



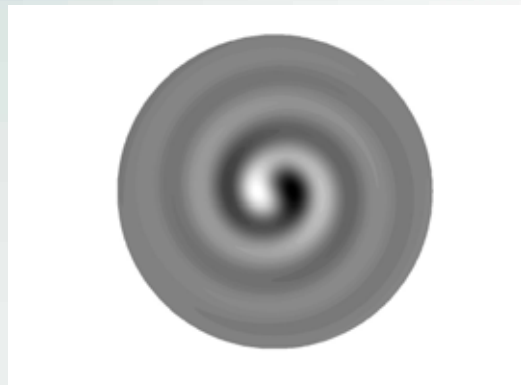
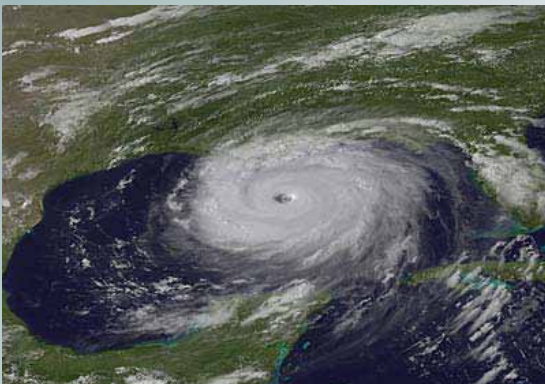
Universidad de Granada
Universidad de Málaga

Master Física y Matemáticas (FisyMat)

ANÁLISIS NUMÉRICO DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES

Ciudad Real, 12-16 de febrero
de 2007

- Reduced basis element. **Yvon Maday** (Paris VI)
- Level sets. **Antonio Marquina** (U. Valencia)
- Simulación sistema sanguíneo. **Miguel Fernández** (Paris VI)
- Volúmenes finitos. **Carlos Parés** (U. Málaga)
- Elementos finitos. **Manuel J. Castro** (U. Málaga)
- Diferencias finitas y espectrales. **Henar Herrero** (UCLM) y **Sergio Hoyas** (UPV)



ANÁLISIS NUMÉRICO DE ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES

PROFESORES: Carlos Parés, José María Gallardo, Henar Herrero, Manuel J. Castro, Sergio Hoyas, Miguel Fernández, Antonio Marquina, Yvon Maday

LUGAR: El Curso se impartirá en el campus de Ciudad Real de la Universidad de Castilla-La Mancha. La parte teórica en el aula formación PAS/PDI del edificio CTIC y la práctica en el aula de ordenadores de la ETSI Industriales en el edificio Politécnico de Ciudad Real. Los seminarios en el salón de actos de la Facultad de Ciencias Químicas.

OBJETIVOS: El curso tiene el carácter de introducción a la resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales de los distintos tipos (elípticas, parabólicas e hiperbólicas) mediante métodos de diferencias finitas, elementos finitos, volúmenes finitos, espectrales y 'level sets'. Se realizarán unas prácticas implementando códigos en lenguajes de programación sencillos y otras basadas en el uso de software científico que permita, mediante dichos métodos, resolver completamente algunos problemas representativos.

CONTENIDOS

Tema 1. Diferencias finitas

1. Problemas de contorno.
2. Problemas de evolución parabólicos.
3. Cuestiones complementarias.
4. Prácticas.

Tema 2. Métodos espectrales

1. Aproximación de Fourier.
2. Aproximación de polinomios ortogonales.
3. Prácticas.

Tema 3. Elementos finitos

- 3.1. Formulación y análisis de error.
- 3.2. Implementación efectiva.
- 3.3. Prácticas.

Tema 4. Volúmenes finitos y diferencias finitas

- 4.1 Diferencias finitas para problemas de evolución hiperbólicos.
- 4.2. Formulación y análisis de error.
- 4.3. Implementación efectiva.
- 4.4. Prácticas.

Tema 5. Seminario de invitados

- 6.1. Reduced basis element method (Yvon Maday)
- 6.2. Level sets method (Antonio Marquina)
- 6.3. Simulación del sistema sanguíneo (Miguel Fernández)

HORARIO

LUNES 12

9:30-11:30 Diferencias finitas (teoría). Prof. Henar Herrero (Aula PAS/PDI CTIC)
12:00-14:00 Diferencias finitas (teoría). Prof. Henar Herrero (Aula PAS/PDI CTIC)
16:30-19:30 Prof. Sergio Hoyas. Avances en mecánica de fluidos computacional (Salón de actos Facultad de Químicas)

MARTES 13

9:30-11:30 Métodos espectrales (teoría). Prof. Henar Herrero (Aula PAS/PDI CTIC)
12:00-14:00 Métodos espectrales (teoría). Prof. Henar Herrero (Aula PAS/PDI CTIC)

16:30-19:30 Métodos espectrales (práctica). Prof. Henar Herrero (Aula informática Industriales)

