CIMAT

Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

DISCRETIZACIÓN DE LA ECUACIÓN DE CONVECCIÓN – DIFUSIÓN CON CÁLCULO EXTERIOR DISCRETO

T E S I S

Que para obtener el grado de

Maestro en Ciencias

con Especialidad en

Computación y Matemáticas Industriales

Presenta

Marco Antonio Noguez Morales

Directores de Tesis:

Dr. Salvador Botello Rionda

Dr. Rafael Herrera Guzmán

Autorización de la versión final

Guanajuato, Gto., 30 de agosto de 2019

Resumen

El Cálculo Exterior Discreto es un método numérico para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales, basado en la discretización del Cálculo Diferencial Exterior. La discretización de algunos términos presentes en algunos modelos matemáticos es un tema de investigación; tal es el caso del término convectivo de la Ecuación de Transporte, al considerar flujo compresible. En este trabajo se revisaron los conceptos necesarios para la formulación axiomática de modelos matemáticos, a partir del balance de propiedades extensivas e intensivas, el procedimiento para la formulación del Modelo Matemático del Transporte de Soluto en Fluidos Libres y los conceptos básicos de la teoría del Cálculo Diferencial Exterior y su discretización. También se propuso una discretización del término convectivo de esta ecuación, considerando flujo compresible e incompresible. Las pruebas numéricas se realizaron considerando el problema homogéneo, isótropo y estacionario en dos dimensiones. Los resultados muestran un comportamiento similar al de Elemento Finito con funciones de interpolación lineal y convergencia al mismo resultado al considerar mallas finas.

Abstract

Discrete Exterior Calculus is a numerical method for solving partial differential equations, based on the theory of Differential Exterior Calculus. The discretization of some terms that are present in many mathematical models is an ongoing area of research, such as the convective term present in the Transport Equation with incompressible flow. This thesis reviews the theory and concepts necessary to formulate mathematical models using an axiomatic approach by means of the balance equations of extensive and intensive properties, the development of the Solute Transport models as well as the basic concepts of Exterior Differential Calculus and it's discretization. A discretization of the convective term is developed for compressible and incompressible flow. Numerical tests are carried out considering the homogeneous, isotropic and stationary problem, which show a behaviour similar to that of the Finite Element Method with linear interpolation functions as well as numerical convergence for finer meshes.

What distinguishes a mathematical model from, say, a poem, a song, a portrait or any other kind of "model", is that the mathematical model is an image or picture of reality painted with logical symbols instead of with words, sounds or watercolors.

John L. Casti

Agradecimientos

A mis padres:
Por su amor, paciencia, cariño y apoyo incondicionales para concluir esta etapa de mi vida.

A mis hermanos:
Por estar conmigo en todo momento, apoyándome en todos los aspectos de mi vida, y por todos los momentos felices que compartimos.

A mis asesores:
Por haberme brindado la oportunidad de ser su tesista y alumno, así como por su paciencia, dedicación, amistad y consejos.

A mis sinodales:
Por tomarse el tiempo de leer esta tesis y por sus útiles comentarios y sugerencias.

A mis amigos:
Por los buenos momentos, por su apoyo y compañerismo.

A CONACyT:
Por su apoyo económico para que pudiera llevar a cabo mis estudios de maestría.

Índice general

Índice de figuras

Capítulo 1

Introducción

La Ecuación de Transporte, también conocida como la Ecuación de Convección - Difusión, es una ecuación diferencial que describe el transporte de un campo escalar (como temperatura o masa), debido a procesos de transporte conocidos como *advección*, la cual ocurre en presencia de un campo de velocidad, y *difusión*, debida al Movimiento Browniano, principalmente. Esta ecuación surge en diversos problemas de ingeniería, como en contaminación de acuíferos y el medio ambiente, así como en problemas de transporte de calor.

En la actualidad existe una gran cantidad de métodos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales. Los métodos numéricos más comunes que están basados en la discretización del dominio mediante un mallado son Diferencias Finitas, Elemento Finito y Volumen Finito. La aplicación de estos métodos involucra, usualmente, el manejo de campos escalares y vectoriales prescritos y discretizados sobre la malla. Cuando el problema se encuentra definido sobre un espacio curvo, el manejo de estas cantidades y los operadores diferenciales involucrados puede complicarse y, además, en algunos casos, es necesario realizar un pre-procesado de la malla (*e.g.* suavizado, refinamiento, parametrización, etc). Una alternativa reciente es el uso del Cálculo Diferencial Exterior, el cual, al estar basado en Geometría, provee un lenguaje moderno para expresar ecuaciones diferenciales y campos vectoriales y escalares sobre espacios curvos de manera consistente.

El Cálculo Exterior Discreto es un método numérico para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales, basado en la discretización de la teoría del Cálculo Diferencial Exterior. Fue originalmente propuesto por A. Hirani en su tesis doctoral en CALTECH (A. N. Hirani 2003) y, desde entonces, ha sido empleado exitosamente para la resolución de las ecuaciones de Darcy (A. Hirani, Nakshatrala y Chaudhry 2008), Naiver-Stokes y Poisson (Mohamed, A. Hirani y Samtaney 2016), así como la Ecuación de Transporte para flujo incompresible en problemas de advección dominante (Griebel, Rieger y Schier 2017). En este último trabajo, los autores demostraron que, en algunos problemas simples, el sistema de ecuaciones obtenido con DEC es equivalente a otros

esquemas numéricos como Diferencias Finitas y Volumen Finito.

Debido a que DEC es un método numérico relativamente nuevo, la discretización de algunos términos que surgen en diversos modelos matemáticos sigue siendo un área de investigación. Tal es el caso del término convectivo en la Ecuación de Convección - Difusión, cuando el flujo es compresible. En esta tesis, se propone una discretización local de este término, tanto para flujo compresible como para incompresible, considerando el campo de velocidad prescrito y discretizado sobre los nodos.

Los objetivos de esta tesis son: (1) Describir el proceso para la formulación axiomática de modelos matemáticos que sean capaces de predecir el comportamiento de un sistema continuo macroscópico. (2) Formular la Ecuación de Convección - Difusión a partir del desarrollo del Modelo de Transporte de Soluto en Fluidos Libres. (3) Revisar los conceptos básicos de la teoría del Cálculo Diferencial Exterior, así como el procedimiento para la discretización de los operadores *Derivada Exterior* y *Estrella de Hodge* mediante sus homólogos matriciales, para el desarrollo del Cálculo Diferencial Exterior (o DEC, por sus siglas en inglés). (4) Describir la propuesta para la discretización del término convectivo de la Ecuación de Transporte considerando valores discretos del campo de velocidad en los nodos, tanto para campos de velocidad constante como variables en el espacio. (5) Resolver la Ecuación de Convección - Difusión $2-$dimensional en un problema homogéneo, isótropo y estacionario, para flujo compresible e incompresible y, finalmente, (6) verificar numéricamente el desempeño de la propuesta a partir de una comparación con Elemento Finito con Funciones de interpolación lineales (FEML), empleando mallas triangulares que varían de gruesas (*i.e.* con pocos elementos) a finas (*i.e.* con una gran cantidad de elementos).

El resto de la tesis se organiza como sigue: En el Capítulo 2 se revisan los fundamentos teóricos del balance de propiedades extensivas e intensivas para la formulación de modelos matemáticos de sistemas continuos macroscópicos, así como la descripción de la Ecuación de Convección - Difusión a partir del desarrollo del Modelo de Transporte de Soluto en Fluidos Libres, introducido en (I. Herrera y Pinder 2012). Se revisan, además, algunos conceptos de la teoría del Cálculo Diferencial Exterior, necesarios para la subsecuente discretización, misma que se describe en el Capitulo 3. Finalmente, en el Capítulo 4 se muestran los resultados obtenidos de las pruebas numéricas realizadas y en el Capítulo 5 se presentan las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1 Balance de Propiedades Intensivas y Extensivas

La formulación de los modelos matemáticos que describen la evolución espacial y temporal de las propiedades intensivas involucradas en sistemas continuos macroscópicos, están basados, usualmente, en balances de las propiedades extensivas asociadas a estas, sobre un cuerpo $\mathcal{B}(t) \in \mathbb{R}^n$ (para $n = 1, 2$ ó 3), el cual se define como un conjunto de partículas que, en cualquier momento dado, ocupa un lugar en el espacio físico $B(t)$ (I. Herrera y Pinder 2012). En ésta sección se describen las propiedades extensivas e intensivas, así como las ecuaciones de balance para la formulación de modelos matemáticos, basados en la Mecánica del Medio Continuo.

2.1.1 Propiedades Intensivas

Las *Propiedades Intensivas* son funciones que pueden ser escalares o vectoriales, las cuales están definidas para cada *partícula* X de $\mathcal{B}(t)$, en todo tiempo $t \in (-\infty, \infty)$. Estas propiedades se denotan como $\phi(\underline{X}, t)$ para su representación *Lagrangiana*, donde $\underline{X} \equiv (X_1, X_2, X_3)$ son llamadas *coordenadas materiales*, y describen la posición de una partícula X de $\mathcal{B}(t)$ en un tiempo de referencia. También se pueden denotar como $\psi(\underline{x}, t)$ para su representación *Euleriana*, donde $\underline{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)$ son llamadas *coordenadas espaciales*, y describen la posición de una partícula X en el espacio físico que ocupa, en un tiempo de referencia. Las coordenadas materiales y espaciales se relacionan mediante la siguiente expresión:

$$\underline{x} = \underline{p}(\underline{X}, t), \tag{2.1.1}$$

y

$$\underline{X} = \underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), \tag{2.1.2}$$

donde la función $\underline{p}(\underline{X}, t)$ es llamada *función de posición*, mediante la cual se identifica cada partícula X de $\mathcal{B}(t)$ en cualquier tiempo.

La función $\phi(\underline{X}, t)$ describe el valor de una propiedad intensiva en la posición de una partícula X de $\mathcal{B}(t)$ en un tiempo t. Por otro lado, la función $\psi(\underline{x}, t)$ describe el valor de la propiedad intensiva en el punto $\underline{x}$ del espacio físico, en un tiempo t. Ambas representaciones de una misma propiedad intensiva deben satisfacer la siguiente condición:

$$\phi(\underline{X}, t) \equiv \psi(\underline{p}(\underline{X}, t), t) = \psi(\underline{x}, t), \tag{2.1.3}$$

y, por la ecuación (2.1.2):

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \phi(\underline{p}^{-1}(\underline{x}, t), t). \tag{2.1.4}$$

2.1.2 Propiedades Extensivas

Las propiedades extensivas, denotadas como $E(\mathcal{B}, t)$, son funciones que se definen sobre todo cuerpo $\mathcal{B}$ de un sistema continuo, por lo que se pueden expresar mediante una integral sobre $B(t)$, es decir, sobre el espacio físico, como:

$$E(\mathcal{B}, t) \equiv \int_{B(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x}, \tag{2.1.5}$$

donde $\psi(\underline{x}, t)$ es la propiedad intensiva en representación Euleriana, definida por unidad de volumen, asociada a $E(\mathcal{B}, t)$ mediante:

$$\psi(\underline{x}, t) \equiv \lim_{V \to 0} \frac{E(\mathcal{B}, t)}{V} = \frac{\int_{B(t)} \psi(\underline{\xi}, t) d\underline{\xi}}{V}. \tag{2.1.6}$$

2.1.3 Ecuaciones de Balance Global y Local

Como se ha mencionado anteriormente, los modelos matemáticos son formulados mediante ecuaciones de balance que actúan sobre familias de propiedades extensivas. La variación de la cantidad de propiedad extensiva en $\mathcal{B}(t)$ se debe al flujo de entrada menos el flujo de salida de la propiedad extensiva. Las causas de dichas variaciones se pueden dividir en dos grupos principalmente (I. Herrera, Carrillo y Yates 2008)

- Por producción en el interior del cuerpo, y
- Por transporte a través de la frontera.

Por lo tanto, el balance de una propiedad extensiva se puede escribir como:

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x}, t) d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x}, t) \cdot \underline{n}(\underline{x}, t) d\underline{x}, \tag{2.1.7}$$

donde $g(\underline{x}, t)$ representa la cantidad de propiedad extensiva que entra al cuerpo, por unidad de volumen, $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ es el vector de flujo de la propiedad extensiva, $\underline{n}(\underline{x}, t)$ es el vector normal hacia el exterior en la frontera del cuerpo, denotada como $\partial B(t)$.

Es posible que las propiedades extensivas presenten discontinuidades de tipo "*salto*" a través de superficies $\Sigma(t)$ denominadas "*superficies de choque*" (o *shock*, en inglés). La presencia de estas discontinuidades en $\Sigma(t)$ puede sugerir la existencia de fuentes concentradas en $\Sigma(t)$. Por tal motivo, una forma más general de la ecuación de balance es (I. Herrera y Pinder 2012):

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} g(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{\tau}(\underline{x},t)\cdot \underline{n}(\underline{x},t)d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} g_{\Sigma}(\underline{x},t)d\underline{x}, \tag{2.1.8}$$

donde $g_{\Sigma}(\underline{x},t)$ es la fuente externa en $\Sigma(t)$. La ecuación (2.1.8) es llamada *Ecuación General de Balance Global*, la cual se puede reescribir, empleando el *Teorema de la Divergencia Generalizado* (ver Apéndice A), como:

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{B(t)} \{g(\underline{x},t) + \nabla\cdot\underline{\tau}(\underline{x},t)\}d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} \{[\![\underline{\tau}]\!]\cdot \underline{n}(\underline{x},t) + g_{\Sigma}(\underline{x},t)\}d\underline{x}. \tag{2.1.9}$$

Ahora bien, para obtener la *Ecuación de Balance Local*, se emplea el siguiente resultado:

Teorema 2.1.1. *Sea $B(t)\subset R^3$ un dominio que contiene a un cuerpo. Sea $\psi(\underline{x},t)$ una propiedad intensiva continua a trozos, tipo C^1, excepto en $\Sigma(t)$. Sean $\underline{v}(\underline{x},t)$ y $\underline{v}_{\Sigma}(\underline{x},t)$ la velocidad de partícula y la velocidad de la superficie $\Sigma(t)$, respectivamente, entonces:*

$$\frac{d}{dt}\int_{B(t)} \psi d\underline{x} \equiv \int_{B(t)} \{\frac{\partial\psi}{\partial t} + \nabla\cdot(\underline{v}\psi)\}d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} [\![(\underline{v}-\underline{v}_{\Sigma})\psi]\!]\cdot \underline{n}d\underline{x}. \tag{2.1.10}$$

Demostración. (Ver apéndice C de I. Herrera y Pinder 2012, págs. 221 - 223) □

Considerando las ecuaciones (2.1.10) y (2.1.5), se tiene la siguiente definición:

$$\frac{dE}{dt} \equiv \int_{B(t)} \{\frac{\partial\psi}{\partial t} + \nabla\cdot(\underline{v}\psi)\}d\underline{x} + \int_{\Sigma(t)} [\![(\underline{v}-\underline{v}_{\Sigma})\psi]\!]\cdot \underline{n}d\underline{x}. \tag{2.1.11}$$

Empleando la ecuación (2.1.11) y (2.1.9), se tiene que la ecuación de balance global (2.1.8) es cierta si, y solo si, para cada $B(t)$ se cumple que:

$$\begin{aligned} &\int_{B(t)} \{\frac{\partial\psi}{\partial t} + \nabla\cdot(\underline{v}\psi) - \nabla\cdot\underline{\tau}(\underline{x},t) - g(\underline{x},t)\}d\underline{x} + \\ &\int_{\Sigma(t)} \{[\![(\underline{v}-\underline{v}_{\Sigma})\psi - \underline{\tau}]\!]\cdot \underline{n}(\underline{x},t) - g_{\Sigma}(\underline{x},t)\}d\underline{x} = 0. \end{aligned} \tag{2.1.12}$$

Por lo que se llega al siguiente teorema:

Teorema 2.1.2. *Sea $B(t)$ un cuerpo. La ecuación de balance global (2.1.8) se satisface para cada sub-cuerpo de $B(t)$ si, y solo si, se satisfacen las siguientes condiciones:*

- *La ecuación diferencial:*

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{v}\psi) = \nabla \cdot \underline{\tau} + g; \quad \forall \ \underline{x} \in B(t) - \Sigma(t). \tag{2.1.13}$$

- *La condición de salto:*

$$[\![(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma)\psi - \underline{\tau}]\!] \cdot \underline{n} = g_\Sigma; \quad \forall \ \underline{x} \in \Sigma(t). \tag{2.1.14}$$

Demostración. Las ecuaciones (2.1.13) y (2.1.14) se obtienen de la ecuación (2.1.12), considerando que esta última se debe cumplir para todo sub-cuerpo de $B(t)$. □

La ecuación (2.1.13) se conoce como *Ecuación Diferencial de Balance Local*, mientras que la ecuación (2.1.14) se conoce como *Condición de Salto*.

El procedimiento para la formulación de modelos matemáticos de sistemas continuos de una fase, consiste en la identificación de las propiedades extensivas involucradas en el sistema y la aplicación de las ecuaciones de balance a cada una de ellas. Posteriormente, se incorporan ecuaciones constitutivas y condiciones de frontera adecuadas para la obtención de *modelos completos*, capaces de describir el comportamiento del sistema de interés.

