \notin H^2(\Omega)$ .

You can try to solve  $\begin{cases} -\Delta u = 0 & \text{in } \Omega \\ u = g & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$ , with  $g$  such that  $u \in H^2(\Omega)$  is the solution.

This example generalizes to reentrant corners: solutions are not smooth near them.

(In particular, one doesn't need a right angle, but I guess this helps simplify the analysis of FEM methods).

2) Discontinuous diffusivity

Take  $\Omega \subset (-1, 1)^2$ , and the matrix-valued function  $A = \begin{cases} a_1 I & \text{in the first and third quadrants} \\ a_2 I & \text{in the second and fourth quadrants} \end{cases}$

[See Section 5.3 in the paper attached.]

→ Solve  $\begin{cases} -\operatorname{div}(A \nabla u) = 0 & \text{in } \Omega \\ \text{BC's} & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$

## Diferencias Miméticas: Gradiente y Divergencia 2D

- Operador gradiente:

$$\mathbf{G}_{2d}^{m \times n} = [\mathbf{I}_n^t \otimes \mathbf{G}_{1d}^m \quad \mathbf{G}_{1d}^n \otimes \mathbf{I}_m^t]^t$$

- Operador divergencia:

$$\mathbf{D}_{2d}^{m \times n} = [\mathbf{I}_n \otimes \mathbf{D}_{1d}^m \quad \mathbf{D}_{1d}^n \otimes \mathbf{I}_m]$$

La matriz  $\mathbf{I}_i$  tiene dimensión  $(i+1) \times i$ , sus primera y última fila son nulas.  $\otimes$  el producto tensorial de Kronecker.

Discretización del dominio físico 2D:

Malla mimética bidimensional