MIÉRCOLES 14

9:30-11:30 Elementos finitos (teoría). Prof. Manuel Castro (Aula PAS/PDI CTIC)

12:00-14:00 Elementos finitos (teoría). Prof. Manuel Castro (Aula PAS/PDI CTIC)

16:30-19:30 Elementos finitos (práctica). Prof. Manuel Castro (Aula informática Industriales)

JUEVES 15

9:00-11:30 Level sets. Prof. Antonio Marquina (Salón de actos Facultad de Químicas)

12:00-14:30 Reduced basis element. Methodes d'approximation variationnelles en bases reduites. Prof. Yvon Maday (Salón de actos Facultad de Químicas)

16:30-19:30 Volúmenes finitos (teoría). Prof. Carlos Parés (Salón de actos Facultad de Químicas)

VIERNES 16

9:30-10:30 Volúmenes finitos (teoría). Prof. Carlos Parés (Salón de actos Facultad de Químicas)

11:00-14:00 Simulación del sistema sanguíneo. Fluid-structure interaction in blood flows simulations: numerical issues. Prof. Miguel Fernández (Salón de actos Facultad de Químicas)

16:30-19:30 Volúmenes finitos (práctica). Prof. Carlos Parés (Aula informática Industriales)

BIBLIOGRAFÍA

2. J. C. Strikwerda, *Finite difference Schemes and Partial Differential*, Pacific Grove, CA: Wadsworth and Brooks, 1989.
3. G.D. Smith, *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods (3rd ed.)*. Oxford University Press. 1985.
4. G.F.Forsythe, W.R.Wasow, *Finite difference methods for partial differential equations*, John Wiley, New York, 1960.
5. D.F.Griffiths, A.R.Mitchell, *The finite difference method in partial differential equations*, John Wiley, Chichester, 1980.
6. R.B. Richtmyer, K.W. Morton, *Difference methods for initial-value problems*, John Wiley & Sons, 1967.
7. L.N. Trefethen, *Spectral methods in Matlab*, SIAM, Philadelphia, 2000.
8. C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni and T.A. Zang, *Spectral Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 1988.
9. D. Gotlieb and S. Orszag, *Numerical Analysis of Spectral Methods –Theory and Applications*, CBMS-SIAM No. 26, Philadelphia, 1977.
10. R.G. Voigt, D. Gotlieb and M.Y. Hussaini, *Spectral Methods for Partial Differential Equations*, SIAM, Philadelphia, 1984.
11. J.M. Sanz-Serna, *Fourier techniques in numerical methods for evolutionary problems*. 3RD Granada Seminar on Computational Physics, Granada, Spain, 1994, Edited by Springer-Verlag, 1995.
12. C. Bernardi and Y. Maday, *Approximations spectrales de problemes aux limites elliptiques*. Springer-Verlag, Paris, 1992.
13. Ph.G.Ciarlet, *The finite element method for elliptic problems*. North Holland, Amsterdam, 1978.
14. O.C. Zienkiewicz, *The Finite Element Method in Engineering Science*, McGraw-Hill, London, 1971.

15. C. Johnson, *Numerical solution of P.D.E. by the Finite Element Method*, Cambridge University Press, 1987.
16. E. Godlewski, P.A. Raviart, *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, Springer-Verlag, New York, 1996.
17. R. LeVeque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Cambridge University Press, 2002.
18. E. Godlewski, P.A. Raviart, *Hyperbolic systems of conservation laws*, Ellipses, 1991.
19. J.H. Mathews, K.D. Fink, *Métodos Numéricos con MATLAB*, Prentice-Hall, 2000.
20. S. Nakamura, *Análisis Numérico y visualización gráfica con MATLAB*, Pearson Educación/Prentice-Hall Hispanoamericana, 1997.
21. A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, 2000.
22. P.A. Raviart, J.M. Thomas, *Introduction à l'Analyse Numérique des équations aux dérivées partielles*, Masson, Paris, 1983.

METODOLOGÍA

Explicación teórica de cuatro horas por cada uno de los temas 1-4.

Resolución práctica de problemas en el ordenador (tres horas por cada tema).

Asistencia a tres seminarios que tienen una estructura de 1,5h básico y 1h avanzado sobre temas relacionados con el curso.

Realización de un trabajo personal en relación con el curso.

Revisión bibliográfica de antecedentes, metodología y recursos y elaboración de un posible trabajo de investigación.

EVALUACIÓN

Prácticas de laboratorio (aprovechamiento, iniciativa, habilidades) y el trabajo personal tutelado servirán la evaluación de la asignatura.

RESUMENES

Sergio Hoyas (Laboratorio de dinámica de fluidos computacional, ETSI Aero-náuticos, UPM y Departamento de Informática, U. de Valencia.)