2.2 La Ecuación de Convección - Difusión

La *Ecuación de Convección - Difusión*, también llamada *Ecuación de Transporte*, es una ecuación diferencial parcial que modela el transporte de un campo escalar (*e.g.* temperatura o concentración), debido a procesos de transporte conocidos como *convección* (también llamada *advección*) y *difusión*. Esta ecuación surge en diversos problemas de ingeniería, como en contaminación de acuíferos y del medio ambiente para transporte de masa, así como en sistemas de enfriamiento en plantas de energía nuclear y fósil, para transporte de calor.

Existen diversas maneras de formular esta ecuación, dependiendo del tipo de problema que se requiera resolver (*e.g.* transporte de masa o de calor). En esta tesis, la formulación de la ecuación se describe mediante el desarrollo del *Modelo de Transporte de Soluto en Fluidos Libres*, ya que su interpretación física resulta más intuitiva.

2.2.1 Transporte de Soluto en Fluidos Libres

El desarrollo de modelos matemáticos de sistemas macroscópicos empieza por el establecimiento de postulados válidos. Para este modelo, se establecen los siguientes:

- El soluto se encuentra completamente disuelto en el fluido. En otras palabras, el soluto y el fluido en el que se encuentra disuelto constituyen una sola fase.

- La velocidad de partícula del fluido ($\underline{v}$) es un dato.

Por lo tanto, la familia de propiedades extensivas involucradas se reduce a una sola: la *masa de soluto*, $M_s(t)$:

$$M_s(t) \equiv \int_{B(t)} \psi(\underline{x}, t) d\underline{x}, \tag{2.2.1}$$

donde $\psi(\underline{x}, t)$ es la propiedad intensiva asociada a $M_s(t)$. Considerando la ecuación (2.1.6), se tiene que:

$$\psi(\underline{x}, t) = \lim_{V \to 0} \frac{M_s(t)}{V} = c(\underline{x}, t), \tag{2.2.2}$$

donde $c(\underline{x}, t)$ es la concentración de soluto. Sustituyendo la ecuación (2.2.2) en (2.1.13), se tiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\underline{v}) = \nabla \cdot \underline{\tau} + g, \tag{2.2.3}$$

donde el término fuente g puede ser distinto de cero debido a varias razones, por ejemplo, si el soluto está entrando al sistema o si se está produciendo por reacciones químicas, mientras el fenómeno de transporte ocurre; o bien, si el soluto es radioactivo, en cuyo caso $g < 0$, debido al decaimiento. Cuando $g \neq 0$, se dice que el proceso de transporte es *no conservativo*; y cuando $g = 0$, el proceso de transporte es *conservativo*. Por otro lado, $\underline{\tau}$ es llamado *flujo difusivo*, producido en este caso y principalmente por difusión molecular debida al *movimiento Browniano*.

Si existen discontinuidades en el sistema, se debe incorporar a la ecuación diferencial (2.2.3) la condición de salto:

$$[\![c(\underline{v} - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}]\!] \cdot \underline{n} = 0, \tag{2.2.4}$$

sin embargo, para el siguiente desarrollo, se considera que el sistema no presenta ninguna discontinuidad. Finalmente, para obtener un modelo completo, es necesario incorporar ecuaciones constitutivas e información adicional acerca de $\underline{v}$, g y $\underline{\tau}$.

2.2.2 Procesos de Transporte

Los procesos de transporte son la *advección*, *difusión* y de *generación de masa* (procesos no conservativos). A continuación se describe cada uno de ellos.

Advección

La advección ocurre siempre que un fluido se encuentra en movimiento, es decir, cuando la velocidad de partícula $\underline{v}$ es distinta de cero. Las sustancias disueltas en el fluido son transportadas por las partículas del fluido. La intensidad de este proceso depende directamente de la magnitud y dirección de $\underline{v}$, las cuales se conocen de antemano.

Procesos No Conservativos

La tasa con la que se genera masa está determinada por la fuente externa $g(\underline{x}, t)$. Como se mencionó antes, el proceso de transporte es conservativo si $g(\underline{x}, t) = 0$. Cuando $g(\underline{x}, t) > 0$, decimos que existe una fuente de masa de soluto, mientras que si $g(\underline{x}, t) < 0$, decimos que existe un sumidero de masa. Algunos de los procesos que permiten que $g(\underline{x}, t)$ sea distinta de cero se denominan *procesos irreversibles de primer orden*. Algunos ejemplos son las reacciones químicas, decaimiento radiactivo y biodegradación.

Cuando existen procesos irreversibles de primer orden, el término fuente de la ecuación (2.2.3) se debe sustituir por:

$$g(\underline{x}, t) = -\lambda c(\underline{x}, t), \tag{2.2.5}$$

donde λ es una constante positiva, característica de la sustancia disuelta en el fluido.

Difusión

Las moléculas, iones o átomos que constituyen un fluido se encuentran en constante agitación, aún cuando a nivel macroscópico el fluido pareciera estar en reposo. Esta agitación produce un movimiento aleatorio en las partículas de soluto que se encuentran disueltas en el fluido, el cual es llamado *Movimiento Browniano*. Dicho movimiento produce un desbalance entre la masa de soluto que entra a un cuerpo de fluido y la masa que sale de él, generando un flujo de masa en la frontera del cuerpo, conocido como *Difusión* (I. Herrera y Pinder 2012).

Los procesos de difusión son modelados mediante una ecuación constitutiva, conocida como *Primera Ley de Fick*, la cual establece que el flujo de masa de soluto es función del gradiente de la concentración; es decir:

$$\underline{\tau} = \underline{\underline{D}} \cdot \nabla c, \tag{2.2.6}$$

donde $\underline{\underline{D}}$ es el tensor de difusión molecular, el cual es simétrico y no negativo.

2.2.3 Ecuación Diferencial de Transporte Difusivo

La ecuación diferencial general de transporte de soluto en fluidos libres, se obtiene al sustituir la ecuación (2.2.6) en la ecuación (2.2.3):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\underline{v}) = \nabla \cdot (\underline{\underline{D}} \nabla c) + g. \tag{2.2.7}$$

Algunos casos particulares de la ecuación son:

- Cuando el proceso de difusión es isótropo, $\underline{\underline{D}} = D\underline{\underline{I}}$, y, por lo tanto, la ecuación (2.2.7) se reescribe como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\underline{v}) = \nabla \cdot (D \nabla c) + g. \tag{2.2.8}$$

- Si además, el fluido es homogéneo, el coeficiente de difusión será independiente de la posición ($\nabla D = 0$), en consecuencia, la ecuación anterior se convierte en:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\underline{v}) = D\nabla^2 c + g. \tag{2.2.9}$$

- Cuando el fluido es incompresible ($\nabla \cdot \underline{v} = 0$), la ecuación (2.2.9) se reescribe como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla c = D\nabla^2 c + g. \tag{2.2.10}$$

- Si durante el proceso de transporte existen procesos irreversibles de primer orden, la ecuación (2.2.9) se convierte en:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\underline{v}) + \lambda c = D\nabla^2 c, \tag{2.2.11}$$

  esta última ecuación se conoce como *Ecuación de Convección - Reacción - Difusión.*

- Finalmente, si el proceso es estacionario, se sustituye $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$ en las ecuaciones anteriores.

2.3 Cálculo Diferencial Exterior

La teoría del Cálculo Diferencial Exterior provee un lenguaje moderno para expresar las ecuaciones que surgen en diversas disciplinas, como la *Geometría Diferencial* y la Física, de forma compacta y, en la mayoría de los casos, libre de coordenadas.

El Cálculo Diferencial Exterior permite desarrollar una intuición geométrica de los operadores diferenciales gradiente, divergencia y rotacional, y permite extender dichos operadores a espacios curvos. Esta teoría también permite generalizar importantes resultados del Cálculo Vectorial, como el *Teorema de Stokes*, el cual es fundamental para su discretización y, en consecuencia, su implementación.

2.3.1 Álgebra Exterior

La idea básica del Álgebra Exterior consiste en que los volúmenes $k-$dimensionales, que se denominan *k-vectores*, se describen mediante un conjunto de k vectores, donde k es la dimensión (Crane y col. 2013). Por ejemplo, un $1-$vector representa una longitud, mientras que un $2-$vector representa un área. Finalmente, al igual que los vectores ordinarios, los $k-$vectores tienen magnitud y orientación.

Tomando en cuenta lo anterior, un $1-$vector no es más que un vector ordinario. Para visualizar un $2-$vector (también llamado *bivector*), consideremos dos vectores $\underline{u}$

y $\underline{v} \in \mathbb{R}^3$. Podemos asignar a estos vectores el paralelogramo que forman, el cual se denota como $\underline{u} \wedge \underline{v}$, donde $\wedge$ se lee como *cuña* (o *wedge* en inglés), tal y como se muestra en la Figura (2.1):

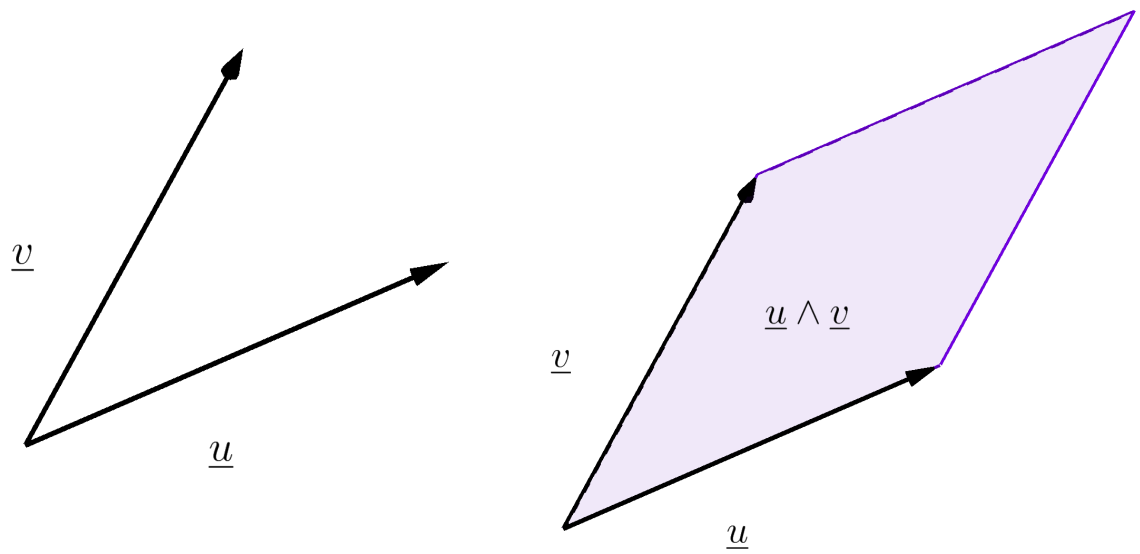


Figura 2.1: Bivector $\underline{u} \wedge \underline{v}$ formado por los vectores $\underline{u}$ y $\underline{v}$

El área del paralelogramo que forman $\underline{u}$ y $\underline{v}$ será la magnitud del bivector $\underline{u} \wedge \underline{v}$. Por otro lado, la orientación del bivector $\underline{u} \wedge \underline{v}$ está dada por el vector normal al paralelogramo formado por $\underline{u}$ y $\underline{v}$. Por lo tanto, podemos distinguir a $\underline{u} \wedge \underline{v}$ de $\underline{v} \wedge \underline{u}$ por su orientación (ver Figura 2.2).

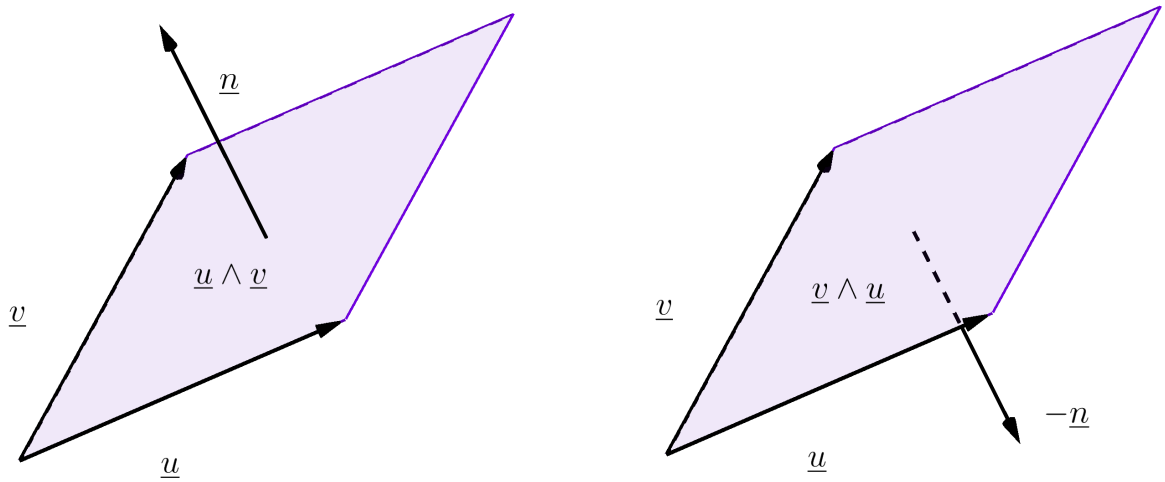


Figura 2.2: Bivector $\underline{u} \wedge \underline{v}$ formado por los vectores $\underline{u}$ y $\underline{v}$

Al igual que los vectores ordinarios, dos bivectores son iguales si tienen la misma

magnitud y orientación. Finalmente, un *tri-vector* representa un volumen, y se denota como $\underline{u} \wedge \underline{v} \wedge \underline{w}$ (ver Figura 2.3)

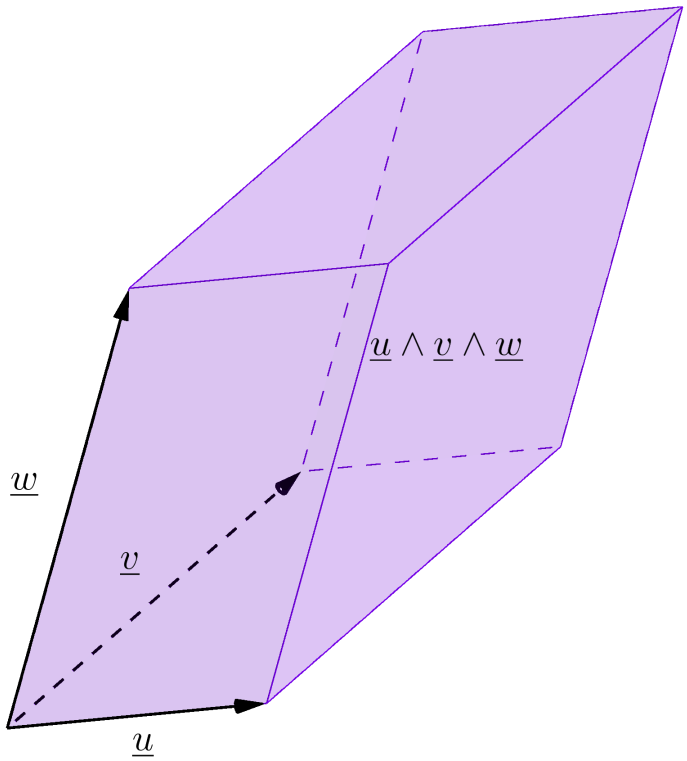


Figura 2.3: Trivector $\underline{u} \wedge \underline{v} \wedge \underline{w}$

Producto Cuña

Con lo visto anteriormente, podemos establecer algunas propiedades del producto cuña $\wedge$. Sean los vectores $\underline{u}$, $\underline{v}$, $\underline{w} \in \mathbb{R}^n$, y escalares a, $b \in \mathbb{R}$, entonces, el producto cuña cumple con:

- Antisimetría: $\underline{u} \wedge \underline{v} = -\underline{v} \wedge \underline{u}$.
- Asociatividad: $(\underline{u} \wedge \underline{v}) \wedge \underline{w} = \underline{u} \wedge (\underline{v} \wedge \underline{w})$.
- Distributividad sobre la adición: $\underline{u} \wedge (\underline{v} + \underline{w}) = \underline{u} \wedge \underline{v} + \underline{u} \wedge \underline{w}$.
- Bilinealidad de la multiplicación escalar: $(a\underline{u}) \wedge (b\underline{v}) = ab(\underline{u} \wedge \underline{v})$.

