## Métodos Numéricos para Solución de Ecuaciones Diferenciales Parciales Elípticas

Abel Palafox González, José Luis Alonzo Velazquez

#### Resumen

En aplicaciones o proyectos de investigación tales como dinamica de partículas o elastostática, a menudo se presentan ecuaciones o sistemas de Ecuaciones Diferenciales Parciales Elípticas. Adicionalmente, las Ecuaciones Diferenciales a resolver pueden no tener una solución explícita y tener alta dimensionalidad. Nuestro objetivos es entonces, estudiar las propiedades de éste tipo de ecuaciones, así como métodos numéricos y estrategias de implementación para la solución de las mismas. Primero, presentaremos brevemente algunos aspectos teóricos importantes de las Ecuaciones Elípticas tomando como primer caso de estudio a la ecuación de Poisson. Presentaremos resultados obtenidos con el método de Diferencias Finitas. Hablaremos con detalle del método de Elemento Finito aplicado a casos párticulares de Ecuaciones Diferenciales Parciales Elípticas.

## 1. Introducción

Las Ecuaciones Diferenciales Parciales aparecen muy frecuentemente en modelos que pretenden explicar un fenónemo físico. El creciente desarrollo de herramientas computacionales, permite resolver problemas que anteriormente no eran tratables. Sin embargo, aun existen muchas limitantes que impiden obtener soluciones precisas.

En problemas como dinamica de partículas o elastostática, se presentan Ecuaciones Diferenciales Elípticas. Consideramos de suma importancia para nuestros fines, estudiar éste tipo de ecuaciones e identificar esquemas computacionales para aproximar soluciones de forma numérica.

Actualmente, los métodos que se utilizan en términos generales, son: Diferencias Finitas, Elementos Finitos y Volumen Finito. El método de Volumen Finito, está fuera de los alcances de este proyecto. El método de Diferencias Finitas así como Elementos Finitos serán de nuestro estudio a lo largo del presente proyecto. Cabe señalar que nuestra atención se centrará en el método de los Elementos Finitos.

### 2. Diferencias Finitas

## 2.1. La Ecuación de Poisson

El origen de las Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) Elípticas en dos dimensiones espaciales es la ecuación de Poisson:

$$u_{xx} + u_{yy} = f(x, y) \tag{1}$$

en un dominio  $\Omega$ . Equivalentemente, la ecuación (1) puede ser escrita como:

$$\nabla^2 u = f(x, y)$$

donde  $\nabla^2$  es el operador Laplaciano:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

La ecuación homogenea correspondiente a la ecuación (1) es la ecuación de Laplace:

$$\nabla^2 u = 0. (2)$$

Las soluciones a la ecuación de Laplace son llamadas funciones armónicas y están intimamente relacionadas con el área de análisis complejo.

Para determinar completamente la solución a (1), es necesario especificar una condición de frontera en la solución. Esta condición debe ser de uno de los dos tipos siguientes:

• Condición de tipo Dirichlet:

$$u = b_1, \quad \text{en} \quad \partial \Omega$$
 (3)

■ Condición de tipo Newmann:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = b_2, \quad \text{en} \quad \partial \Omega$$
 (4)

con n el vector normal en  $\partial\Omega$ .

Las EDP's con condiciones de frontera son llamados problemas de valores en la frontera.

En un contexto físico, la ecuación (1) describe el estado estable de distribución de temperatura de un objeto ocupando el dominio  $\Omega$ . La solución u(x,y) representa la temperatura estable del dominio  $\Omega$  con fuentes de calor y cuencas dados por f(x,y). La condición de Dirichlet representa una temperatura fija en la frontera  $\partial\Omega$ , mientras que la condición de tipo Newmann representa el flujo de calor. La condición de Newmann con  $b_2 = 0$  representa una frontera perfectamente aislada.

Observación: La EDP (1) con condición Newmann (4) debe de cumplir la condición de integrabilidad:

$$\iint_{\Omega} f = \int_{\partial \Omega} b_2.$$

La condición de integrabilidad tiene la interpretación física de que las fuentes de calor en la región se deben balancear con el flujo de calor en la frontera para que exista una temperatura estable.

Cabe señalar que la solución a (1) con condición Newmann está determinada hasta una constante arbitraria. Esto significa, físicamente, que la temperatura promedio de un cuerpo no puede ser determinada a partir de los flujos de calor en la frontera y las fuentes de calor y cuencas sólamente.