Simulaciones numéricas directas en turbulencia de pared: una visión global

Uno de los principales problemas abiertos de la mecánica de fluidos es el problema de la turbulencia de pared. Aparte de su interés científico, la turbulencia de pared es muy importante desde un punto de vista industrial, ya que es la capa de transición entre el fluido adyacente y un vehículo móvil o entre un flujo y la tubería o el canal que lo contienen. También es un ingrediente fundamental de la capa límite turbulenta atmosférica, responsable de la dispersión de agentes químicos en la atmósfera. Para contribuir al estudio de este problema, hemos realizado una simulación numérica directa (DNS) de un canal turbulento a número de Reynolds de fricción $Re_{\tau}=2000$, más del doble del mayor disponible hasta la fecha en una caja computacional de nuestro tamaño. En este tipo de simulaciones, se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes con sus respectivas condiciones de contorno, discretizándolas de manera tan fina como sea posible para resolver todas las escalas relevantes del flujo. En nuestro caso, hemos usado una discretización espacial Fourier-Diferencias finitas compactas-Fourier, con un mallado de (6144,633,4608), es decir $2e^{10}$ puntos. En cuanto a la discretización temporal, hemos optado por un Runge-Kutta de orden 3. Salvo las rutinas de FFT, todo el código ha sido escrito por nosotros, usando Fortran y C++ para el código y BASH para la automatización de rutinas.

Para poder llevar a cabo la simulación, se ha cambiado completamente el algoritmo clásico de resolución de este tipo de problemas, incluyendo incluso la forma de parale-

lización. Con el máximo aprovechamiento de memoria, el coste estimado de este algoritmo está en los 400 GB de memoria RAM y requiere una comunicación entre nodos altamente eficiente. Esto supone un desafío enorme, para el que hemos encontrado la respuesta de MareNostrum. Durante la fase de desarrollo de este supercomputador, hemos colaborado en su puesta a punto, usando 2048 procesadores para el cálculo de nuestro problema y 60 más para el volcado de datos a disco. Durante este tiempo hemos gastado aproximadamente 6 millones de horas de cálculo y obtenido 25TB de datos, almacenados en el Port d'informació Científica, PIC.

Además de este trabajo, actualmente estamos desarrollando una simulación de 2.5M de horas para el estudio de una capa límite turbulenta. Esta simulación requiere de técnicas numéricas más avanzadas que la del canal, y debido al mal condicionamiento de algunas matrices, es imprescindible correr gran parte del código en doble precisión.

Durante la charla explicaré brevemente la física de las dos simulaciones para centrarme principalmente en los aspectos más computacionales y numéricos desde un punto de vista global, es decir, empezando por como pensar la simulación hasta donde guardar los resultados.

Todo este trabajo se ha desarrollado en el Laboratorio de Mecánica de Fluidos Computacional de la ETSIA, dirigido por el profesor Javier Jiménez y usando como banco de pruebas el cluster del laboratorio, compuesto por 128 procesadores, siendo financiado a través de un contrato Juan de la Cierva.

Yvon Maday (Laboratoire Jacques-Louis Lions)
"Reduced basis element method"

Numerical approximation of the solution of partial differential equations plays an important role in many areas such as engineering, mechanics, physics, chemistry, biology... for computer-aided design-analysis, computer-aided decision-making or simply better understanding. The fidelity of the simulations with respect to reality is achieved through the combined efforts to derive: (i) better models, (ii) faster numerical algorithm, (iii) more accurate discretization methods and (iv) improved large scale computing resources. In many situations, including optimization and control, the same model, depending on a parameter that is changing, has to be simulated over and over, multiplying by a large factor (up to 100 or 1000) the solution procedure cost of one simulation. The reduced basis method allows to define a surrogate solution procedure, that, thanks to the complementary design of fidelity certificates on outputs, allows to speed up the computations by two to three orders of magnitude while maintaining a sufficient accuracy. We shall present the basics of this approach for linear and the extension to treat non linear elliptic and parabolic PDE's. We shall also present the numerical analysis that is currently available.

Antonio Marquina (Universidad de Valencia)
"Métodos de Conjuntos de nivel: Fundamentos teóricos y aplicaciones"

Introduciremos los fundamentos, motivación e implementación algorítmica del método de los conjuntos de nivel y alguna de sus aplicaciones principales. Estudiaremos la formulación de Hamilton-Jacobi como herramienta básica para la descripción del movimiento de interfases descritas a partir del método de los conjuntos de nivel y presentaremos aplicaciones a técnicas de restauración y segmentación de imágenes.

Miguel A. Fernández (INRIA, Paris)

***"Fluid-structure interaction in blood flows simulations:
numerical issues"***

The aim of the lecture is to give an overview of the numerical methods used in the numerical simulation of blood flows in large arteries. The first part concerns the description of the mathematical model describing the coupling between the blood flow and the artery wall. In particular, we will motivate the use of an ALE (arbitrary Lagrangian Eulerian) formulation for the fluid. In the second part, several coupling strategies will be investigated (explicit, implicit and semi-implicit). We will discuss their stability and computational properties and present numerical simulations illustrating the theoretical results.