Estrella de Hodge

De manera similar al *complemento ortogonal* de un subespacio vectorial, la *Estrella de Hodge* ($\star$) de un $k-$vector en $\mathbb{R}^n$ es un $(n-k)-$vector *complementario*. Por ejemplo,

un $2-$vector en $\mathbb{R}^3$ puede ser descrito por una dirección ortogonal $\star(\underline{u} \wedge \underline{v})$, como se muestra en la Figura (2.4)

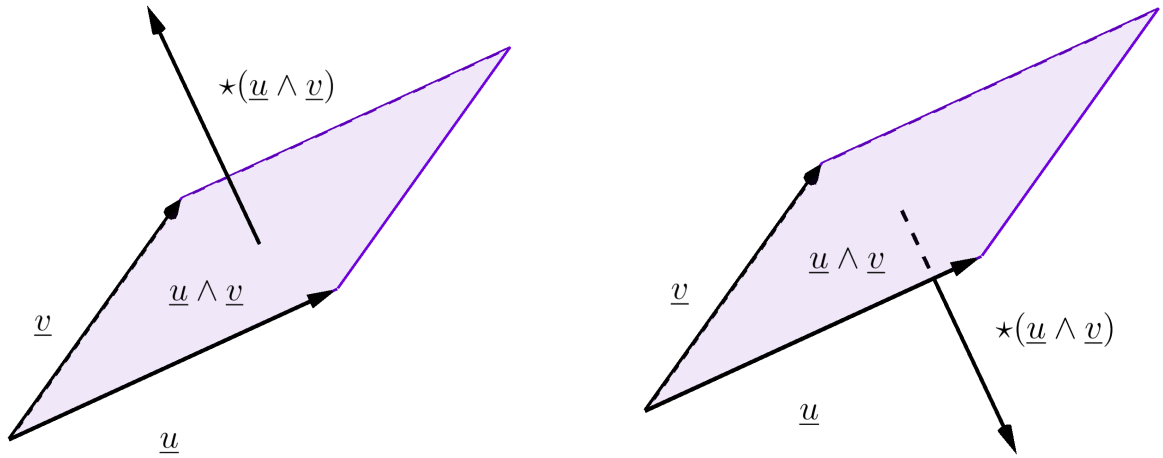


Figura 2.4: Estrella de Hodge ($\star$) de un bivector en $\mathbb{R}^3$

En general, no existe ventaja alguna en cuanto a la dirección ortogonal que se elija, sin embargo, en esta tesis se sigue la siguiente convención:

$$det(\underline{u}, \underline{v}, \star(\underline{u} \wedge \underline{v})) > 0. \tag{2.3.1}$$

En este ejemplo, la magnitud de $\star(\underline{u} \wedge \underline{v})$ será igual al área del paralelogramo que forman los vectores $\underline{u}$ y $\underline{v}$.

De manera general, sea $\{\underline{e}_1, \underline{e}_2, ..., \underline{e}_n\}$ una base ortonormal de $\mathbb{R}^n$, y sea $\{\underline{u}_1, \underline{u}_2, ..., \underline{u}_k\}$ un conjunto de k vectores ortonormales de $\mathbb{R}^n$. Entonces, la Estrella de Hodge está definida por (Crane y col. 2013):

$$(\underline{u}_1 \wedge \underline{u}_2 \wedge, ..., \wedge \underline{u}_k) \wedge \star(\underline{u}_1 \wedge \underline{u}_2 \wedge, ..., \wedge \underline{u}_k) = \underline{e}_1 \wedge \underline{e}_2 \wedge, ..., \wedge \underline{e}_n. \tag{2.3.2}$$

Finalmente, un caso importante es la Estrella de Hodge en $\mathbb{R}^2$. Para un $1-$vector en $\mathbb{R}^2$, la Estrella de Hodge es también un $1-$vector, pero rotado noventa grados en sentido contrario a las manecillas del reloj (siguiendo la convención adoptada).

2.3.2 Formas Diferenciales

El cálculo con *formas diferenciales* provee una alternativa al cálculo vectorial más general, flexible e independiente de coordenadas. Las formas diferenciales permiten definir, de manera unificada, integrales sobre curvas, superficies, volúmenes o variedades en dimensiones más altas.

$1-$**Formas**

Las *1-formas* (también llamadas *covectores*), son funciones lineales, cuyo argumento es un vector y producen un escalar. Usualmente, las 1-formas se denotan con las letras del alfabeto griego minúsculas. En el plano, podemos visualizar las 1-formas como vectores. La diferencia radica en que el vector representa una magnitud que *queremos medir*, mientras que la 1-forma es la dirección sobre la cual *realizamos la medición*. Por ejemplo, en la Figura (2.5), el vector $\underline{v} \in \mathbb{R}^2$ proyecta una sombra sobre la $1-$forma α; la longitud de la sombra se denota como $\alpha(\underline{v})$. Si α es unitaria, entonces:

$$\alpha(\underline{v}) = \langle \alpha, \underline{v} \rangle, \tag{2.3.3}$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ representa el producto interno.

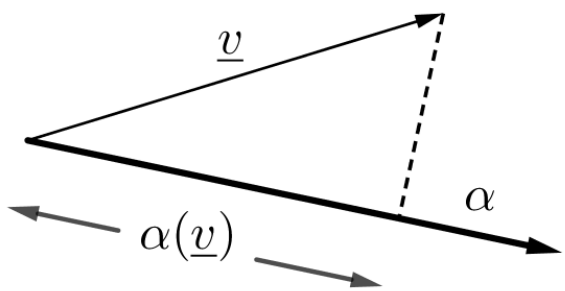


Figura 2.5: Representación gráfica de un vector y una $1-$forma en $\mathbb{R}^2$

La distinción entre ambos objetos es de gran relevancia en espacios curvos, en donde conceptos como la *métrica inducida* juegan un papel importante para llevar a cabo las mediciones correctamente. En el plano, sin embargo, esta distinción no es tan diferente a la que se hace con los vectores renglón y columna en álgebra lineal, en donde el operador *transposición* permite realizar el producto interno de dos vectores. Para el caso de $1-$formas y vectores, existen dos operadores denominados *sharp* ($\sharp$) y *flat* ($\flat$), los cuales transforman $1-$formas en vectores y vectores a $1-$formas, respectivamente, y que actúan de la siguiente manera:

$$\underline{u}, \underline{v} \xrightarrow{\flat} \underline{u}^{\flat}(\underline{v}) = \underline{u}^T \underline{\underline{M}}\, \underline{v} = \langle \underline{u}, \underline{v} \rangle, \tag{2.3.4}$$

$$\alpha, \beta \xrightarrow{\sharp} \alpha(\beta^{\sharp}) = \alpha \underline{\underline{M}}^{-1} \beta^T = \langle \alpha, \beta \rangle, \tag{2.3.5}$$

donde $\underline{\underline{M}}$ es simétrica y positiva definida.

k-Formas

Al igual que con los vectores, el álgebra exterior se puede aplicar a los *covectores*, para obtener $k-$formas, las cuales *miden* a los $k-$vectores. Ésta medición es *multilineal*, es decir, lineal en cada argumento de la $k-$forma. Por ejemplo, sean α y β dos $1-$formas en

$\mathbb{R}^3$, como se muestra en la Figura (2.6). La $2-$forma que forman α y β se denota como $\alpha \wedge \beta$, y realiza una *medición* multilineal del bivector $\underline{u} \wedge \underline{v}$, que se puede interpretar geométricamente como el área de la sombra que proyecta este último sobre $\alpha \wedge \beta$, la cual se denota como $\alpha \wedge \beta(\underline{u}, \underline{v})$.

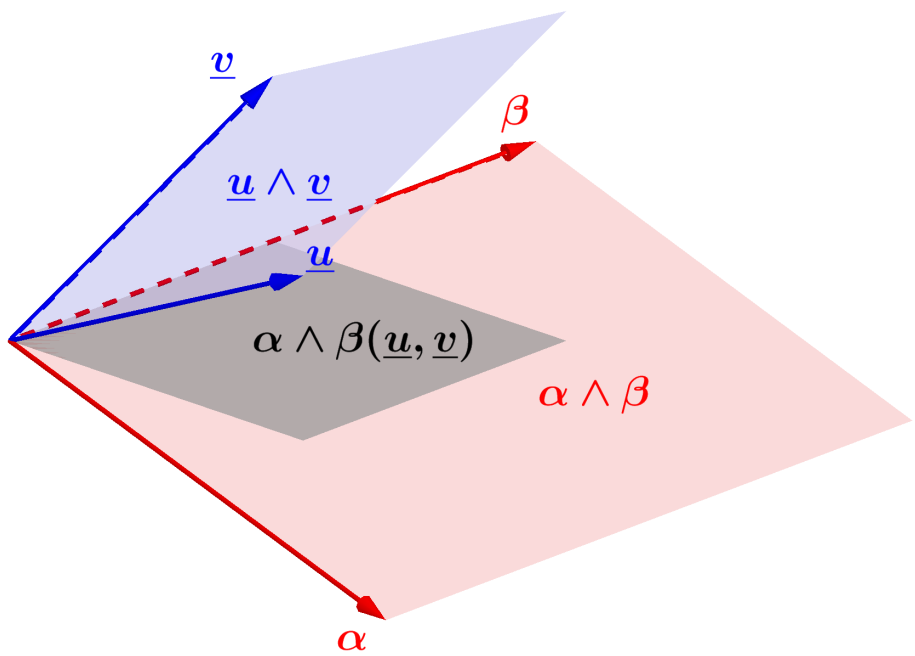


Figura 2.6: Interpretación geométrica de una $2-$Forma.

Cuando α y β son ortonormales, el área proyectada está dada por:

$$\alpha \wedge \beta(\underline{u}, \underline{v}) = \alpha(\underline{u})\beta(\underline{v}) - \alpha(\underline{v})\beta(\underline{u}). \tag{2.3.6}$$

Si α y β no son ortonormales, el área dada por la Ecuación (2.3.6) se escala por un factor igual al área del paralelogramo formado por α y β. Éstas mismas ideas se pueden extender para $3-$formas y, en general, $k-$formas. Finalmente, las $0-$formas son simplemente un escalar.

Las *k-formas diferenciales* son una asignación de una $k-$forma a cada punto en el espacio (Crane y col. 2013). Por ejemplo, una $0-$forma diferencial será la asignación de un escalar a cada punto (exactamente igual a una función escalar). Una $1-$forma diferencial asigna una $1-$forma a cada punto del espacio. Visualmente, en $\mathbb{R}^n$, los campos vectoriales y las $1-$formas diferenciales tienen la misma representación gráfica, sin embargo, como se mencionó anteriormente, las $1-$formas son funciones lineales de vectores a escalares; por lo que al aplicar una $1-$forma diferencial a un campo vectorial, obtenemos un campo escalar. A menudo, las $k-$*formas diferenciales* se abrevian

simplemente como $k-$*formas*.

Coordenadas

En un espacio $n-$dimensional V, los vectores $\underline{v} \in V$, pueden ser expresados como una combinación lineal de una base de V, por ejemplo:

$$\underline{v} = v_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + v_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + ... + v_n \frac{\partial}{\partial x^n},$$

donde $v_1, v_2, ..., v_n$ son escalares y $\{\frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, ..., \frac{\partial}{\partial x^n}\}$ es la base ortonormal estándar para vectores en $\mathbb{R}^n$.

De manera similar, las $1-$formas también pueden ser expresadas como una combinación lineal de una base. Por ejemplo, una $1-$forma α, puede ser expresada como:

$$\alpha = \alpha_1 dx^1 + \alpha_2 dx^2 + ... + \alpha_n dx^n, \tag{2.3.7}$$

donde el conjunto $\{dx^1, dx^2, ..., dx^n\}$ es la base ortonormal estándar para $1-$formas en $\mathbb{R}^n$ y $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n$ son funciones escalares (o $0-$formas). Las bases estándar para vectores y para $1-$formas son bases duales, es decir, cumplen con la siguiente relación:

$$dx^i \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \right) = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{2.3.8}$$

En $\mathbb{R}^3$, la base para $1-$formas diferenciales se puede visualizar como la base ortonormal estándar para vectores, como se muestra en la Figura (2.7).

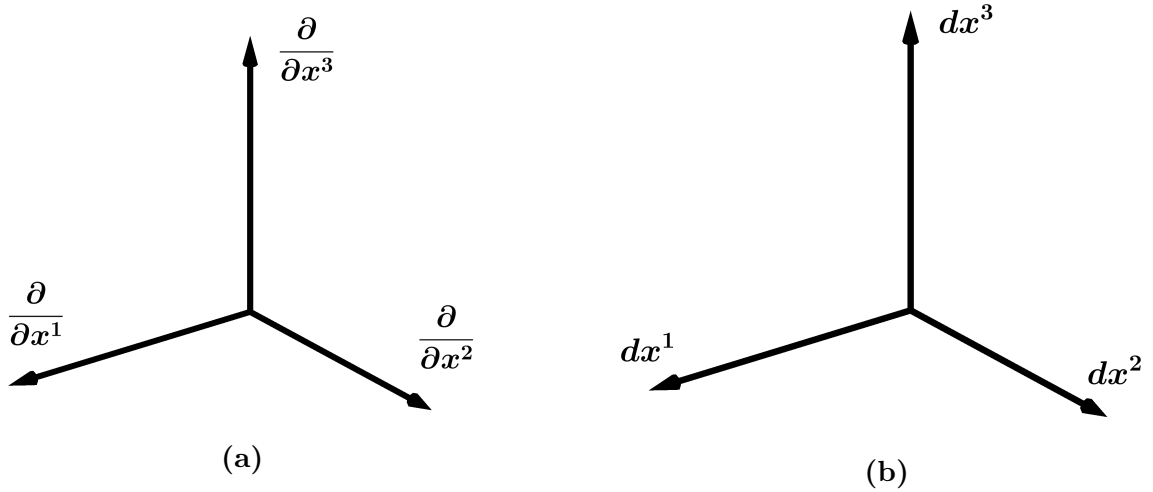


Figura 2.7: (a): Base ortonormal estándar para vectores en $\mathbb{R}^3$. (b): Base ortonormal estándar para $1-$formas en $\mathbb{R}^3$

Debido a que una $2-$forma puede ser expresada como el producto cuña de dos $1-$formas, la base estándar para $2-$formas en $\mathbb{R}^3$ es $\{dx^1 \wedge dx^2, dx^2 \wedge dx^3, dx^3 \wedge dx^1\}$ (Figura (2.8)).

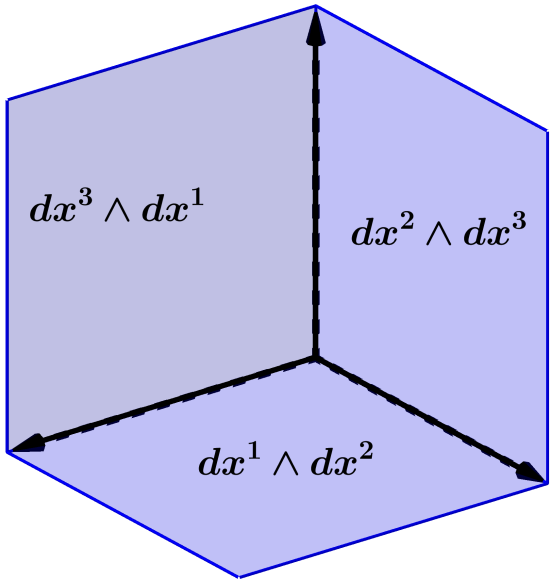


Figura 2.8: Base estándar para $2-$formas en $\mathbb{R}^3$

Por otro lado, la base para $3-$formas en $\mathbb{R}^3$ es: $\{dx^1 \wedge dx^2 \wedge dx^3\}$ (Figura 2.9).

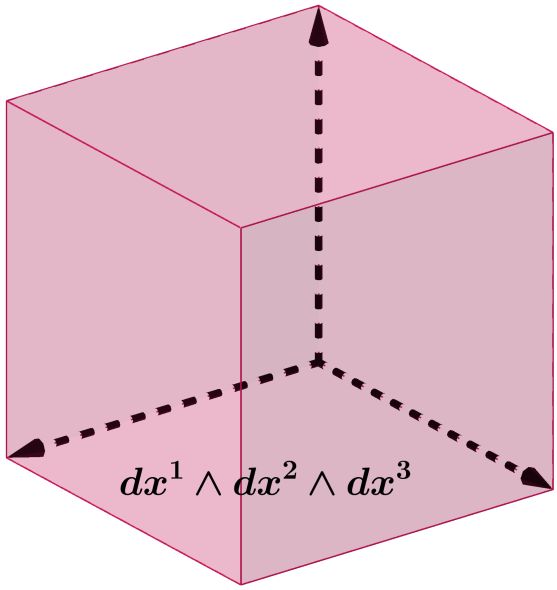


Figura 2.9: Base estándar para $3-$formas en $\mathbb{R}^3$

Finalmente, la base para $0-$formas es simplemente el escalar 1.

2.3.3 Derivada Exterior

La Derivada Exterior (d) brinda información acerca de cómo varía una $k-$forma a lo largo de cualquier dirección posible. En esta sección se desarrollan diversos ejemplos para ilustrar el comportamiento de d.