Definición: La ecuación diferencial elíptica general (cuasilineal) de segundo orden en dos dimensiones, es una ecuación que puede ser escrita de la forma:

$$a(x,y)u_{xx} + 2b(x,y)u_{xy} + c(x,y)u_{yy} + d(x,y,u,u_x,u_y) = f(x,y)$$
 (5)

donde a, c > 0 y  $b^2 < ac$ 

Obsérvese que la definición requiere que la forma cuadrática

$$a(x, y)\xi^{2} + 2b(x, y)\xi\eta + c(x, y)\eta^{2}$$

sea positiva para todos valores de  $(\xi, \eta)$  y todos los valores de (x, y) en  $\Omega$ .

Notemos que la solución a (1) tiene dos derivadas más que f. Esta propiedad (que la solución sea más diferenciable que los datos y que ésta ganancia en diferenciabilidad de la solución es igual al orden del operador diferencial) caracteriza a una ecuación o sistema de EDP's elípticas.

# 2.2. Estimaciones de Regularidad para Ecuaciones Elípticas

Presentaremos estimaciones que muestran cómo la suavidad de las soluciones dependen en los datos. Por simplicidad se supone que los coeficientes a, b, c, d de la ecuación (5) son constantes.

Se puede demostrar [Strikwerda2004] que:

$$||u||_{s+2}^2 \le C_s(||f||_s^2 + ||u_0||_0^2) \tag{6}$$

para s entero no negativo,  $C_s$  constante y la norma  $\|\cdot\|_s^2$  definida como:

$$||u||_s^2 = \sum_{s_1 + s_2 < s} ||\partial_x^{s_1} \partial_y^{s_2} u||^2.$$

Esta estimación es llamada estimación de regularidad. Enuncia que si todas una solución de (1) existe en  $L^2$ , i.e. si  $||u||_0$  es finito y la función f tiene todas las derivadas de orden s en  $L^2(\mathbb{R}^2)$ , entonces la función u tiene s+2 derivadas en  $L^2(\mathbb{R}^2)$ .

#### 2.3. Principios Máximos

Los principios máximos son un conjunto de herramientas útiles para el estudio de Ecuaciones Elípticas de segundo orden. La utilidad de los principios máximos esta restringida a las ecuaciones de segundo orden debido a que las segundas derivadas de una función dan información de la función en los extremos. Los siguientes dos teoremas son expresiones de Principios Máximos.

**Teorema 2.1** Sea L un operador elíptico de segundo orden definido por  $L\phi = a\phi_{xx} + 2b\phi_{xy} + c\phi_{yy}$ , i.e. los coeficientes a y c con positivos y b satisface  $b^2 < ac$ . Si una función u satisface  $Lu \ge 0$  en un dominio acotado  $\Omega$ , entonces el valor máximo de u en  $\Omega$  está en la frontera de  $\Omega$ .

Éste teorema puede ser visto como una extensión en dos dimensinoes del siguiente resultado: Si una función de una variable tiene segunda derivada positiva en un intervalo cerrado, entonces esa función debe alcanzar su valor máximo en los límites del intervalo. Por otro lado, si la segunda derivada es negativa, el mínimo ocurre en las fronteras.

**Teorema 2.2** Si la ecuación elíptica  $au_{xx} + 2bu_{xy} + cu_{yy} + d_1u_x + d_2u_y + eu = 0$  se mantiene en un dominio  $\Omega$ , con a, c positivas y e no positiva, entonces la solución u(x,y) no puede tener un máximo local en el interior de  $\Omega$ .

Cabe destacar, que se dispone de la segunda derivada de la solución u, al menos de manera local, debido a la condición de suavidad que caracteriza a las Ecuaciones Elípticas. Por otro lado, tanto los Principios Máximos como las Estimaciones de Regularidad, se preservan en la solución bajo un esquema de Diferencias Finitas. Este hecho nos permite tener estimaciones locales de la solución numérica.

#### 2.4. Aplicación de Diferencias Finitas

La derivada de una función g puede aproximarse con:

$$g'(x) \approx \frac{g(x + \frac{1}{2}h) - g(x - \frac{1}{2}h)}{h}$$

esto aproximación se conoce como Diferencia Finita Central. Ahora bien, analogamente podemos aproximar la segunda derivada como:

$$g''(x) \approx \frac{g'(x + \frac{1}{2}h) - g'(x - \frac{1}{2}h)}{h}$$

$$\approx \frac{\frac{g(x + 2\frac{1}{2}h) - g(x - \frac{1}{2}h + \frac{1}{2}h)}{h} - \frac{g(x - 2\frac{1}{2}h) - f(x - \frac{1}{2}h + \frac{1}{2}h)}{h}}{h}$$

$$\approx \frac{g(x + h) - 2g(x) + g(x - h)}{h^2}$$

Entonces, para la Ecuación de Poisson en una dimensión tenemos que:

$$f(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \approx \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}.$$

