En esta práctica se implementan varios esquemas en diferencias finitas para la ecuación de ondas no lineal $u_{tt} - u_{xx} + \gamma u^3 = 0$, con condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas y con condiciones iniciales u(x,0) = f(x) y $u_t(x,0) = g(x)$.

1. Esquema explícito. Se realizan las aproximaciones

$$u_{tt}(x_i, t_n) \approx \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2},$$
 $u_{xx}(x_i, t_n) \approx \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2},$

y se sustituyen en la ecuación, quedando

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \gamma (u_i^n)^3 = 0.$$

Multiplicando por Δt^2 y despejando.

$$u_i^{n+1} = \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{i-1}^n + \big(2 - 2\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\big) u_i^n + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} u_{i+1}^n - u_i^{n-1} - \gamma \Delta t^2 (u_i^n)^3.$$

Si N es el número de puntos de la discretización en espacio, hay que tener en cuenta en las ecuaciones i=1 e i=N-2 que $u_0^k=0$ y $u_{N-1}^k=0$ para todo $k\in\mathbb{N}\cup\{0\}$, pues en los extremos hay condiciones de Dirichlet homogéneas. Esto también se aplicará a los demás esquemas de la práctica.

Las aproximaciones u_i^0 vienen dadas por los datos iniciales, pero también es necesario conocer u_i^1 para implementar los esquemas. Para aproximar $u(x_i, \Delta t)$, se realiza el desarrollo de Taylor siguiente:

$$u(x_i, \Delta t) = u(x_i, 0) + \Delta t u_t(x_i, 0) + \frac{\Delta t^2}{2} u_{tt}(x_i, 0) + O(\Delta t^3).$$

Como $u(x_i, 0) = f(x_i), u_t(x_i, 0) = g(x_i)$ y $u_{tt}(x_i, 0) = u_{xx}(x_i, 0) - \gamma f(x_i)^3$, se obtiene

$$u(x_i, \Delta t) = f(x_i) + \Delta t g(x_i) + \frac{\Delta t^2}{2} u_{xx}(x_i, 0) - \frac{\gamma \Delta t^2}{2} f(x_i)^3 + O(\Delta t^3).$$

Y como $u_{xx}(x_i, 0) = f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{\Delta x^2}$,

$$u(x_i, \Delta t) \approx f(x_i) + \Delta t g(x_i) + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} (f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})) - \frac{\gamma \Delta t^2}{2} f(x_i)^3.$$

Por tanto,

$$u_i^1 = f(x_i) + \Delta t g(x_i) + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} (f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})) - \frac{\gamma \Delta t^2}{2} f(x_i)^3$$

$$= (1 - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}) f(x_i) + \Delta t g(x_i) + \frac{\Delta t^2}{2\Delta x^2} (f(x_{i+1}) + f(x_{i-1})) - \frac{\gamma \Delta t^2}{2} f(x_i)^3,$$

y con esto ya está bien definido el esquema. Este esquema se implementa en la función ondas_no_lineal_expl.

2. Esquema semi-implícito. Se realizan las aproximaciones

$$u_{tt}(x_i, t_n) \approx \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2},$$
 $u_{xx}(x_i, t_n) \approx \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2},$

y se sustituyen en la ecuación, quedando

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \gamma (u_i^n)^3 = 0.$$

Multiplicando por Δt^2 y reagrupando términos,

$$-\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}u_{i-1}^{n+1} + \left(1 + 2\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\right)u_i^{n+1} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}u_{i+1}^{n+1} = 2u_i^n - u_i^{n-1} - \gamma \Delta t^2(u_i^n)^3.$$

En cada iteración de tiempo hay que resolver el sistema lineal

$$\begin{pmatrix} 1+2s & -s & \cdots & 0 \\ -s & 1+2s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1+2s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-2}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2u_1^n - u_1^{n-1} - \gamma \Delta t^2 (u_1^n)^3 \\ 2u_2^n - u_2^{n-1} - \gamma \Delta t^2 (u_2^n)^3 \\ \vdots \\ 2u_{N-2}^n - u_{N-2}^{n-1} - \gamma \Delta t^2 (u_{N-2}^n)^3 \end{pmatrix},$$

donde $s = \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$. Este esquema se implementa en la función ondas_no_lineal_semi.

3. Otro esquema semi-implícito. Se realizan las aproximaciones

$$u_{tt}(x_i, t_n) \approx \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2},$$

$$u_{xx}(x_i, t_n) \approx \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2},$$

$$u(x_i, t_n)^3 \approx \frac{1}{4} ((u_i^{n+1})^3 + (u_i^{n+1})^2 u_i^{n-1} + u_i^{n+1} (u_i^{n-1})^2 + (u_i^{n-2})^3),$$

y se sustituyen en la ecuación, quedando

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{\gamma}{4} ((u_i^{n+1})^3 + (u_i^{n+1})^2 u_i^{n-1} + u_i^{n+1} (u_i^{n-1})^2 + (u_i^{n-2})^3) = 0.$$

Multiplicando por Δt^2 ,

$$u_i^{n+1} + \frac{\gamma \Delta t^2}{4} ((u_i^{n+1})^3 + (u_i^{n+1})^2 u_i^{n-1} + u_i^{n+1} (u_i^{n-1})^2 + (u_i^{n-2})^3)$$
$$-2u_i^n + u_i^{n-1} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) = 0.$$