Derivada Exterior de $0-$formas

Consideremos primero el caso de la derivada exterior de $0-$formas. Sea $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, entonces:

$$d\phi \equiv \frac{\partial \phi}{\partial x^1} dx^1 + ... + \frac{\partial \phi}{\partial x^n} dx^n, \tag{2.3.9}$$

donde $\frac{\partial \phi}{\partial x^i}$ son las derivadas parciales de la función ϕ, mientras que dx^i es la base ortonormal para $1-$formas en $\mathbb{R}^n$. Como se observa en la ecuación anterior, la derivada exterior de una $0-$forma se parece al gradiente de una función, pero expresado como una $1-$forma; en efecto, se tiene que:

$$\nabla \phi = (d\phi)^\sharp. \tag{2.3.10}$$

Ahora, debido a que $d\phi$ es una $1-$forma, podemos incluir al vector $\underline{u} = (u_1, ..., u_n)$ como su argumento, obteniéndose la siguiente función escalar:

$$d\phi(\underline{u}) = \frac{\partial \phi}{\partial x^1} u^1 + ... + \frac{\partial \phi}{\partial x^n} u^n.$$

La expresión anterior indica cómo cambia ϕ en dirección de $\underline{u}$. En general, $d\phi(\underline{u})$ representa la derivada direccional de ϕ en dirección $\underline{u}$, por lo que:

$$d\phi(\underline{u}) = \underline{u} \cdot \nabla \phi. \tag{2.3.11}$$

Derivada Exterior de $1-$formas

Consideremos ahora la $1-$forma: $\alpha = \alpha_1 dx^1 + \alpha_2 dx^2 + \alpha_3 dx^3$, donde α_1, α_2 y α_3 son funciones escalares $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$; la derivada exterior de α es:

$$d(\alpha) = d(\alpha_1 dx^1 + \alpha_2 dx^2 + \alpha_3 dx^3),$$

por la linealidad de d, podemos escribir:

$$d(\alpha) = d(\alpha_1 dx^1) + d(\alpha_2 dx^2) + d(\alpha_3 dx^3), \tag{2.3.12}$$

ahora bien, los términos $\alpha_i dx^i$ pueden verse como el producto cuña entre una $0-$forma α_i y una $1-$forma dx^i, es decir, $\alpha_i \wedge dx^i$ y, por la regla del producto, se tiene que:

$$d(\alpha_i \wedge dx^i) = d\alpha_i \wedge dx^i + \alpha_i \wedge ddx^i, \tag{2.3.13}$$

donde los términos $ddx^i = 0$, por lo que, considerando la Ecuación (2.3.9), podemos escribir:

$$d(\alpha_i \wedge dx^i) = \frac{\partial \alpha_i}{\partial x^j} dx^j \wedge dx^i, \tag{2.3.14}$$

Finalmente, por la Ecuación (2.3.14), y por la propiedad de antisimetría del producto cuña, se tiene:

$$d(\alpha) = (\frac{\partial \alpha_2}{\partial x^1} - \frac{\partial \alpha_1}{\partial x^2}) dx^1 \wedge dx^2 + (\frac{\partial \alpha_3}{\partial x^2} - \frac{\partial \alpha_2}{\partial x^3}) dx^2 \wedge dx^3 + (\frac{\partial \alpha_1}{\partial x^3} - \frac{\partial \alpha_3}{\partial x^1}) dx^3 \wedge dx^1. \tag{2.3.15}$$

La Ecuación (2.3.15) guarda una similitud con el rotacional de un campo vectorial, pero expresado como una $2-$forma. Por lo tanto, podemos expresar el rotacional de un campo vectorial F en notación de Cálculo Exterior como:

$$\nabla \times F = (\star dF^\flat)^\sharp. \tag{2.3.16}$$

Ahora, consideremos un campo vectorial $X = X_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + X_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + X_3 \frac{\partial}{\partial x^3}$ con X_1, X_2 y X_3 funciones escalares de $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$. De Cálculo Vectorial, sabemos que la divergencia de X es:

$$\nabla \cdot X = \frac{\partial X_1}{\partial x^1} + \frac{\partial X_2}{\partial x^2} + \frac{\partial X_3}{\partial x^3}, \tag{2.3.17}$$

el cual es un campo escalar. Para expresar la divergencia de X en notación de Cálculo Exterior, recordemos que la Estrella de Hodge aplicada a una $k-$forma en $\mathbb{R}^n$ resulta en una $(n-k)-$forma, por lo que:

$$\star(X^\flat) = X_1 dx^2 \wedge dx^3 + X_2 dx^3 \wedge dx^1 + X_3 dx^1 \wedge dx^2,$$

ahora, tomando la derivada exterior de la expresión anterior:

$$d \star (X^\flat) = \frac{\partial X_1}{\partial x^1} dx^1 \wedge dx^2 \wedge dx^3 + \frac{\partial X_2}{\partial x^2} dx^2 \wedge dx^3 \wedge dx^1 + \frac{\partial X_3}{\partial x^3} dx^3 \wedge dx^1 \wedge dx^2,$$

finalmente, tomando la Estrella de Hodge de la expresión anterior, obtenemos:

$$\star d \star (X^\flat) = \frac{\partial X_1}{\partial x^1} + \frac{\partial X_2}{\partial x^2} + \frac{\partial X_3}{\partial x^3}, \tag{2.3.18}$$

recuperando así la divergencia de X.

Con lo visto hasta ahora, podemos hacer las siguientes observaciones:

- d es una transformación lineal, tal que $d : \Omega^k \to \Omega^{k+1}$, donde Ω^k es el espacio de $k-$formas diferenciales.
- La regla del producto:

  $$d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^k (\alpha \wedge d\beta), \tag{2.3.19}$$

  siendo α una $k-$forma.

- Exactitud:

$$d \circ d = 0. \tag{2.3.20}$$

La demostración de la Ecuación (2.3.20) se describe en la siguiente sección.

Finalmente, el operador Laplaciano $\nabla \cdot (\nabla \phi)$, donde $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, puede escribirse en notación de Cálculo Exterior como:

$$\nabla \cdot (\nabla \phi) = \star d \star d\phi. \tag{2.3.21}$$

2.3.4 Integración de Formas Diferenciales

La idea de integración de funciones en Cálculo Vectorial puede extenderse de manera natural a integración de formas diferenciales. En general, los integrandos en espacios $k-$dimensionales son $k-$formas.

Integración de $1-$formas

Para motivar esta sección, consideremos primero el cálculo del trabajo requerido para mover una partícula $1-$dimensional del punto a al punto b, en presencia de un campo externo $f(x)$. La cantidad de trabajo que se requiere para mover la partícula desde un punto $x_i \in \mathbb{R}$ a un punto $x_{i+1} \in \mathbb{R}$ es aproximadamente igual a $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, multiplicado por una *constante de proporcionalidad* $f(x)$, al considerar un camino discreto $x_0 = a, x_1, x_2, ..., x_n = b$. Por lo tanto, el trabajo total puede ser expresado como:

$$W = \int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\Delta x_i. \tag{2.3.22}$$

Si se elige el camino opuesto (es decir, desde el punto b al punto a), el signo de la integral cambia.

Ahora, consideremos el caso para dimensiones más altas ($n \geq 1$), en donde integraremos una curva orientada y continua $C \in \mathbb{R}^n$ desde $a \in \mathbb{R}^n$ hasta $b \in \mathbb{R}^n$. La curva C puede parametrizarse como una función continuamente diferenciable $C(t)$, donde $t \in [0, 1]$ y, al igual que el caso anterior, aproximamos el camino continuo con uno discreto de la forma:

$$x_0 = C(0) = a, x_1 = C(t_1), ..., x_n = C(1) = b.$$

El desplazamiento $\underline{\Delta x} = x_{i+1} - x_i$ es ahora un vector tangente en $\mathbb{R}^n$ en el punto x_i. En este caso, el análogo de *constante de proporcionalidad* será una transformación lineal α (*i.e.* una $1-$forma diferencial). En consecuencia, para cada x_i se tiene una $\alpha_{x_i} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, cuyo argumento son desplazamientos $\underline{\Delta x_i} \in \mathbb{R}^n$ y produce escalares que representan el trabajo requerido para mover la partícula de x_i a x_{i+1}. Por lo tanto, el

trabajo neto $\int_C \alpha$ requerido para moverse desde el punto a al punto b sobre C es (Ver Figura 2.10):

$$\int_C \alpha \simeq \sum_{i=1}^{n} \alpha_{x_i}(\underline{\Delta x}_i), \tag{2.3.23}$$

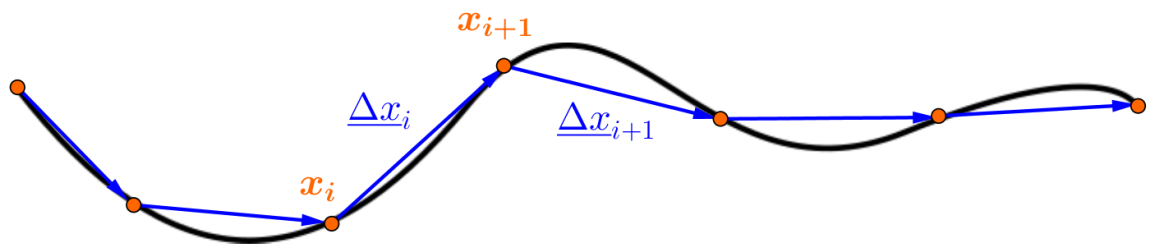


Figura 2.10: Integración de una 1−forma sobre una curva

La Ecuación 2.3.23 provee una expresión para calcular la integral de una 1−forma α sobre cualquier curva C.

Integración de 2−formas

Para aproximar el área de Ω (A_Ω) en $\mathbb{R}^2$, podemos calcular la suma del área de cada cuadrado A_i (Ver Figura 2.11); es decir:

$$A_\Omega \simeq \sum_{i=1}^{n} A_i,$$

eventualmente, al hacer cada vez más pequeños los cuadrados, recuperamos el área de Ω:

$$A_\Omega = \int_\Omega dA. \tag{2.3.24}$$

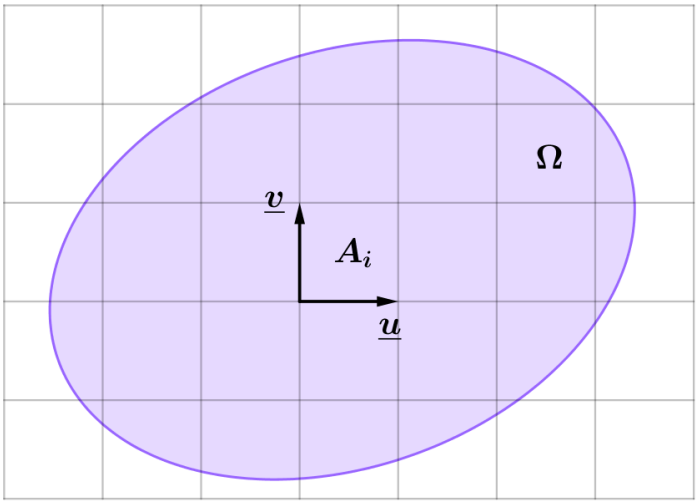


Figura 2.11: Discretización de un dominio Ω en $\mathbb{R}^2$

Sin embargo, el área de cada cuadrado también puede ser expresado como una medición que realiza una $2-$forma $\omega = dx^1 \wedge dx^2$ del bivector $\underline{u} \wedge \underline{v}$; es decir:

$$A_i = \omega(\underline{u}, \underline{v}), \tag{2.3.25}$$

y, por lo tanto:

$$A_\Omega = \int_\Omega \omega, \tag{2.3.26}$$

dicho de otra manera, dA no es más que la forma de volumen estándar $dx^1 \wedge dx^2$ en $\mathbb{R}^2$ (Crane y col. 2013).

2.3.5 El Teorema de Stokes

El *Teorema de Stokes* es un resultado muy importante en el contexto de geometría diferencial, y esencial para la discretización de la teoría del Cálculo Exterior.

Teorema 2.3.1. *Teorema de Stokes. Sea ω una $(k-1)-$forma diferencial y Ω una región $k-$dimensional, orientada y con frontera $\partial\Omega$. Entonces:*

$$\int_\Omega d\omega = \int_{\partial\Omega} \omega. \tag{2.3.27}$$

Algunos de los teoremas más conocidos en Cálculo Vectorial son un caso particular del Teorema de Stokes, como el *Teorema Fundamental del Cálculo*, el *Teorema de Green* y el *Teorema de la Divergencia*. Partiendo del Teorema de Green se puede demostrar que existe una dualidad entre el operador frontera (∂) y la derivada exterior (d), que permite expresar este último como un operador matricial discreto (Esqueda, R. Herrera y Botello 2019).

La Dualidad en el Teorema de Green

Teorema 2.3.2. *El Teorema de Green. Sea* $\underline{F} = L\frac{\partial}{\partial x^1} + M\frac{\partial}{\partial x^2}$ *un campo vectorial sobre una región* $D \in \mathbb{R}^2$ *y* $\underline{T}$ *un campo vectorial continuo y tangente a* ∂D*. Entonces:*

$$\int_D \nabla \times \underline{F} dA = \int_{\partial D} \underline{T} \cdot \underline{F} d\ell. \tag{2.3.28}$$

El Teorema de Green puede ser expresado en términos de Cálculo Exterior como:

$$\int_D (\frac{\partial M}{\partial x^1} - \frac{\partial L}{\partial x^2}) dx^1 \wedge dx^2 = \int_{\partial D} (L dx^1 + M dx^2), \tag{2.3.29}$$

o bien:

$$\int_D d\underline{F}^\flat = \int_{\partial D} \underline{F}^\flat. \tag{2.3.30}$$

Así, el Teorema de Green es un caso particular del Teorema de Stokes.
Un resultado de Álgebra Lineal establece que si $\underline{\underline{A}}$ es una transformación lineal en un espacio euclidiano $\mathbb{R}^n$, y $\underline{v}, \underline{w} \in \mathbb{R}^n$, entonces:

$$\langle \underline{\underline{A}}(\underline{v}), \underline{w} \rangle = \langle \underline{v}, \underline{\underline{A}}^T(\underline{w}) \rangle. \tag{2.3.31}$$

Ahora, haciendo uso de la siguiente notación $<< \cdot, \cdot >>$ para expresar las integrales en la Ecuación (2.3.30) como:

$$<< d\underline{F}^\flat, D >> = << \underline{F}^\flat, \partial D >>, \tag{2.3.32}$$

y, formalmente, considerando la Ecuación (2.3.31), podemos establecer que:

$$d = \partial^T. \tag{2.3.33}$$

Siendo el operador ∂ conocido y de fácil manejo en mallas, la expresión anterior permite expresar a d como un operador matricial discreto.

Exactitud de la Derivada Exterior

De manera intuitiva, la exactitud de la derivada exterior se puede verificar al considerar que la derivada exterior de una función $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ es el gradiente de dicha función, expresada como una $1-$forma. En consecuencia, tomar la derivada exterior de $d\phi$, por la Ecuación (2.3.15), equivale a tomar el rotacional del campo gradiente, que será igual a cero.

También podemos verificar la exactitud de la derivada exterior empleando el Teorema de Stokes. Para ello, consideremos que *la frontera de la frontera* siempre es el conjunto vacío (Figura 2.12).

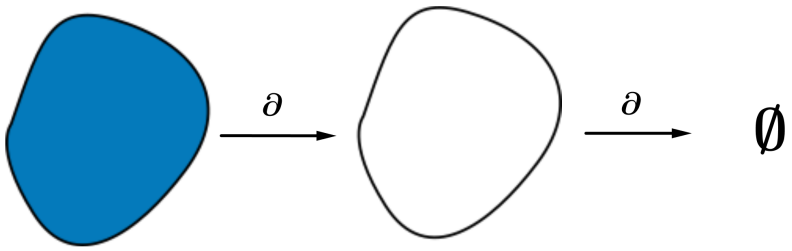


Figura 2.12: Frontera de un dominio

Entonces, para una forma diferencial $\omega = d\phi$, por el Teorema de Stokes se tiene que:

$$\int_{\Omega} d\omega = \int_{\partial\Omega} d\phi = \int_{\partial\partial\Omega} \phi = 0. \tag{2.3.34}$$

Capítulo 3

Metodología

En el capítulo anterior se obtuvo la ecuación de Convección - Difusión a partir del desarrollo del Modelo de Transporte de Soluto en Fluidos Libres. También, se revisaron algunos conceptos para expresar los operadores diferenciales en el lenguaje del Cálculo Diferencial Exterior y se describió la generalización del Teorema de Stokes y la Dualidad del Teorema de Green, siendo estos últimos indispensables para la discretización de los operadores vistos.

A continuación se describe el procedimiento para la discretización de los operadores *Derivada Exterior* y *Estrella de Hodge* sobre una malla simplicial; así como la consecuente discretización de la Ecuación de Convección - Difusión.

3.1 Cálculo Exterior Discreto

La aproximación de la solución de ecuaciones diferenciales parciales mediante *Cálculo Exterior Discreto* (DEC) consiste en los siguientes pasos:

- Discretizar el dominio con una malla simplicial (También llamada *Complejo Simplicial*) orientada.
- Expresar los operadores diferenciales de la ecuación en lenguaje de Cálculo Diferencial Exterior.
- Reemplazar las formas diferenciales por valores sobre la malla.
- Sustituir los operadores por matrices.

La malla simplicial se compone por elementos $k-$dimensionales orientados. Por ejemplo, como se muestra en al Figura (3.1), los elementos de una malla simplicial en $\mathbb{R}^3$ son: vértices $0-$dimensionales ($[v_i]$), aristas $1-$dimensionales ($[v_i, v_j]$), caras $2-$dimensionales ($[v_i, v_j, v_k]$) y tetrahedros $3-$dimensionales ($[v_i, v_j, v_k, v_l]$).