Tomando una discretización de un intervalo  $[x_0, x_n]$  en n pasos equidistantes de tamaño h, tendíamos que:

$$f(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} \quad \forall i \in \{0, \dots, n\}.$$

Equivalentemente, tenemos que:

$$u(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) + u(x_{i-1}) - h^2 f(x_i)}{2} \quad \forall i \in \{0, \dots, n\}.$$

Observemos que lo anterior puede ser escrito en forma matricial (Ax = b) como sigue:

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} u = h^2 f$$

La matriz de éste sistema resulta ser tridiagonal, simétrica y positiva definida. Por tanto, para encontrar la solución u al sistema posemos utilizar métodos

numéricos clásicos como: directos (LU, Cholesky, etc.) o iterativos (Gauss-Seidel, Gradiente Conjugado). La precisión de la aproximación en éste caso estás determinada por el tamaño de la discretización  $(O(h^2))$ . Por tanto, para una buena estimación, requerimos un gran número de puntos  $x_i$ . Una estrategia recomendable para la solución del sistema, es utilizar un método que explote la estructura tridiagonal de la matriz, ya que consiste predominantemente de ceros.

#### Ejemplo en 1D

Consideremos la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = 5\sin(7x),$$

$$u=10$$
 en:  $\partial\Omega$ 

definida en:  $\Omega = [-\pi, \pi],$ 

En éste caso la solución analítica es:

$$u(x) = -\frac{5}{35}\sin(7x) + 10.$$

Presentamos en la Figura 1 la solución obtenida con nuestra implementación de diferencias finitas (linea punteada) tomando 100 puntos equiespaciados en el intervalo  $\Omega$  junto con la solución analítica (linea continua). El error relativo en éste caso es de: 9,99300779445e-07 en 6759 iteraciones del método Gauss-Seidel.

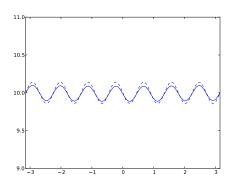


Figura 1: Solución a la Ecuación de Poisson por el método de Diferencias Finitas

Presentamos también, como archivos adjuntos, videos de las soluciones obtenidas tanto en 1D como en 2D.

## 3. El método de los elementos finitos

El método de los elementos finitos (MEF en español o FEM en inglés) es un método numérico general para la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales parciales muy utilizado. Este consiste en crear una lattice que cubra el objeto de estudio y sobre esta se imponen condiciones en las cuales funciones o ecuaciones de norma situadas en cada nodo nos permiten interpolar los valores de la función buscada en el objeto. El método se basa fuertemente en el hecho de poder hacer diferencias finitas. Hay muchos métodos para obtener dicha lattice y relacionar un nodo con otro. En la siguiente sección se puede ver una breve descripción del método utilizado.

#### 3.1. Ejemplo. El proceso de transferencia de calor

El proceso de transferencia de calor (conductividad térmica) se determina por la ley de Fourier : el vector de densidad de un flujo calorífico W es proporcional al gradiente de temperatura u = u(x), así que

$$W = -k\nabla u$$

donde k=k(x) es el coeficiente de conductividad térmica. La densidad del flujo calorífico es igual a la cantidad de calor que pasa en la unidad de tiempo a través de la unidad de superficie isotómica.

## 3.2. Principio de conservación

El principio de conservación para el caso bidimensional nos dice que

$$q(x_i) + \frac{dq}{dx_i} = Q(x_i) + q(x_i)$$

por otro lado el flujo es la razón de cambios de temperaturas con lo cual tenemos la ecuación

$$Q + \sum_{i=1}^{3} \frac{d}{dx_i} \left( k \frac{\partial \varphi(x_i)}{\partial x_i} \right) = 0.$$

Suponiendo que k es constante en cada dirección y escribiendo  $u = \varphi(x)$  la ecuación de transferencia de calor viene dada por la expresión

$$\frac{\partial u}{\partial t} - k \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = 0$$

o lo que es lo mismo

$$\frac{\partial u}{\partial t} - k\nabla^2 u = 0.1$$

## 3.3. El método de Galerkin y Residuos ponderados

El método Galerkin proporciona una forma sistemática de obtener aproximaciones finitas.

Paso 1: Primero definimos las funciones de forma que serán la base de nuestros espacio vectorial. Dicho espacio vectorial es un espacio polinómico en que la base de dicho espacio está formada por funciones de forma  $\hat{N}_i$ , que dado el conjunto de nodos del dominio de referencia se definen como:

$$\hat{N}_i(\xi_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>En la literatua se podra encontrar el simbolo de la divergencia como  $\nabla^2$  o  $\Delta$ .

