

**CC70Q Solución computacional y mallas para ecuaciones
diferenciales parciales**

5UD (1.5,0, 3.5) AD

Semestre 2003/1

Profesores: María Cecilia Rivara
Bruce Simpson
Nancy Hitschfeld

Curso interdisciplinario orientado a alumnos de magister y doctorado de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas.

Objetivos

- Familiarizar a los alumnos con el lenguaje interdisciplinario y los conceptos involucrados en la solución computacional de problemas prácticos modelados por ecuaciones diferenciales parciales en ingeniería y ciencias aplicadas.
- Introducir a los alumnos a los métodos de elementos finitos y volúmenes finitos desde el punto de vista de la computación científica.
- Introducir a los alumnos a la construcción de software para resolver problemas complejos de EDPs, incluyendo la generación, manejo y modificación interactivo-adaptiva de las mallas y métodos para arquitecturas paralelas.

Temario

1. Introducción a algunas ecuaciones diferenciales parciales y problemas asociados. membranas, electrostática, conducción térmica, acústica, flujos irrotacionales, convección, Navier Stokes, sistemas.
Introducción al método de elementos finitos: minimización de la energía.
Método de Galerkin: Elementos finitos de primer orden: triangulación, interpolación, fórmula de cuadraturas. Solución de la ecuación de Laplace con condiciones de borde de Dirichlet.
2. Método de Elementos Finitos: formulación variacional y métodos directos para el sistema de ecuaciones lineales. Construcción de la matriz del sistema; solución del sistema lineal mediante factorización de Choleski.
3. Mallas geométricas para discretizar objetos. Mallas de polígonos y triangulaciones. Triangulación de Delaunay y diagrama de Voronoi. Modelación computacional de las mallas. Estructuras de datos. Mallas en 3D.
4. Algoritmos de mejoramiento y refinamiento de mallas. Medidas de la calidad de las mallas. Triangulación automática con algoritmos tipo Delaunay. Algoritmos de refinamiento para método adaptivos de elementos finitos.
5. Introducción al método de volúmenes finitos Teorema de Green, ecuación de calor estacionario, formas débiles de la EDP.
Celdas de Voronoi como volúmenes finitos, celdas del borde.
Discretización de la forma débil de la EDP; ley de conservación física en el modelo
Ensamblaje del sistema lineal de ecuaciones.
Interfaces, funciones de flujo, funciones fuentes, datos del borde.

6. Representación de datos y mallas anisotrópicas. Aproximación de los datos, interpolación, mínimas cuadradas continuas, método de volúmenes finitos para la ecuación de Poisson. Mallas ópticas, anisotrópicas, control de la anisotropía, Métrica de Riemann, celdas de Delaunay y Voronoi en diferentes métricas.
7. Algoritmos de generación de mallas mixtas y triangulaciones para el método de volumen finito en 2 y 3D. Formulación discreta de las ecuaciones y su relación con el diagrama de Voronoi en mallas mixtas. Uso de mallas anisotrópicas.
8. Aspectos computacionales avanzados. Método de elementos finitos para problemas elípticos generales, condiciones de borde de Neumann, condiciones de borde mixtas, elementos finitos de segundo orden, problema de Stokes. Cálculo adaptivo de la solución numérica. EDP no lineales o no simétricas. Problemas de evolución.
9. Software de mallas orientado a objetos. Mallas de Delaunay, aplicación a mallas de superficie.
10. Algoritmos para cálculo paralelo. Particionamiento de la malla, técnicas de subdivisión del dominio. Algoritmos paralelos para mallas. Paralelización del método del gradiente conjugado.

Metodología y evaluación: clases expositivas, lectura de material complementario, tareas, uso de software, desarrollo de pequeños proyectos

Evaluación: controles 50%, tareas 50%.

Bibliografía:

Brigitte Lucquin and Oliver Pironneau, Introduction to Scientific Computing, John Wiley & Sons, Chichester, 1998.

M.C. Rivara, Design and data structure of fully adaptive multigrid, finite element software, ACM Trans. On Mathematical Software, 10(1984), 242-264.

M.C. Rivara, New longest-edge algorithms for the refinement and / or improvement of unstructured triangulations, Int. J. For Numerical Methods in Engrg, 40(1997), 3313-3324.

N. Hitschfeld, P. Conti and W. Fichtner: Mixed Elements Trees: A Generalization of Modified Octrees for the Generation of Meshes for the Simulation of Complex 3-D Semiconductor Devices. IEEE Trans. on CAD/ICAS, vol.~12, No.~11, pp: 1714-1725, November 1993.

N. Hitschfeld, M. C. Rivara: Automatic construction of nonobtuse boundary and/or interface Delaunay triangulation for control volume methods. International Journal in Numerical Methods for Engineering, Volumen 55, pp:803-816, 2002.

W. Fichtner and D. J. Rose and R. E. Bank Semiconductor Device Simulation IEEE Trans. on El. Dev. ED-30, n-9, pp:1018-1030, 1983.