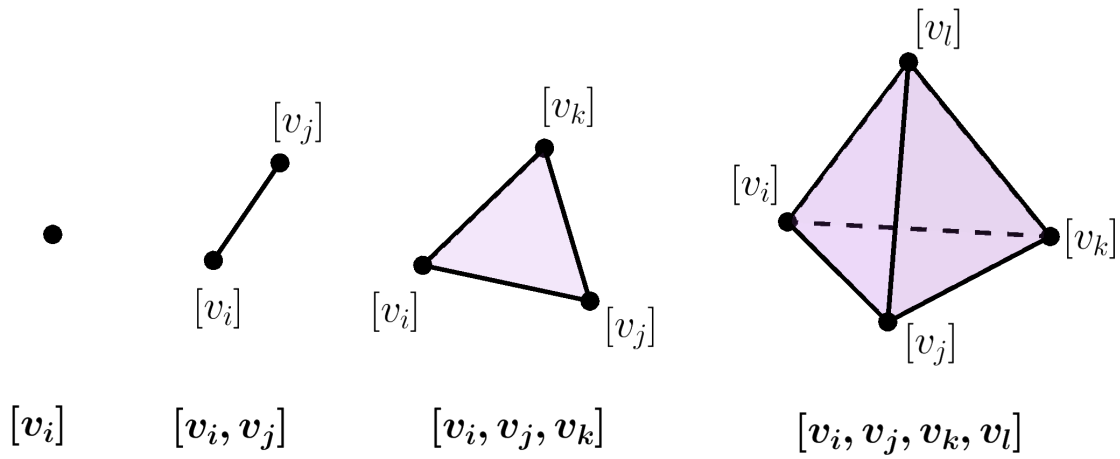


Figura 3.1: Elementos orientados de una malla simplicial en $\mathbb{R}^3$.

3.1.1 Formas Diferenciales Discretas

La discretización de $k-$formas se lleva a cabo mediante su integración sobre elementos $k-$dimensionales de la malla. Por ejemplo, las $0-$formas se integran sobre los nodos, mientras que las $2-$formas se integran sobre las caras. Las $k-$formas diferenciales discretas son una asignación de valores sobre cada elemento $k-$dimensional de la malla.

La integración de una $0-$forma ϕ sobre un vértice $[v_i]$ de la malla, consiste simplemente en tomar el valor de la función en el punto p_i ocupado por el vértice; es decir:

$$\int_{[v_i]} \phi = \phi(p_i). \tag{3.1.1}$$

Por consiguiente, la discretización de una $0-$forma consiste en *"muestrear"* la función.

Integración de $1-$formas Sobre Aristas

Para la discretización de una $1-$forma α sobre una arista $[v_i, v_j]$ en el plano, se emplea la misma idea descrita anteriormente para la integración de $1-$formas sobre curvas (Ecuación 2.3.23); es decir, se calcula el vector tangente unitario $\underline{T}$, se evalúa $\alpha(\underline{T})$ y se integra sobre la arista, como se muestra en la Figura (3.2):

$$\tilde{\alpha}_{[v_i,v_j]} = \int_{[v_i,v_j]} \alpha = \int_{[v_i]}^{[v_j]} \alpha(\underline{T}) ds \simeq L_{[v_i,v_j]}(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \alpha_{p_i}(\underline{T})), \tag{3.1.2}$$

donde $\tilde{\alpha}$ es el valor discreto de α y $L_{[v_i,v_j]}$ es la longitud de la arista. Si se invierte la orientación de la arista, el valor de $\tilde{\alpha}$ cambiará de signo.

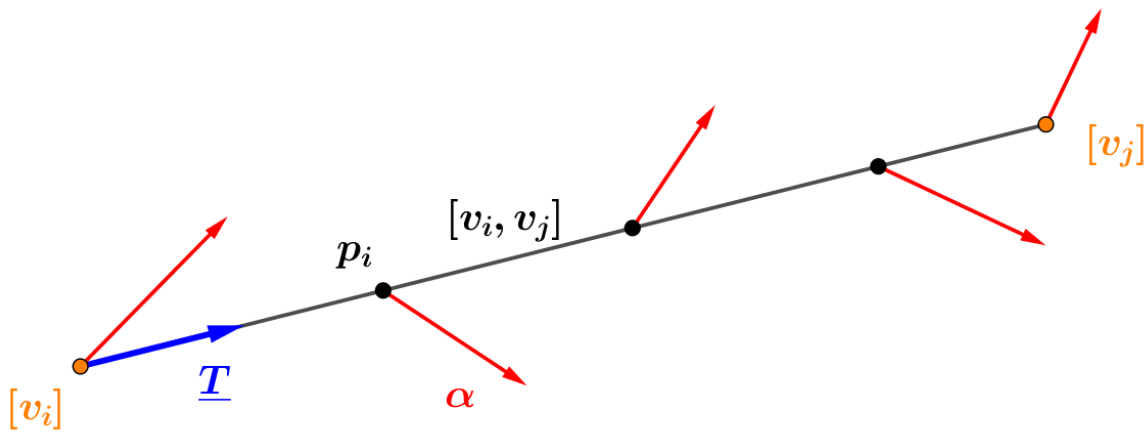


Figura 3.2: Integración de una 1−forma α sobre una arista

La integración de 2−formas y, en general de k−formas sobre elementos k−dimensionales de la malla, se lleva a cabo siguiendo la misma idea.

3.1.2 Derivada Exterior Discreta

Para elementos orientados de mallas simpliciales en dos dimensiones, el operador frontera actúa de la siguiente manera (Ver Figura (3.3)):

- Caras $[v_1, v_2, v_3]$:

$$\partial[v_1, v_2, v_3] = [v_2, v_3] - [v_1, v_3] + [v_1, v_2]. \tag{3.1.3}$$

- Aristas $[v_1, v_2]$, $[v_2, v_3]$, $[v_1, v_3]$:

$$\begin{aligned} \partial[v_1, v_2] &= [v_2] - [v_1], \\ \partial[v_2, v_3] &= [v_3] - [v_2], \\ \partial[v_3, v_1] &= [v_1] - [v_3]. \end{aligned} \tag{3.1.4}$$

- Vértices $[v_1], [v_2]$ y $[v_3]$:

$$\partial[v_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3. \tag{3.1.5}$$

Al considerar cada cara, arista y vértice como un elemento de una base vectorial, el operador frontera puede expresarse como un operador matricial. Por ejemplo, el operador que actúa sobre caras orientadas y produce una suma de sus aristas (Ecuación 3.1.3) es:

$$\partial_{2,1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \tag{3.1.6}$$

donde el subíndice $\partial_{2,1}$ indica que estamos tomando la frontera de un elemento $2-$dimensional para obtener elementos $1-$dimensionales. De manera similar, el operador que actúa sobre aristas orientadas y produce una suma de sus vértices (Ecuación 3.1.4) es:

$$\partial_{1,0} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}. \tag{3.1.7}$$

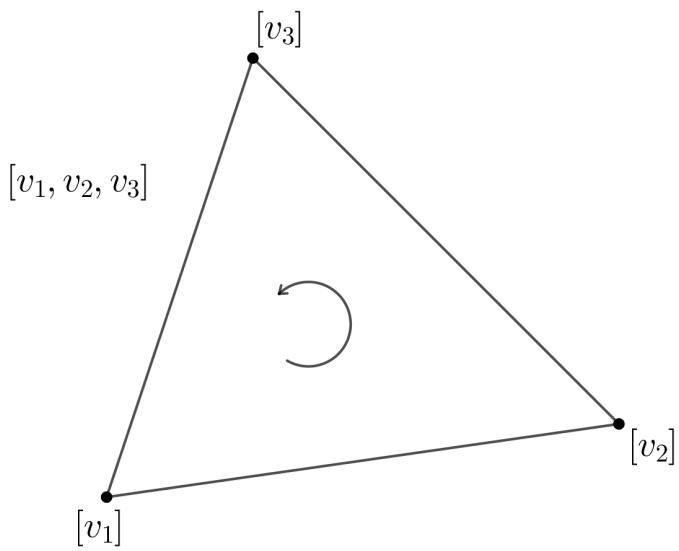


Figura 3.3: Elemento orientado de una malla simplicial en 2D.

Para calcular la derivada exterior discreta, podemos evaluar la derivada exterior continua e integrar (discretizar) sobre los correspondientes elementos orientados de la malla. Por ejemplo, consideremos una $0-$forma ϕ discretizada sobre los vértices del elemento mostrado en la Figura (3.3):

$$\phi \simeq \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}. \tag{3.1.8}$$

La derivada exterior de ϕ es una $1-$forma, por lo que se integra sobre las aristas $1-$dimensionales del elemento; es decir, para la arista $[v_1, v_2]$, se tiene:

$$(\tilde{d\phi})_{[v_1,v_2]} = \int_{[v_1,v_2]} d\phi, \tag{3.1.9}$$

y, por el Teorema de Stokes (Ecuación 2.3.27):

$$(\tilde{d\phi})_{[v_1,v_2]} = \int_{[v_1,v_2]} d\phi = \int_{[v_1]}^{[v_2]} \phi = \phi_2 - \phi_1, \tag{3.1.10}$$

de manera similar, para las aristas $[v_2, v_3]$ y $[v_3, v_1]$ se tiene:

$$(\tilde{d\phi})_{[v_2,v_3]} = \int_{[v_2,v_3]} d\phi = \int_{[v_2]}^{[v_3]} \phi = \phi_3 - \phi_2, \tag{3.1.11}$$

$$(\tilde{d\phi})_{[v_3,v_1]} = \int_{[v_3,v_1]} d\phi = \int_{[v_3]}^{[v_1]} \phi = \phi_1 - \phi_3. \tag{3.1.12}$$

Al igual que en el caso anterior, podemos expresar este operador mediante la siguiente matriz:

$$D_{0,1} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{3.1.13}$$

donde los subíndices $D_{0,1}$ indican que estamos tomando la derivada exterior de $0-$formas y obtenemos $1-$formas (valores asignados a las aristas). Como se puede observar, la matriz de la Ecuación (3.1.13) es la transpuesta de la matriz de la Ecuación (3.1.7); resultado que concuerda con la dualidad del Teorema de Green visto anteriormente. Por lo tanto y para este mismo caso, el operador derivada exterior discreta de una $1-$forma es:

$$D_{1,2} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}, \tag{3.1.14}$$

es decir, se realiza una suma orientada de los valores asignados a cada arista y se asigna al triángulo.

3.1.3 La Estrella de Hodge Discreta

Para la discretización de la Estrella de Hodge es necesario definir una *malla dual* que capture la idea de direcciones o *celdas* ortogonales a la malla primal (*i.e.* la malla original). En general, el dual de una malla simplicial $n-$dimensional identifica a cada elemento $k-$dimensional en la malla primal con una $(n-k)-$celda en la malla dual. Por ejemplo, para una malla simplicial en $\mathbb{R}^2$, las celdas duales son:

- El dual del triangulo $[v_1, v_2, v_3]$ es el circuncentro $[v_1, v_2, v_3]^\star$ (Figura 3.4a).

- El dual de una arista $[v_1, v_2]$ del triangulo es el segmento $[v_1, v_2]^\star$, que une el punto medio p_1 de la arista y el circuncentro $[v_1, v_2, v_3]^\star$ (Figura 3.4b).

- El dual de un vértice $[v_1]$ del triangulo es el cuadrilátero orientado en sentido contrario a las manecillas del reloj $[v_1]^\star$, formado por los puntos medios de las aristas adyacentes, el circuncentro y el vértice (Figura 3.4c).

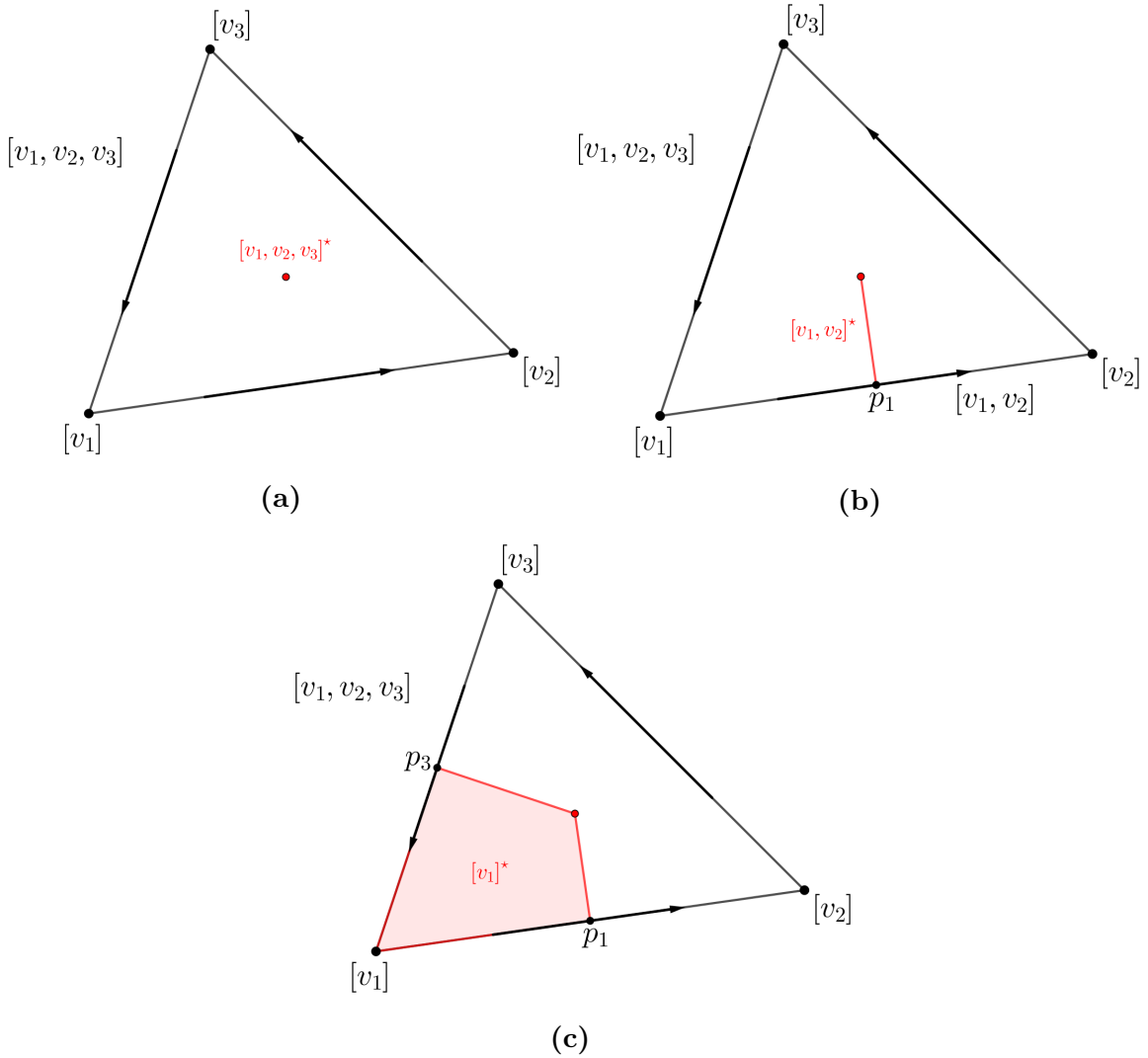


Figura 3.4: Celdas duales

Las $k-$formas discretizadas sobre la malla primal se denominan $k-$*formas primales*, mientras que aquellas discretizadas sobre la malla dual se denominan $k-$*formas duales*. En general las $k-$formas primales y duales tienen una interpretación física distinta. Por ejemplo, una $1-$forma primal discreta puede representar la circulación total sobre las aristas primales, mientras que su correspondiente $1-$forma dual discreta puede representar el flujo a través de las aristas duales. Sin embargo, ambas se relacionan por la Estrella de Hodge Discreta ($\tilde{\star}$), definida como:

$$\tilde{\star}\tilde{\alpha}_i = \frac{|\sigma_i^\star|}{|\sigma_i|}\tilde{\alpha}_i, \tag{3.1.15}$$

donde $\tilde{\alpha}_i$ es el valor discreto de una $k-$forma α sobre el $i-$ésimo elemento $k-$dimensional σ_i, y $\sigma_i^\star$ es la celda dual correspondiente a σ_i. El símbolo $|\cdot|$ denota el volumen sin

signo de la celda en cuestión (siendo el volumen de un vértice 1, por convención).

Debido a que la Estrella de Hodge Discreta multiplica el valor de la $k-$forma discreta por una razón del volumen de elementos primales y duales de la malla, esta se puede codificar como una matriz diagonal. En $\mathbb{R}^2$, se necesitan dos matrices Estrellas de Hodge:

- Una que relaciona $1-$formas primales con $1-$formas duales, la cual se denota como $M_{1,1}$.
- Una que relaciona las $0-$formas primales con las $2-$formas duales, denotada como $M_{0,2}$.