Esto permite definir de manera unívoca unas funciones de forma sobre el dominio real sobre el que se define el problema:

$$\forall (\xi, \eta) \in \hat{\Omega} : \hat{N}_i(\xi, \eta) = (N_i^{(e)} \circ F^{(e)})(\xi, \eta)$$

Estas funciones se pueden extender a todo el dominio, gracias a que el conjunto de subdominios o elementos finitos constituye una partición de todo el dominio:

$$N_i: \Omega \to \mathbb{R}^d, \quad \forall x \in \Omega^{(e)} \subset \Omega: N_i(x) = N_i^e(x)$$

Donde  $\Omega$  es el espacio de referencia.

Paso 2: Resolución de las ecuaciones, primero notemos que podemos hacer integrales mediante cuadraturas aplicadas a estas funciones de forma con ciertos pesos, una de las formulas que vimos enc lase es:

$$\int_{\Omega} f \ d\Omega = \sum_{e=1}^{n} \int_{\Omega^{(e)}} f \ d\Omega = \sum_{e=1}^{n} \int_{\hat{\Omega}} (f \circ F^{(e)}) J_{F^{(e)}} \ d\hat{\Omega}$$

$$\approx \sum_{m=1}^{N_{PI}} w_m \hat{f}(\xi_m) J_{F^{(e)}}(\xi_m)$$

Donde:

- $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  son el domino sobre el que se plantea el problema.
- $\Omega^{(e)}$ ,  $\hat{\Omega}$ , representan a cada uno de los elementos finitos y al dominio isoparamétrico que da la forma de los elementos finitos.
- $f: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}, \hat{f}:=f \circ F^{(e)}$ , representan la función que debe integrarse y su expresión sobre el dominio isoparamétrico.
- $F^{(e)}: \hat{\Omega} \to \Omega^{(e)}$ , la aplicación que relaciona el dominio isoparamétrico con cada elemento finito.
- $w_m, \psi_m$ , son los pesos y los puntos de integración usados para integración gaussiana.
- $n, n_{PI}$ , son el número total de elementos y el número de puntos de integración por elemento.
- Paso 3: Definición de las funciones de forma Este paso es una consecuencia de los dos anteriores. Habiendo elegido el tipo de funciones de forma necesarios para satisfacer los requerimientos de continuidad que plantea el operador diferencial a resolver y habiendo realizado la discretización de las variables independientes surge de su combinación la definición de las funciones de forma.
- **Paso 4:** Cálculo de la matriz del sistema y del miembro derecho. Ku = f.
- Paso 5: Resolución del sistema de ecuaciones anterior mediante algún método numérico.

Paso 6: Recalculo de la solución para obtener una mejor solución en el los nodos.

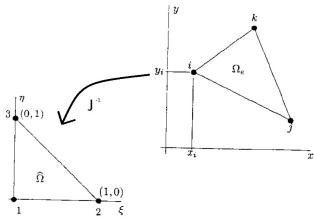
Paso 7: Una de las ecuaciones de forma que utiliza es: Es el triángulo de 3 nodos y el cuadrilátero de 4 nodos.

## 4. Preproceso, Cálculo y Postproceso

- Preproceso, que consiste en la definición de geometría, generación de la malla, las condiciones de contorno y asignación de propiedades a los materiales y otras propiedades. En ocasiones existen operaciones cosméticas de regularización de la malla y precondicionamiento para garantizar una mejor aproximación o una mejor convergencia del cálculo. Aquí usando el software GiD e imponiendo condiciones de frontera conseguiremos un mallado de nuestro objeto de estudio.
- Cálculo, el resultado del preproceso, en un problema simple no-dependiente del tiempo, permite generar un conjunto de N ecuaciones y N incógnitas, que puede ser resuelto con cualquier algoritmo para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Cuando el problema a tratar es un problema no-lineal o un problema dependiente del tiempo a veces el cálculo consiste en una sucesión finita de sistemas de N ecuaciones y N incógnitas que deben resolverse uno a continuación de otro, y cuya entrada depende del resultado del paso anterior.
- Postproceso, el cálculo proporciona valores de cierto conjunto de funciones en los nodos de la malla que define la discretización, en el postproceso se calculan magnitudes derivadas de los valores obtenidos para los nodos, y en ocasiones se aplican operaciones de suavizado, interpolación e incluso determinación de errores de aproximación.

Elemento Triangular de 3 Nodos:

Cada uno de los elementos triangulares sera pasado a coordenadas naturales, para facilitar el computo.