Para cada $i=1,2,\ldots,N-2,$ u_i^{n+1} debe ser solución de la ecuación F(x)=0, siendo

$$F(x) = x + \frac{\gamma \Delta t^2}{4} (x^3 + u_i^{n-1} x^2 + (u_i^{n-1})^2 x + (u_i^{n-2})^3) - 2u_i^n + u_i^{n-1} - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n).$$

Derivando,

$$F'(x) = 1 + \frac{\gamma \Delta t^2}{4} (3x^2 + 2u_i^{n-1}x + (u_i^{n-1})^2).$$

Para hallar una solución de F(x) = 0, se construye la sucesión $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ de la siguiente manera:

$$x_0 = 0,$$

 $x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{F'(x_k)}, \qquad k \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$

Cuando un término de la sucesión verifique $|F(x_k)| < \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$ fijado previamente, se escoge $u_i^{n+1} = x_k$ y se tendrá que $F(u_i^{n+1}) \approx 0$. También hay que establecer previamente un número máximo de iteraciones para que asegurar que el bucle finaliza. Este esquema se implementa en la función ondas_no_lineal_semi_newton. Se ha escogido, por ejemplo, $\varepsilon = 10^{-6}$ y un número máximo de iteraciones de 200.

4. Esquema implícito. Se realizan las aproximaciones

$$u_{tt}(x_i, t_n) \approx \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2},$$
 $u_{xx}(x_i, t_n) \approx \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}.$

El término no lineal también se discretiza implícitamente. Sustituyendo en la ecuación, quedaría

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \gamma (u_i^{n+1})^3 = 0,$$

o lo que es lo mismo

$$-\frac{1}{\Delta x^2}u_{i-1}^{n+1}+\big(\frac{2}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta t^2}\big)u_i^{n+1}+\gamma(u_i^{n+1})^3-\frac{1}{\Delta x^2}u_{i+1}^{n+1}-\frac{2}{\Delta t^2}u_i^n+\frac{1}{\Delta t^2}u_i^{n-1}=0.$$

Hay que resolver la ecuación vectorial F(U)=0, donde $F\colon\mathbb{R}^{N-2}\to\mathbb{R}^{N-2}$ es la función dada por

$$F(X) = \begin{pmatrix} \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2}\right) x_1 + \gamma x_1^3 - \frac{1}{\Delta x^2} x_2 - \frac{2}{\Delta t^2} u_1^n + \frac{1}{\Delta t^2} u_1^{n-1} \\ -\frac{1}{\Delta x^2} x_1 + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2}\right) x_2 + \gamma x_2^3 - \frac{1}{\Delta x^2} x_3 - \frac{2}{\Delta t^2} u_2^n + \frac{1}{\Delta t^2} u_2^{n-1} \\ \vdots \\ -\frac{1}{\Delta x^2} x_{N-4} + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2}\right) x_{N-3} + \gamma x_{N-3}^3 - \frac{1}{\Delta x^2} x_{N-2} - \frac{2}{\Delta t^2} u_{N-3}^n + \frac{1}{\Delta t^2} u_{N-3}^{n-1} \\ -\frac{1}{\Delta x^2} x_{N-3} + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2}\right) x_{N-2} + \gamma x_{N-2}^3 - \frac{2}{\Delta t^2} u_{N-2}^n + \frac{1}{\Delta t^2} u_{N-2}^{n-1} \end{pmatrix},$$

donde se está denotando $X = (x_1, x_2, \dots, x_{N-2})^t$. Para resolver esta ecuación vectorial, se utilizará de nuevo el método de Newton. La matriz jacobiana de F es

$$J_F(X) = \begin{pmatrix} \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2} + 3\gamma x_1^2 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \cdots & 0\\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2} + 3\gamma x_2^2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2} + 3\gamma x_{N-2}^2 \end{pmatrix},$$

es decir, el elemento *i*-ésimo de la diagonal principal es $\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta t^2} + 3\gamma x_i^2$, y los elementos por encima y por debajo de la diagonal principal son $-\frac{1}{\Delta x^2}$. Se construye la sucesión $\{X_k\}_{k=0}^{\infty}$ de la siguiente manera:

$$X_0 = 0,$$

 $X_{k+1} = X_k - J_F^{-1}(X_k)F(X_k), \qquad k \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$

Para evitar el cálculo de matrices inversas, tenemos en cuenta que

$$X_{k+1} = X_k - J_F^{-1}(X_k)F(X_k) \iff J_F(X_k)(X_{k+1} - X_k) = -F(X_k),$$

así que podemos resolver el sistema lineal $J_F(X_k)Y = -F(X_k)$ y definir $X_{k+1} = Y + X_k$.

Al igual que en el esquema anterior, cuando se obtenga un término de la sucesión que verifique $||F(X_k)||_{\infty} < \varepsilon$ para algún $\varepsilon > 0$ fijado previamente, se escoge $U^{n+1} = X_k$ y se tendrá que $F(U^{n+1}) \approx 0$. También hay que establecer previamente un número máximo de iteraciones para que asegurar que el bucle finaliza. Este esquema se implementa en la función ondas_no_lineal_impl. Se ha escogido, como antes, $\varepsilon = 10^{-6}$ y un número máximo de iteraciones de 200.