Para un elemento de una malla simplicial, la matriz $M_{1,1}$ está dada por (Ver Figura 3.5a):

$$M_{1,1} = \begin{bmatrix} \frac{|[v_1,v_2]^\star|}{|[v_1,v_2]|} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|[v_2,v_3]^\star|}{|[v_2,v_3]|} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{|[v_3,v_1]^\star|}{|[v_3,v_1]|} \end{bmatrix}, \tag{3.1.16}$$

y la matriz $M_{0,2}$ es (Ver Figura 3.5b):

$$M_{0,2} = \begin{bmatrix} \frac{|[v_1]^\star|}{|[v_1]|} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|[v_2]^\star|}{|[v_2]|} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{|[v_3]^\star|}{|[v_3]|} \end{bmatrix}. \tag{3.1.17}$$

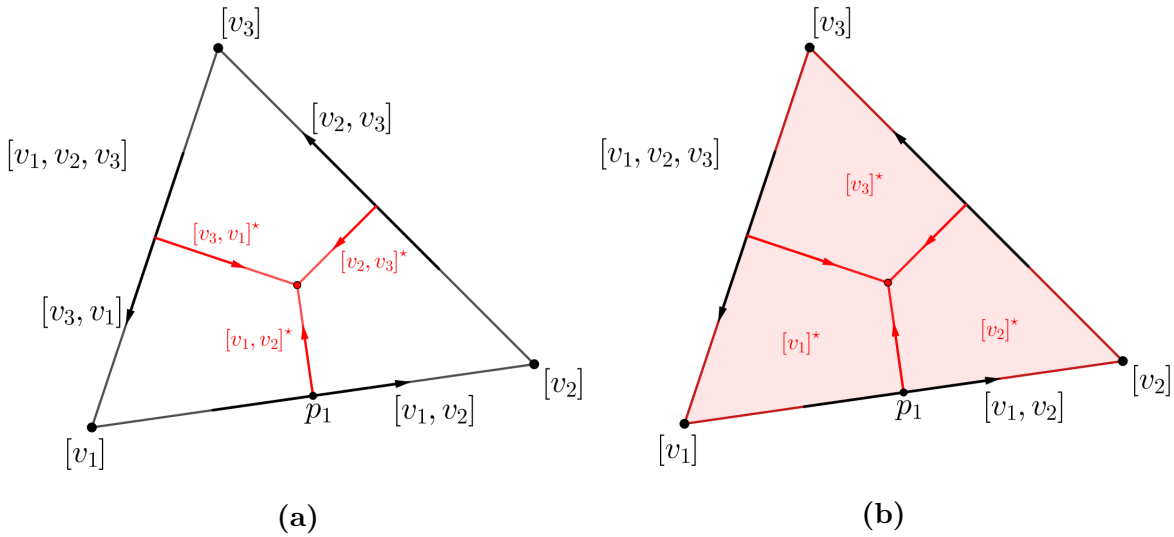


Figura 3.5: Orientación de celdas duales $1-$dimensionales y $2-$dimensionales de un triangulo

Los subíndices $M_{1,1}$ indican que estamos transformando $1-$formas primales en $1-$formas duales, mientras que los subíndices $M_{0,2}$ indican que estamos transformando

0−formas primales en 2−formas duales. La matriz inversa de $M_{0,2}$, denotada como $M_{2,0}$, se emplea para transformar 2−formas duales en 0−formas primales.

3.1.4 Derivada Exterior Dual Discreta

La derivada exterior discreta de k−formas diferenciales duales se realiza de manera similar a la derivada exterior discreta de k−formas primales. Por ejemplo, para una 1−forma dual $\alpha^\star$ discretizada en las celdas duales 1−dimensionales:

$$\alpha^\star \simeq \begin{pmatrix} \alpha^\star_{[v_1,v_2]^\star} \\ \alpha^\star_{[v_2,v_3]^\star} \\ \alpha^\star_{[v_3,v_1]^\star} \end{pmatrix},$$

y dada la orientación de las celdas duales de la Figura 3.5, la derivada exterior discreta de $\alpha^\star$ es:

$$\begin{aligned}
(\tilde{d\alpha}^\star)_{[v_1,v_2]^\star} &= \int_{[v_1]^\star} d\alpha^\star = \int_{\partial[v_1]^\star} \alpha^\star = \alpha^\star_{[v_1,v_2]^\star} - \alpha^\star_{[v_3,v_1]^\star}\ , \\
(\tilde{d\alpha}^\star)_{[v_2,v_3]^\star} &= \int_{[v_2]^\star} d\alpha^\star = \int_{\partial[v_2]^\star} \alpha^\star = \alpha^\star_{[v_2,v_3]^\star 2} - \alpha^\star_{[v_1,v_2]^\star}\ , \\
(\tilde{d\alpha}^\star)_{[v_3,v_1]^\star} &= \int_{[v_3]^\star} d\alpha^\star = \int_{\partial[v_3]^\star} \alpha^\star = \alpha^\star_{[v_3,v_1]^\star} - \alpha^\star_{[v_2,v_3]^\star}.
\end{aligned}$$

Por lo que, podemos expresar la derivada exterior discreta de una 1−forma dual en forma matricial como:

$$D^\star_{1,2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3.1.18}$$

Es importante resaltar que la matriz de la Ecuación (3.1.18) es la negativa transpuesta de la matriz de la Ecuación (3.1.13); es decir:

$$D^\star_{1,2} = (-D_{0,1})^T. \tag{3.1.19}$$

De manera general, la relación que guardan ambas derivadas exteriores discretas es:

$$D^\star_{(n-p),(n-p)+1} = (-1)^p D^T_{(p-1),p}\ , \tag{3.1.20}$$

donde n es la dimensión del dominio.

3.2 Discretización de la Ecuación de Convección-Difusión

Como se mencionó anteriormente, la ecuación que describe el transporte de un campo escalar ϕ debido a procesos de convección y difusión, isótropa, homogénea y estacionaria es:

$$\nabla \cdot (\underline{v}\phi) - K\nabla^2\phi = q, \tag{3.2.1}$$

donde $\underline{v}$ es la velocidad de partícula, K es el coeficiente de difusión y q es el término fuente. La ecuación anterior se puede reescribir como:

$$\underline{v} \cdot \nabla\phi + \phi(\nabla \cdot \underline{v}) - K\nabla^2\phi = q. \tag{3.2.2}$$

Si el fluido es incompresible ($\nabla \cdot \underline{v} = 0$), la Ecuación (3.2.2) se reescribe como:

$$\underline{v} \cdot \nabla\phi - K\nabla^2\phi = q. \tag{3.2.3}$$

El término difusivo $K\nabla^2\phi$ de las Ecuaciones (3.2.2) y (3.2.3) puede expresarse en términos de Cálculo Diferencial Exterior como:

$$K\nabla^2\phi = K \star d \star d\phi, \tag{3.2.4}$$

y, sustituyendo los operadores Estrella de Hodge y derivada Exterior por sus homólogos discretos:

$$K\nabla^2\phi = KM_{2,0}D^{\star}_{1,2}M_{1,1}D_{0,1}\phi. \tag{3.2.5}$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.2.5) y (3.1.19) en (3.2.2) y (3.2.3) se obtiene:

$$\underline{v} \cdot \nabla\phi + \phi(\nabla \cdot \underline{v}) + KM_{2,0}D^{T}_{0,1}M_{1,1}D_{0,1}\phi = q, \tag{3.2.6}$$

y

$$\underline{v} \cdot \nabla\phi + KM_{2,0}D^{T}_{0,1}M_{1,1}D_{0,1}\phi = q, \tag{3.2.7}$$

respectivamente.

Para discretizar el gradiente del término convectivo $\underline{v} \cdot \nabla\phi$, en las Ecuaciones (3.2.6) y (3.2.7), consideremos, nuevamente, la función ϕ discretizada en los vértices $[v_1]$, $[v_2]$ y $[v_3]$ del triángulo orientado. Como se ha mencionado anteriormente, podemos aproximar la derivada direccional de ϕ en el vértice $[v_1]$ en dirección de la arista orientada $[v_1, v_2]$ como:

$$d(\phi_{[v_1]})_{[v_1,v_2]} \simeq \phi_2 - \phi_1, \tag{3.2.8}$$

de manera similar, la derivada direccional de ϕ en el vértice $[v_1]$ en dirección de la arista $[v_1, v_3]$ es:

$$d(\phi_{[v_1]})_{[v_1,v_3]} \simeq \phi_3 - \phi_1. \tag{3.2.9}$$

Por lo tanto, para encontrar el vector gradiente $\underline{W_1}$ de ϕ en el vértice $[v_1]$, planteamos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \underline{W_1} \cdot ([v_2] - [v_1]) &= \phi_2 - \phi_1, \\ \underline{W_1} \cdot ([v_3] - [v_1]) &= \phi_3 - \phi_1, \end{aligned} \tag{3.2.10}$$

donde:

$$\begin{aligned} [v_1] &= (x_1, y_1), \\ [v_2] &= (x_2, y_2), \\ [v_3] &= (x_3, y_3). \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones anterior para $\underline{W}_1$:

$$\underline{W}_1 = \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} \phi_1(y_2 - y_3) + \phi_2(y_3 - y_1) + \phi_3(y_1 - y_2) \\ -(\phi_1(x_2 - x_3) + \phi_2(x_3 - x_2) + \phi_3(x_1 - x_2)) \end{bmatrix}, \tag{3.2.11}$$

donde A es el área del triangulo. Siguiendo el mismo procedimiento para $\underline{W}_2$ y $\underline{W}_3$, se llega a que:

$$\underline{W}_1 = \underline{W}_2 = \underline{W}_3. \tag{3.2.12}$$

Además, la Ecuación (3.2.11) coincide con el vector gradiente que se obtiene con Elemento Finito con funciones de interpolación lineales (FEML).

Si consideramos la velocidad de partícula $\underline{v}$ definida sobre cada vértice del triángulo:

$$\begin{aligned} \underline{v_1} &= (v_{1,1}, v_{1,2}), \\ \underline{v_2} &= (v_{2,1}, v_{2,2}), \\ \underline{v_3} &= (v_{3,1}, v_{3,2}), \end{aligned} \tag{3.2.13}$$

podemos tomar el producto interno de $\underline{v}_1, \underline{v}_2$ y $\underline{v}_3$ con el vector gradiente $\underline{W}$, para obtener la discretización del término convectivo en un triángulo:

$$\nabla\phi \simeq V\phi = \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} V_{1,1} & V_{1,2} & V_{1,3} \\ V_{2,1} & V_{2,2} & V_{2,3} \\ V_{3,1} & V_{3,2} & V_{3,3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{bmatrix}, \tag{3.2.14}$$

donde:

$$\begin{aligned} V_{1,1} &= v_{1,1}(y_2 - y_3) + v_{1,2}(x_3 - x_2), \\ V_{2,1} &= v_{2,1}(y_2 - y_3) + v_{2,2}(x_3 - x_2), \\ V_{3,1} &= v_{3,1}(y_2 - y_3) + v_{3,2}(x_3 - x_2), \\ V_{1,2} &= v_{1,1}(y_3 - y_1) + v_{1,2}(x_1 - x_3), \\ V_{2,2} &= v_{2,1}(y_3 - y_1) + v_{2,2}(x_1 - x_3), \\ V_{3,2} &= v_{3,1}(y_3 - y_1) + v_{3,2}(x_1 - x_3), \\ V_{1,3} &= v_{1,1}(y_1 - y_2) + v_{1,2}(x_2 - x_1), \\ V_{2,3} &= v_{2,1}(y_1 - y_2) + v_{2,2}(x_2 - x_1), \\ V_{3,3} &= v_{3,1}(y_1 - y_2) + v_{3,2}(x_2 - x_1). \end{aligned}$$

Por lo tanto, la Ecuación (3.2.7) se puede reescribir como:

$$[V + KM_{2,0}D_{0,1}^{T}M_{1,1}D_{0,1}]\phi = q. \tag{3.2.15}$$

Consideremos ahora el término $\phi(\nabla \cdot \underline{v})$ de la Ecuación (3.2.6). Tomando en cuenta la Ecuación (2.3.18), podemos reescribir este término como:

$$\phi(\nabla \cdot \underline{v}) = \star d \star (\underline{v})^{\flat}\phi, \tag{3.2.16}$$

Por lo tanto, para discretizar este término, es necesario integrar (discretizar) $\underline{v}^{\flat}$ en las aristas, a partir de los valores discretos de $\underline{v}$ en los vértices $[v_1], [v_2]$ y $[v_3]$ del triángulo:

$$\underline{v} \simeq \begin{pmatrix} \underline{v}_1 \\ \underline{v}_2 \\ \underline{v}_3 \end{pmatrix}. \tag{3.2.17}$$

Siguiendo el procedimiento descrito anteriormente para la integración de $1-$formas sobre curvas, consideremos la arista $[v_1, v_2]$ orientada del triángulo. Podemos parametrizar $\underline{v}$ por longitud de arco, de la siguiente manera:

$$\underline{v}(s) = \underline{v}_1 + \frac{s}{|[v_1, v_2]|}(\underline{v}_2 - \underline{v}_1), \tag{3.2.18}$$

donde $s \in [0, |[v_1, v_2]|]$. Por otro lado, el vector tangente unitario de $[v_1, v_2]$ es:

$$\underline{T} = \frac{[v_2] - [v_1]}{|[v_1, v_2]|}. \tag{3.2.19}$$

Por lo tanto, la discretización de $\underline{v}^{\flat}$ sobre $[v_1, v_2]$ se plantea como:

$$\int_{[v_1,v_2]} \underline{v}^{\flat}(\underline{T}),$$

y, por la Ecuación (2.3.4):

$$\int_{[v_1,v_2]} \underline{v}^{\flat}(\underline{T}) = \int_{[v_1,v_2]} \langle \underline{v}, \underline{T} \rangle.$$

Empleando la Ecuación (3.2.18), se tiene:

$$\int_{[v_1,v_2]} \underline{v}^{\flat}(\underline{T}) = \int_0^{|[v_1,v_2]|} \{\langle \underline{v}_1, \underline{T} \rangle + \langle \frac{s}{|[v_1, v_2]|}(\underline{v}_2 - \underline{v}_1), \underline{T} \rangle\} ds,$$

y, por lo tanto:

$$\int_{[v_1,v_2]} \underline{v}^{\flat}(\underline{T}) = \langle \underline{u}_1, \underline{T} \rangle s \Big|_0^{|[v_1,v_2]|} + \langle \frac{\underline{v}_2 - \underline{v}_1}{|[v_1, v_2]|}, \underline{T} \rangle \frac{s^2}{2} \Big|_0^{|[v_1,v_2]|},$$

ahora, considerando la Ecuación (3.2.19), la expresión anterior se simplifica a:

$$\int_{[v_1,v_2]} \underline{v}^\flat(\underline{T}) = \langle \frac{\underline{v}_1 + \underline{v}_2}{2}, [v_2] - [v_1] \rangle = \underline{\tilde{v}}_1^\flat, \tag{3.2.20}$$

y, de manera similar, para las demás aristas:

$$\int_{[v_2,v_3]} \underline{v}^\flat(\underline{T}) = \langle \frac{\underline{v}_2 + \underline{v}_3}{2}, [v_3] - [v_2] \rangle = \underline{\tilde{v}}_2^\flat, \tag{3.2.21}$$

$$\int_{[v_3,v_1]} \underline{v}^\flat(\underline{T}) = \langle \frac{\underline{v}_3 + \underline{v}_1}{2}, [v_1] - [v_3] \rangle = \underline{\tilde{v}}_3^\flat, \tag{3.2.22}$$

donde $\underline{\tilde{v}}_1^\flat, \underline{\tilde{v}}_2^\flat$ y $\underline{\tilde{v}}_3^\flat$ son los valores discretos de $\underline{v}^\flat$ en las aristas $[v_1, v_2], [v_2, v_3]$ y $[v_3, v_1]$, respectivamente. En consecuencia, la Ecuación (3.2.6) puede reescribirse como:

$$[V - M_{2,0} D_{0,1}^T M_{1,1} \underline{\hat{v}}^\flat + K M_{2,0} D_{0,1}^T M_{1,1} D_{0,1}]\phi = q, \tag{3.2.23}$$

o bien, reacomodando los términos:

$$[V - M_{2,0} D_{0,1}^T M_{1,1} (\underline{\tilde{v}}^\flat - K D_{0,1})]\phi = q, \tag{3.2.24}$$

para su formulación local.

Finalmente, al igual que el Método de los Elementos Finitos, las matrices obtenidas de cada elemento se ensamblan en una matriz global, para la formulación del sistema de ecuaciones correspondiente.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Pruebas Numéricas

Para las siguientes pruebas numéricas, se considero un dominio rectangular de dimensiones 10×5, con las siguientes características (Ver Figura 4.1):

- Constante de difusión $K = 1$.
- Término fuente $q = 1$ en un disco de radio 0,4 y centro en $(1, 2{,}5)$.
- Condiciones de frontera Dirichlet $\phi = 0$ en las fronteras izquierda, superior e inferior.
- La frontera derecha se consideró libre de condiciones de frontera.