Para este caso la geometría quedara mallado po triángulos, ahora hay que ver cuales serán nuestras funciones de forma (interpolación) en las coordenadas naturales:

$$N_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta$$
  

$$N_2(\xi, \eta) = \xi$$
  

$$N_3(\xi, \eta) = \eta$$

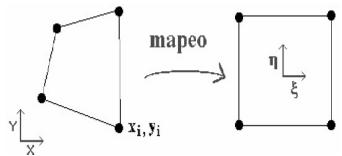
Por lo tanto las parciales correspondientes serán:

$$\begin{split} \frac{\partial N1}{\partial \xi} &= -1 \ \frac{\partial N1}{\partial \eta} = -1 \\ \frac{\partial N2}{\partial \xi} &= 1 \ \frac{\partial N2}{\partial \eta} = 0 \\ \frac{\partial N3}{\partial \xi} &= 0 \ \frac{\partial N3}{\partial \eta} = 1 \end{split}$$

Como las parciales no depende de  $\xi$  o  $\eta$  el computo sera mucho más sencillo para este caso. A continuación muestro los resultados obtenidos.

Para el caso en que el mallado es por cuadriláteros nuestras funciones de forma en las coordenadas naturales:

$$\begin{split} N_1(\xi,\eta) &= \frac{(1-\xi)(1-\eta)}{4} \\ N_2(\xi,\eta) &= \frac{(1+\xi)(1-\eta)}{4} \\ N_3(\xi,\eta) &= \frac{(1+\xi)(1+\eta)}{4} \\ N_4(\xi,\eta) &= \frac{(1-\xi)(1+\eta)}{4} \end{split}$$

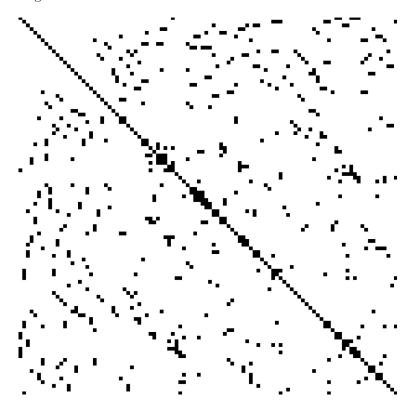


Por lo tanto las parciales correspondientes serán:

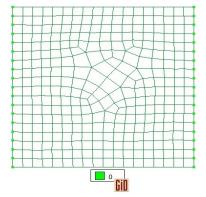
$$\begin{split} \frac{\partial N1}{\partial \xi} &= \frac{-(1-\eta)}{4} \ \frac{\partial N1}{\partial \eta} = \frac{-(1-\xi)}{4} \\ \frac{\partial N2}{\partial \xi} &= \frac{(1-\eta)}{4} \ \frac{\partial N2}{\partial \eta} = \frac{-(1+\xi)}{4} \\ \frac{\partial N3}{\partial \xi} &= \frac{(1+\eta)}{4} \ \frac{\partial N3}{\partial \eta} = \frac{(1+\xi)}{4} \\ \frac{\partial N4}{\partial \xi} &= \frac{-(1+\eta)}{4} \ \frac{\partial N4}{\partial \eta} = \frac{(1-\xi)}{4} \end{split}$$

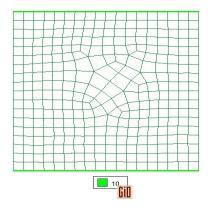
Como las parciales depende de  $\xi$  o  $\eta$  el computo sera un poco más complicado para este caso, por lo cual utilizaremos cuadraturas. Se puede ver un poco sobre cuadraturas al final de este trabajo.

Entre las bondades de esta implementación es que la matriz resultante es simétrica y rala, es decir tiene muchos ceros, una matriz rala es una matriz que tiene la siguiente forma

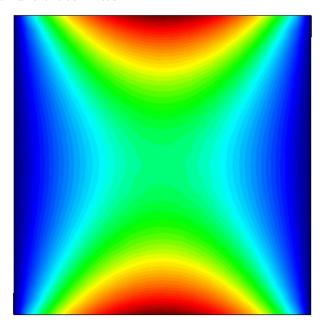


Para este trabajo hemos considerado la difusión de calor en una superficie cuadrada con las siguientes condiciones de Dirichlet y Newman





Obteniendo el siguiente resultado, el cual es comparable con los resultados obtenidos con diferencias finitas.



## 5. Oscilador Armónico

En esta parte ejemplifico a detalle los tres métodos de aproximación sobre un problema especifico, el calculo de una cota inferior de la energía minima de un sistema. El ejemplo de batalla sera el oscilador armónico cuántico.