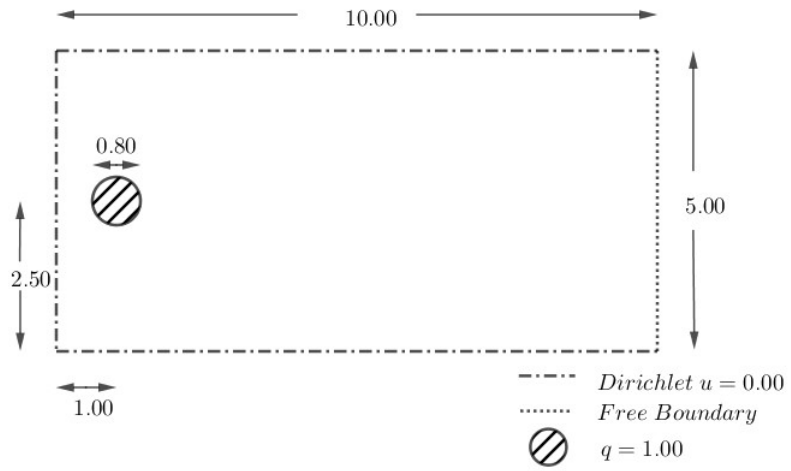


Figura 4.1: Dominio considerado para las pruebas numéricas

Se consideraron, además, distintas mallas que varían de gruesas (*i.e.* con poca cantidad de elementos) a finas, las cuales se muestran en la Figura 4.2. Las pruebas numéricas se dividieron considerando la velocidad de partícula $\underline{v}$ variable y constante.

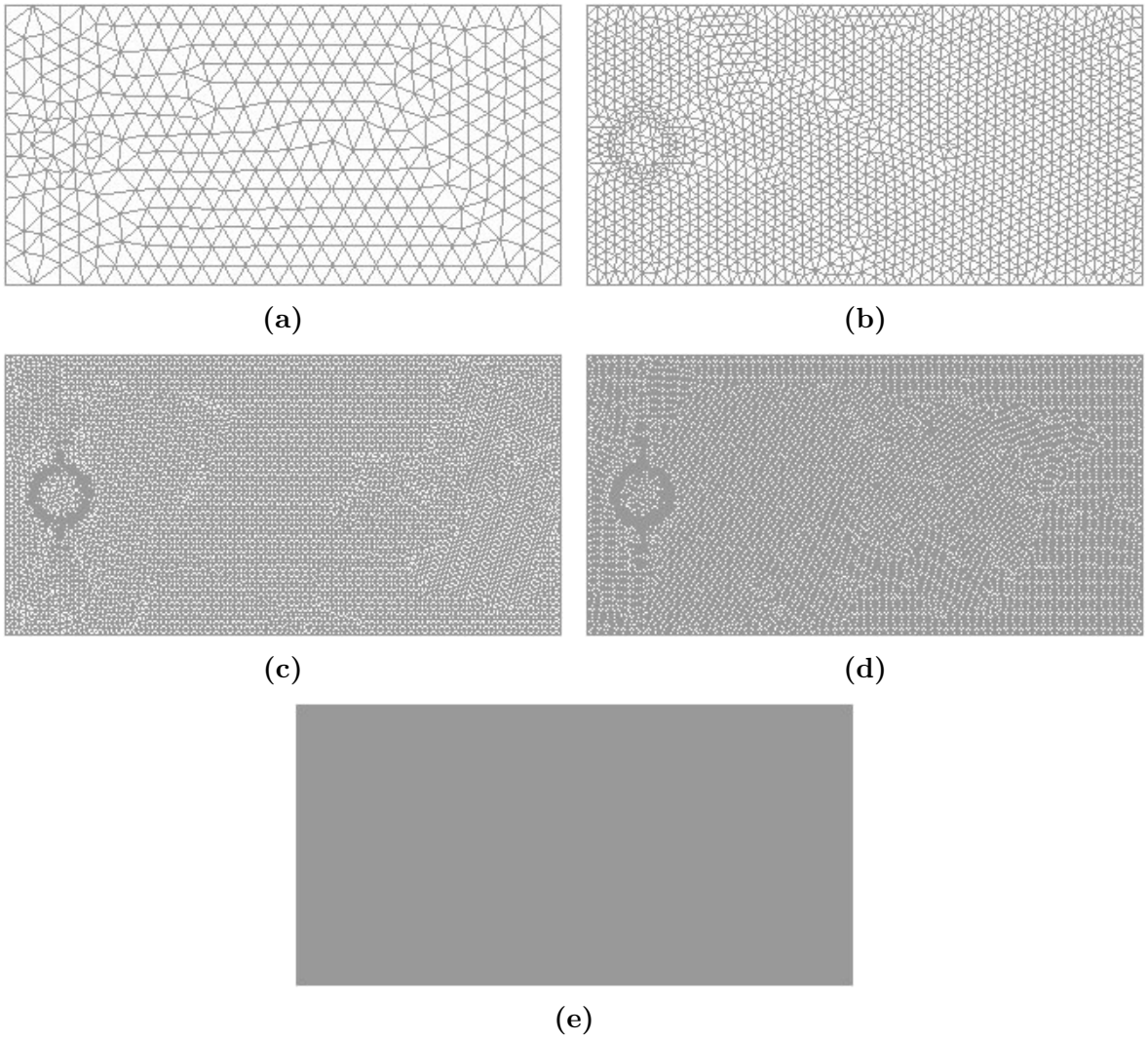


Figura 4.2: Mallas empleadas para las pruebas numéricas

Los resultados presentados a continuación corresponden a la aplicación de la Ecuación de Convección - Difusión a un problema de transporte de calor.

4.1.1 Velocidad de Partícula Constante

En este ejemplo, consideramos el problema con la velocidad de partícula constante $\underline{v} = (10, 0)$. La Figura 4.3 muestra la distribución espacial de temperatura obtenida con DEC para este problema, empleando la malla más fina (Figura 4.2e).

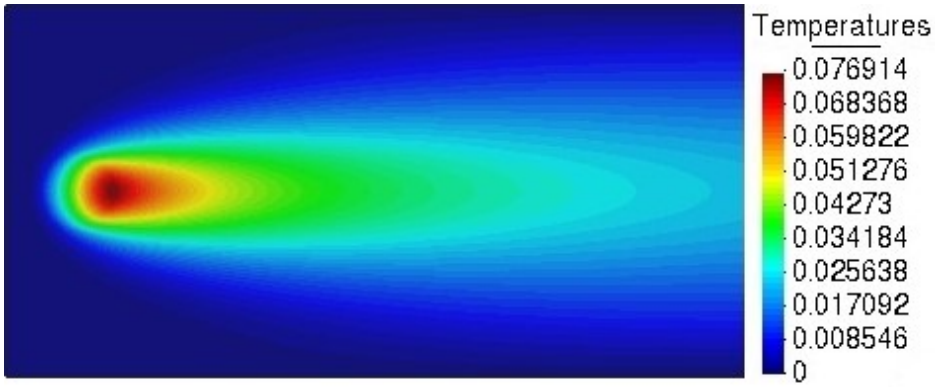


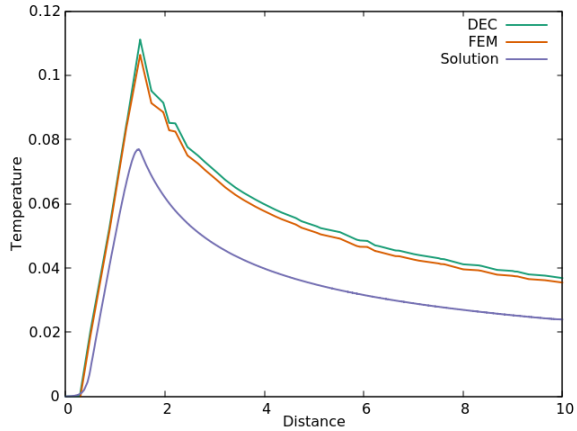
Figura 4.3: Distribución de temperaturas obtenido con DEC con velocidad de partícula constante

El siguiente cuadro muestra los resultados obtenidos para el máximo valor de la función ϕ, además de una comparación con el método de los Elementos Finitos con funciones de interpolación lineales (FEML).

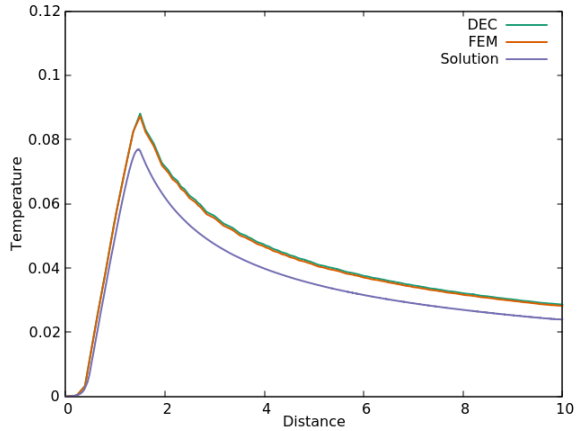
			Max. Temp. Val	
Mesh	#Elements	#Nodes	DEC	FEML
4.2a	722	703	0,11114	0,10638
4.2b	2900	1526	0,088065	0,087268
4.2c	11574	5938	0,080251	0,080145
4.2d	18078	9228	0,07931	0,07937
4.2e	1152106	577554	0,076914	0,076914

Cuadro 4.1: Cuadro de resultados para velocidad de partícula constante y comparación con FEML.

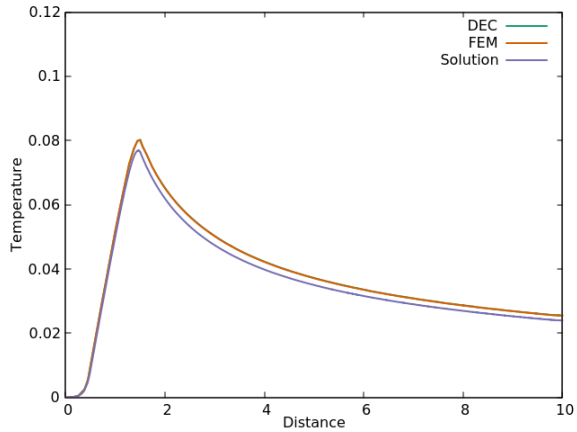
Como se puede observar en el cuadro anterior, DEC y FEML se comportan de manera similar con mallas gruesas, y converge a la misma solución con mallas finas. La Figura 4.4 muestra los valores de temperatura a lo largo de una sección horizontal en el centro del dominio para cada una de las mallas, respectivamente. Se pueden observar oscilaciones en la solución con mallas gruesas (Figuras 4.4a y 4.4b) que se deben a la inestabilidad que presentan ambos métodos numéricos cuando se tiene convección dominante.



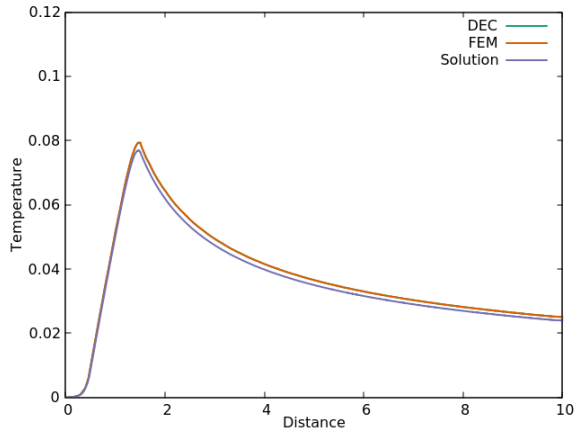
(a) Malla 4.2a



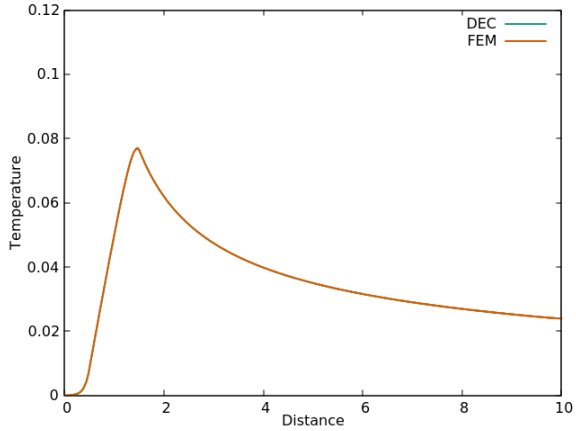
(b) Malla 4.2b



(c) Malla 4.2c



(d) Malla 4.2d



(e) Malla 4.2e

Figura 4.4: Valores de temperatura para cada malla a lo largo de una sección horizontal en el centro del dominio.

4.1.2 Velocidad de Partícula Variable

Para este ejemplo, se considera una velocidad de partícula variable en el espacio $\underline{v} = (x, \sin x)$, con una constante de difusión $K = 0{,}5$. Como en el caso anterior, el siguiente cuadro muestra los valores máximos de temperatura obtenidos con DEC, y se realiza una comparación con aquellos obtenidos con FEML, para todas las mallas.

			Max. Temp. Val	
Mesh	#Elements	#Nodes	DEC	FEML
4.2a	722	703	0,54571	0,52831
4.2b	2900	1526	0,43644	0,43356
4.2c	11574	5938	0,40118	0,4012
4.2d	18078	9228	0,39562	0,39717
4.2e	1152106	577554	0,3833	0,3833

Cuadro 4.2: Cuadro de resultados para velocidad de partícula variable y comparación con FEML

La Figura 4.5 muestra la distribución de temperaturas obtenidas para este problema, empleando la malla 4.2e.

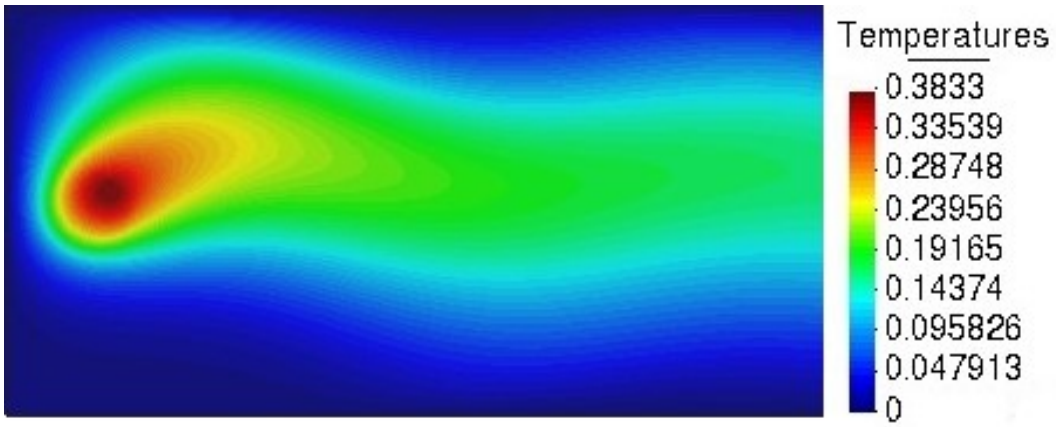
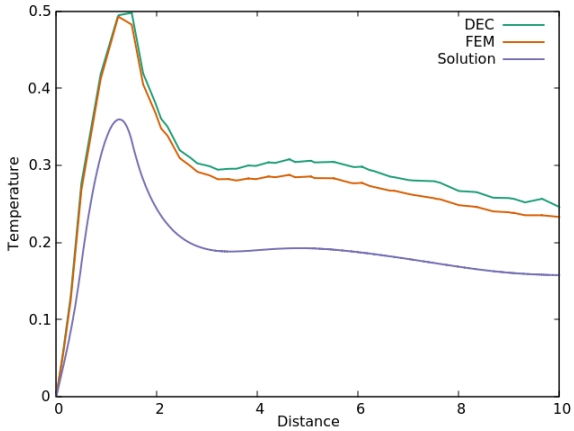
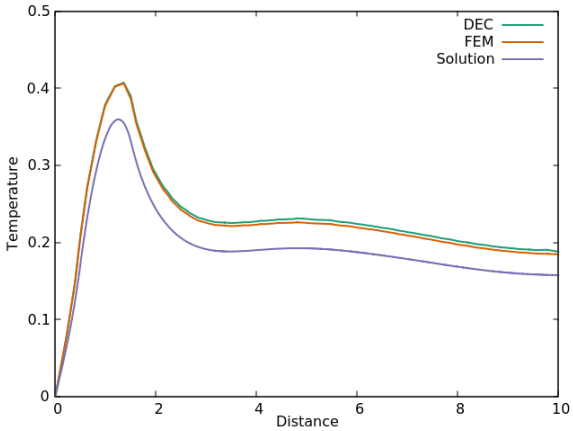


Figura 4.5: Distribución de temperaturas obtenida con DEC para velocidad de partícula variable

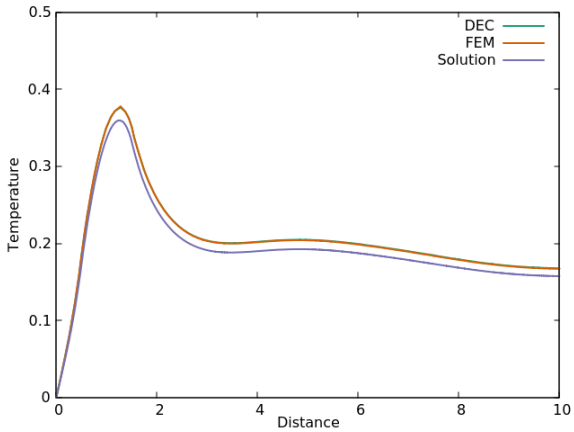
Como se puede observar en el Cuadro 4.2, al igual que en el caso anterior, DEC y FEML se comportan de manera similar para mallas gruesas, y convergen a la misma solución empleando mallas finas. La Figura 4.6 muestra los valores de temperatura a lo largo de una sección horizontal en el centro del dominio para cada malla. Se pueden observar oscilaciones en la solución con mallas gruesas.



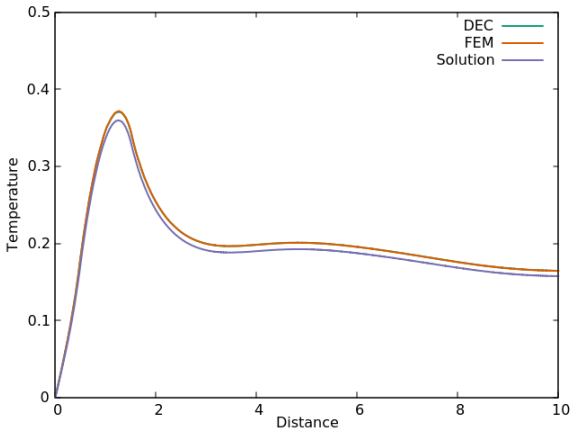
(a) Malla 4.2a



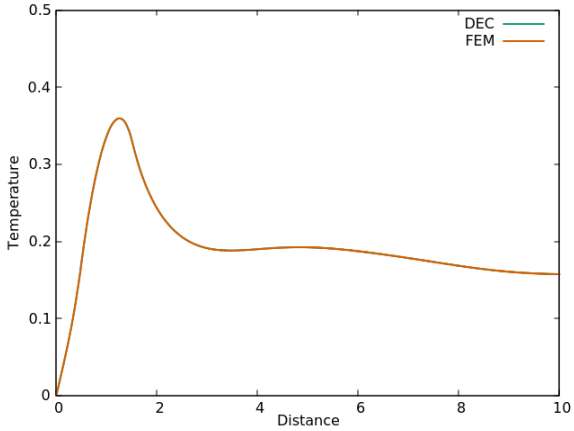
(b) Malla 4.2b



(c) Malla 4.2c



(d) Malla 4.2d



(e) Malla 4.2e

Figura 4.6: Valores de temperatura para cada malla a lo largo de una sección horizontal en el centro del dominio con velocidad de partícula variable.

Capítulo 5

Conclusiones

La formulación de modelos matemáticos se basa en la traducción de los principios de conservación de energía, masa y momento a expresiones matemáticas (Mercer y Faust 1980). Posteriormente, la incorporación de información científica y tecnológica, usualmente en términos de ecuaciones constitutivas, permite establecer relaciones entre las variables involucradas en el modelo, para obtener una expresión que permita predecir el comportamiento de un sistema físico.

La Ecuación de Convección - Difusión describe el transporte de un campo escalar (como el calor o la masa) debido a procesos de transporte conocidos como advección y difusión. En esta tesis se desarrolló esta ecuación mediante la descripción del modelo matemático de transporte de soluto en fluidos libres, mismo que se obtuvo a partir de una formulación axiomática basada en el balance de propiedades extensivas e intensivas involucradas en el sistema físico.

La resolución del modelo matemático se llevó a cabo empleando un método numérico conocido como *Cálculo Exterior Discreto* (DEC), basado en, como su nombre lo indica, la discretización de la teoría del Cálculo Diferencial Exterior. Debido a que DEC es un método numérico relativamente nuevo, es necesario investigar su desempeño al resolver una variedad de ecuaciones diferenciales, así como proponer métodos de discretización de los términos involucrados.

La discretización con DEC del término difusivo, cuando el medio es homogéneo e isótropo, está bien entendido y documentado. Sin embargo, esto no sucede así con el término convectivo. En esta tesis, se propuso una discretización local de este término, para flujo compresible e incompresible, considerando la velocidad de partícula discretizada en los nodos, en un problema $2-$dimensional en el plano. La importancia de esta propuesta radica en el manejo de campos vectoriales, que suelen ser calculados en los nodos mediante modelos matemáticos como el de Flujo de Fluidos en Medios Porosos.

Los resultados muestran un comportamiento similar al del método de los Elementos Finitos con funciones de interpolación lineal (FEML) para mallas gruesas, mientras que para mallas finas, ambos métodos convergen a la misma solución. Las oscilaciones en la solución cuando el problema involucra convección dominante está presente en la solución obtenida con DEC, por lo que, al igual que FEML, es necesario incorporar técnicas de estabilización.

Al ser una formulación local, DEC puede ser implementado computacionalmente de manera eficiente y, al igual que FEML, se puede aprovechar el cómputo paralelo para la resolución de problemas de gran escala. Sin embargo, la ventaja del desarrollo de DEC radica en la resolución de problemas que involucran espacios curvos.

Como una continuación de este trabajo, se tiene previsto el planteamiento de la discretización de la Ecuación de Convección - Difusión presentada en esta tesis sobre espacios curvos.

Apéndice

Apéndice A

El Teorema de la Divergencia Generalizado

Para el siguiente desarrollo, Ω denota un dominio de un espacio euclidiano en $\mathbb{R}^n$. Las particiones de Ω se denotan como $\{\Omega_1, \Omega_2, ..., \Omega_n\}$, como se muestra en la Figura A.1. Los símbolos $\partial\Omega$ y $\partial\Omega_\alpha$ denotan la frontera externa de Ω y la frontera de la partición Ω_α, respectivamente.

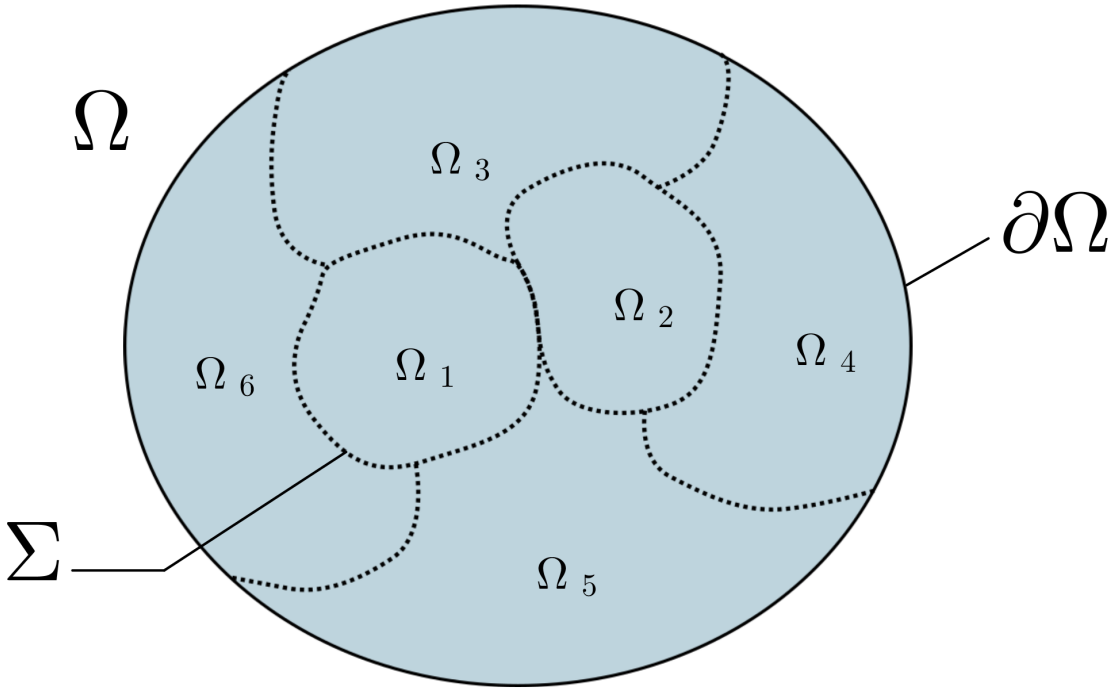


Figura A.1: Partición de un dominio Ω

El símbolo Σ denota la frontera interior *orientada* de Ω, por lo tanto, se tiene que:

$$\begin{aligned} &\Sigma_{i,j} \equiv \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j, \\ &\text{y} \\ &\Sigma \equiv \bigcup_{i\neq j} \Sigma_{i,j}. \end{aligned} \tag{A.0.1}$$

Se asume, además, que en cada punto de la frontera exterior e interior de Ω, existe un vector normal unitario $\underline{n}$, que apunta al exterior en $\partial\Omega$ y al lado positivo en Σ.

Para un campo vectorial continuo a trozos $\underline{v}$, definido sobre Ω, podemos escribir el *Teorema de la Divergencia* como:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{v} d\underline{x} = \sum_{\alpha=1}^{n} \int_{\Omega_\alpha} \nabla \cdot \underline{v} d\underline{x} = \sum_{\alpha=1}^{n} \int_{\partial\Omega_\alpha} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x}, \tag{A.0.2}$$

ahora, considerando que:

$$\partial\Omega_\alpha = (\Sigma \cap \partial\Omega_\alpha) \cup (\partial\Omega_\alpha - (\Sigma \cap \partial\Omega_\alpha)), \tag{A.0.3}$$

la integral sobre $\partial\Omega_\alpha$ de la ecuación (A.0.2), se puede reescribir como:

$$\sum_{\alpha=1}^{n} \int_{\partial\Omega_\alpha} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} = \sum_{\alpha=1}^{n} \{ \int_{\Sigma\cap\partial\Omega_\alpha} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\partial\Omega_\alpha - (\Sigma\cap\partial\Omega_\alpha)} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} \}, \tag{A.0.4}$$

y, por la ecuación (A.0.1):

$$\sum_{\alpha=1}^{n} \int_{\partial\Omega_\alpha} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \int_{\Sigma_{i,j}} \underline{v}_{i,j} \cdot \underline{n}_{i,j} d\underline{x} + \sum_{\alpha=1}^{n} \int_{\partial\Omega_\alpha - (\Sigma\cap\partial\Omega_\alpha)} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x}. \tag{A.0.5}$$

Ahora, para dos particiones opuestas Ω_i y Ω_j, se tiene que (Ver Figura (A.2)):

$$\underline{v}_{i,j} \neq \underline{v}_{j,i}, \quad \text{y} \quad \underline{n}_{i,j} = -\underline{n}_{j.i}. \tag{A.0.6}$$

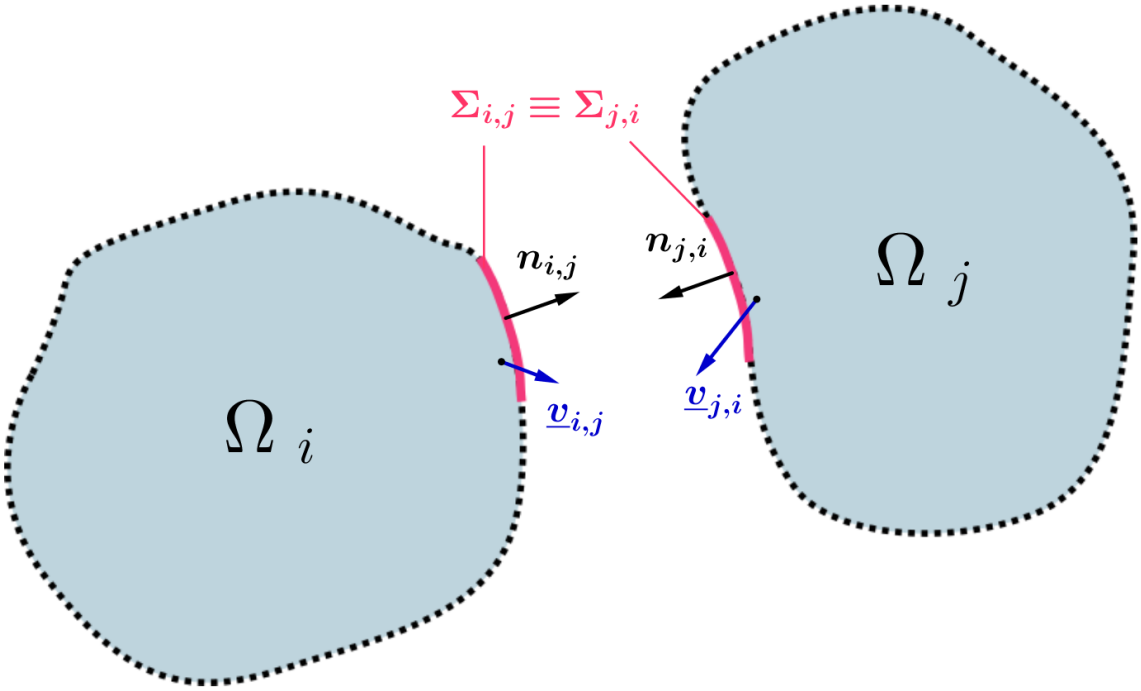


Figura A.2: Particiones opuestas de Ω.

En consecuencia, podemos agrupar las integrales sobre la misma interfase de la siguiente forma:

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\int_{\Sigma_{i,j}} \underline{v}_{i,j}\cdot\underline{n}_{i,j}d\underline{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\int_{\Sigma_{i,j}\equiv\Sigma_{j,i}} (\underline{v}_{i,j}\cdot\underline{n}_{i,j} + \underline{v}_{j,i}\cdot\underline{n}_{j,i})d\underline{x}. \tag{A.0.7}$$

Empleando la definición del salto de $\underline{v}_{i,j}$ a través de $\Sigma_{i,j}$:

$$[\![\underline{v}]\!]_{\Sigma_{i,j}} = \underline{v}_{i,j} - \underline{v}_{j,i}, \tag{A.0.8}$$

podemos escribir:

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\int_{\Sigma_{i,j}} (\underline{v}_{i,j}\cdot\underline{n}_{i,j} + \underline{v}_{j,i}\cdot\underline{n}_{j,i})d\underline{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\int_{\Sigma_{i,j}} [\![\underline{v}]\!]\cdot\underline{n}_{i,j}d\underline{x}. \tag{A.0.9}$$

Considerando nuevamente la ecuación (A.0.1), la ecuación (A.0.2) y, debido a que:

$$\sum_{\alpha=1}^{n}\int_{\partial\Omega_\alpha-(\Sigma\cap\partial\Omega_\alpha)} \underline{v}\cdot\underline{n}d\underline{x} = \int_{\partial\Omega}\underline{v}\cdot\underline{n}d\underline{x}, \tag{A.0.10}$$

llegamos al siguiente teorema:

Teorema A.0.1 (**Teorema de la Divergencia Generalizado**). *Sea Ω un dominio de un espacio euclidiano n-dimensional.*
Sea $\underline{v}(x_1, x_2, ...x_n) = (v_1(x_1, x_2, ..., x_n), ..., v_n(x_1, x_2, ..., x_n))$ una función vectorial continua a trozos junto con sus primeras derivadas parciales en Ω, entonces:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{v} d\underline{x} = \int_{\partial\Omega} \underline{v} \cdot \underline{n} d\underline{x} + \int_{\Sigma} [\![\underline{v}]\!] \cdot \underline{n} d\underline{x}. \tag{A.0.11}$$

Bibliografía

1. Crane, K. y col. (2013). "Digital Geometry Processing with Discrete Exterior Calculus". En: SIGGRAPH '13.

2. Esqueda, H., Herrera, R. y Botello, S. (2019). "A Geometric Description of Discrete Exterior Calculus for General Triangulations". En: *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería* 35.1. URL: https://www.scipedia.com/public/Herrera_et_al_2018b.

3. Griebel, M., Rieger, C. y Schier, A. (2017). "Upwind Schemes for Scalar Advection-Dominated Problems in the Discrete Exterior Calculus". En: *Bothe D., Reusken A. (eds) Transport Processes at Fluidic Interfaces. Advances in Mathematical Fluid Mechanics. Birkhäuser, Cham*, págs. 145-175. URL: https://link.springer.com/chapter/10.1007%5C%2F978-3-319-56602-3_6.

4. Herrera, I. y Pinder, G. (2012). *Mathematical Modeling in Science and Engineering. An Axiomatic Approach.* First. John Wiley & Sons, Inc.

5. Herrera, I., Carrillo, A. y Yates, R. (2008). *Método de Elementos Finitos.* URL: http://www.mmc.igeofcu.unam.mx/.

6. Hirani, A. N. (2003). "Discrete Exterior Calculus". Tesis doct. California Institute of Technology.

7. Hirani, A., Nakshatrala, K. y Chaudhry, J. (2008). "Numerical Method for Darcy Flow Derived Using Discrete Exterior Calculus". En: *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mech* 16. DOI: 10.1080/15502287.2014.977500.

8. Mercer, J. W. y Faust, C. R. (1980). "Ground-Water Modeling: Mathematical Models". En: *Ground Water* 18.3, págs. 212-222.

9. Mohamed, M., Hirani, A. y Samtaney, R. (2016). "Discrete Exterior Calculus of Incompressible Navier - Stokes Equations Over Surface Simplicial Meshes". En: *Journal of Computational Physics* 312, págs. 175-191. URL: https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.02.028.