El oscilador armónico se puede emplear para estudiar sistemas que realicen pequeñas oscilaciones en torno a una posición de equilibrio. En particular, el oscilador armónico cuántico se puede emplear para estudiar las oscilaciones de los átomos de una molécula diatómica, como la de hidrógeno,  $H_2$ .

El oscilador armónico es uno de los casos en los que se puede obtener una solución analítica sencilla de la ecuación de Schrodinger. Es la razón por la cual nos interesa trabajar como primera aproximación a nuestro problema, en métodos que resuelvan dicha ecuación numéricamente, y poder así validar nuestros algoritmos.

La ecuación asociada al oscilador armónico que estudiaremos en este reporte es:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta + \frac{|x|^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Cuya ecuación correspondiente al suponer el sistema en una, dos y tres dimensiones sería respectivamente:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{x^2 + y^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Calcularemos la energía minima del sistema llevándolo a un problema de valores propios y resolveremos dicho problema mediante tres métodos de discretización que son:

- Diferencias Finitas.
- Volumen Finito.
- Método del Elemento Finito.

Todos los métodos tendrán una malla que dependerá de la dimension del sistema, pero cada coordenada correrá en el intervalo [a,b]=[-5,5,5,5], tendremos el valor de la función en la frontera es decir en los extremos de dicho intervalo, supondremos que la solución es  $\Psi=u$ , con lo cual nuestras ecuaciones quedaran en función de u.

#### 5.1. Diferencias Finitas

#### 1D

Bueno ahora desarrollemos las diferencias finitas sobre el problema considerando el sistema en una dimensión:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Consideremos una partición del intervalo [a,b] en n+1 subintervalos, todos ellos de longitud  $h=\frac{b-a}{n+1}, a=x_0 < x_1 < \ldots < x_{n+1}=b$ . Calcularemos, en cada uno de los puntos  $x_i$ , una aproximación del valor de  $u(x_i)$ , a la que llamaremos  $u_i$ . Conocemos los valores  $u_0$  y  $u_{n+1}$  (pues deben coincidir, respectivamente, con los datos  $u_a$  y  $u_b$ ), de forma que nuestras incógnitas son  $u_1, u_2, \ldots, u_n$ . Para esto usaremos diferencias centrales, es decir la siguiente aproximación de la derivada de segundo orden:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2} \left( \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \right) + \frac{x^2}{2} u_i = \lambda u_i, i = 1, 2, \dots, n$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2} u_{i+1} + \left( \frac{1}{h^2} + \frac{x^2}{2} \right) u_i - \frac{1}{2h^2} u_{i-1} = \lambda u_i, i = 1, 2, \dots, n$$

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz de diferencias finitas, formando un sistema Au=f. La matriz A es tridiagonal y definida positiva.

A continuación el ejemplo para una malla de 10 elementos.

#### 2D

Bueno ahora desarrollemos las diferencias finitas sobre el problema considerando el sistema en dos dimensiones:

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{x^2 + y^2}{2} \right) \Psi = E \Psi$$

Consideremos un mallado del intervalo  $[a,b] \times [a,b]$ , particionando en n+1 subintervalos cada intervalo [a,b], todos ellos de longitud  $h=\frac{b-a}{n+1}$ ,  $a=x_0 < x_1 < \ldots < x_{n+1} = b$ . Calcularemos, en cada uno de los puntos  $(x_i,y_j)$ ,

una aproximación del valor de  $u(x_i, y_j)$ , a la que llamaremos  $u_{ij}$ . Conocemos los valores de u en la frontera, de forma que nuestras incógnitas son  $u_{11}, u_{21}, \ldots, u_{n1}, u_{12}, u_{22}, \ldots, u_{n2}, u_{1n}, u_{2n}, \ldots, u_{nn}$ . Para esto usaremos diferencias centrales, es decir la siguiente aproximación de las derivadas de segundo orden:

$$\frac{d^2 u_{i,j}}{dx^2} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$
$$\frac{d^2 u_{i,j}}{du^2} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2} \left( \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} \right) + \left( \frac{x^2 + y^2}{2} \right) u_{ij} = \lambda u_{ij}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2} u_{i+1,j} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j+1} + \left( \frac{2}{h^2} + \frac{x^2 + y^2}{2} \right) u_{i,j} - \frac{1}{2h^2} u_{i-1,j} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j-1} = \lambda u_{i,j}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz de diferencias finitas, formando un sistema Au = f. La matriz A es pentagonal y simetrica.

A continuación el ejemplo para una malla de 3 elementos.

3D

Bueno ahora desarrollemos las diferencias finitas sobre el problema considerando el sistema en tres dimensiones:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Consideremos un mallado del intervalo  $[a,b] \times [a,b] \times [a,b]$ , particionando en n+1 subintervalos cada intervalo [a,b], todos ellos de longitud  $h=\frac{b-a}{n+1}$ ,  $a=x_0< x_1< \ldots < x_{n+1}=b$ . Calcularemos, en cada uno de los puntos  $(x_i,y_j,z_k)$ , una aproximación del valor de  $u(x_i,y_j,z_k)$ , a la que llamaremos  $u_{ijk}$ . Conocemos los valores de u en la frontera, de forma que nuestras incógnitas son  $u_{111},u_{211},\ldots,u_{n11},u_{121},u_{221},\ldots,u_{n21},u_{1nn},u_{2n},\ldots,u_{nnn}$ . Para esto usaremos diferencias centrales, es decir la siguiente aproximación de las derivadas de segundo orden:

$$\frac{d^2 u_{i,j,k}}{dx^2} \approx \frac{u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}}{h^2}$$

$$\frac{d^2 u_{i,j,k}}{dy^2} \approx \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}}{h^2}$$

$$\frac{d^2 u_{i,j,k}}{dz^2} \approx \frac{u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}}{h^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2} \left( \frac{u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}}{h^2} \right)$$

$$+ \frac{u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}}{h^2} \right) + \left( \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2} \right) u_{ijk} = \lambda u_{ijk}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \ j = 1, 2, \dots, n \ k = 1, 2, \dots, n$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2} u_{i+1,j,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j+1,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j,k+1} + \left( \frac{3}{h^2} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2} \right) u_{i,j}$$

$$-\frac{1}{2h^2} u_{i-1,j,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j-1,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j,k-1} = \lambda u_{i,j,k}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \ j = 1, 2, \dots, n \ k = 1, 2, \dots, n$$

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz de diferencias finitas, formando un sistema Au=f. La matriz A es pentagonal y simétrica.

A continuación el ejemplo para una malla de 3 elementos.

## Resultados

Los siguientes resultados, fueron obtenidos en una laptop,con 2 GB de memoria RAM disponible y al construir las matrices de manera llena, rápidamente se limito la cantidad de particiones.

| N     | $E_0$    |
|-------|----------|
| 11    | 0.467602 |
| 21    | 0.491268 |
| 31    | 0.496018 |
| 41    | 0.497740 |
| 51    | 0.498542 |
| 61    | 0.498982 |
| 71    | 0.499248 |
| 81    | 0.499422 |
| 91    | 0.499540 |
| 101   | 0.499624 |
| 201   | 0.499905 |
| 301   | 0.499958 |
| 401   | 0.499976 |
| 501   | 0.499985 |
| 601   | 0.499989 |
| 701   | 0.499992 |
| 801   | 0.499994 |
| 901   | 0.499995 |
| 1001  | 0.499996 |
| 2001  | 0.499999 |
| 3001  | 0.500000 |
| 4001  | 0.500000 |
| 5001  | 0.500000 |
| 6001  | 0.500000 |
| 7001  | 0.500000 |
| 8001  | 0.500000 |
| 9001  | 0.500000 |
| 10001 | 0.500000 |

| N    | $E_0$    |
|------|----------|
| 2    | 0.066043 |
| 3    | 3.435286 |
| 4    | 0.259841 |
| 5    | 1.412295 |
| 6    | 0.543070 |
| 7    | 0.991718 |
| 8    | 0.793784 |
| 9    | 0.922773 |
| 10   | 0.907263 |
| 11   | 0.935204 |
| 21   | 0.982537 |
| 31   | 0.992067 |
| 41   | 0.995480 |
| 51   | 0.997084 |
| 61   | 0.997963 |
| 71   | 0.998497 |
| 81   | 0.998846 |
| 91   | 0.999086 |
| 101  | 0.999258 |
| 201  | 0.999483 |
| 301  |          |
| 401  |          |
| 501  |          |
| 601  |          |
| 701  |          |
| 801  |          |
| 901  |          |
| 1001 |          |

| N.T. |          |
|------|----------|
| N    | $E_0$    |
| 2    | 0.099065 |
| 3    | 5.152929 |
| 4    | 0.389761 |
| 5    | 2.118434 |
| 6    | 0.814607 |
| 7    | 1.487596 |
| 8    | 1.190676 |
| 9    | 1.384159 |
| 10   | 1.360889 |
| 11   | 1.402784 |
| 21   | 1.473808 |
| 31   | 1.480036 |
| 41   |          |
| 51   |          |
| 61   |          |
| 71   |          |
| 81   |          |
| 91   |          |
| 101  |          |
| 201  |          |
| 301  |          |
| 401  |          |
| 501  |          |
| 601  |          |
| 701  |          |
| 801  |          |
| 901  |          |
| 1001 |          |
|      |          |

Para 1D se obtiene energía mínima .5, para 2D se obtiene energía mínima 1, para 3D se obtiene energía mínima 1.5. Los casos 1D y 2D coinciden con los resultados del artículo., Y el caso 2D, no tengo con que comparar, pero es la misma construcción de la matriz, así que presumiblemente esta correcto el valor obtenido.

#### 5.2. Volumen Finito

1D

Bueno ahora desarrollemos volumen finito sobre el problema:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Para ello integramos la ecuación diferencial sobre un volumen finito, es decir, un trozo de intervalo (1D), cuya forma concreta dependerá de la malla. Para la malla consideremos una partición del intervalo [a,b] en n+1 subintervalos, todos ellos de longitud  $h=\frac{b-a}{n+1}, \ a=x_0< x_1< \ldots < x_{n+1}=b.$  Calcularemos la integral de la ecuación diferencial en cada uno de los intervalos  $[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}]$  con centro en el punto  $x_i$ , obteniendo una aproximación de la integral con el valor de  $u(x_i)$ , a la que llamaremos  $u_i$ . Conocemos los valores  $u_0$  y  $u_{n+1}$  (pues deben coincidir, respectivamente, con los datos  $u_a$  y  $u_b$ ), de forma que nuestras incógnitas son  $u_1,u_2,\ldots,u_n$ .

Para esto en el caso de la segunda derivada(laplaciano) integraremos y después utilizaremos la aproximación de la derivada de primer orden:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = \frac{d}{dx} \Psi(x_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{d}{dx} \Psi(x_{i-\frac{1}{2}}) \approx \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \frac{u_i - u_{i-1}}{h}\right)$$

Y para el caso de cualquier función sera el perímetro del intervalo por el valor de la función en el punto  $x_i$ , es decir:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f \approx h \cdot f(x_i)$$

Por lo tanto al desglosar la ecuación:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2} \right) \Psi = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} E \Psi$$

Resultan términos que podemos integrar con las reglas que hemos propuesto:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\right) \Psi + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{x^2}{2}\right) \Psi = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} E \Psi$$

Ahora al integrar cada parte de la siguiente ecuación como se a descrito:

$$\Rightarrow -\frac{1}{2} \left( \frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \right) + h \frac{x^2}{2} u_i = \lambda h u_i$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2}u_{i+1} - \left(\frac{1}{h^2} + \frac{x^2}{2}\right)u_i - \frac{1}{2h^2}u_{i-1} = \lambda u_i$$

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz de diferencias finitas, la cual es idéntica a la obtenida por el método de diferencias finitas.

Bueno ahora desarrollemos volumen finito sobre el problema:

$$\left( -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{x^2 + y^2}{2} \right) \Psi = E \Psi$$

Para ello integramos la ecuación diferencial sobre un volumen finito, es decir, un trozo de superficie (2D), cuya forma concreta dependerá de la malla. Para la malla consideremos un mallado del intervalo  $[a,b] \times [a,b]$ , particionando en n+1 subintervalos cada intervalo [a,b], todos ellos de longitud  $h=\frac{b-a}{n+1}$ ,  $a=x_0< x_1< \ldots < x_{n+1}=b$ . Calcularemos, en cada uno de los puntos  $(x_i,y_j)$ , una aproximación del valor de  $u(x_i,y_j)$ , a la que llamaremos  $u_{ij}$ . Conocemos los valores de u en la frontera, de forma que nuestras incógnitas son  $u_{11},u_{21},\ldots,u_{n1},u_{12},u_{22},\ldots,u_{n2},u_{1n},u_{2n},\ldots,u_{nn}$ .

Para esto en el caso de la segunda derivada(laplaciano) integraremos y después utilizaremos la aproximación de la derivada de primer orden:

$$\begin{split} & \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dx} \Psi(x_{i+\frac{1}{2}}, \hat{y}) - \frac{d}{dx} \Psi(x_{i-\frac{1}{2}}, \hat{y}) \\ & \approx \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\Psi(x_{i+1}, \hat{y}) - \Psi(x_{i}, \hat{y})}{h} - \frac{\Psi(x_{i}, \hat{y}) - \Psi(x_{i-1}, \hat{y})}{h} \right) \\ & \approx h \cdot \left( \frac{u_{i+1, j} - u_{i, j}}{h} - \frac{u_{i, j} - u_{i-1, j}}{h} \right) = u_{i+1, j} - 2u_{i, j} + u_{i-1, j} \\ & \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d^2}{dy^2} \Psi = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dy} \Psi(\hat{x}, y_{j+\frac{1}{2}}) - \frac{d}{dy} \Psi(\hat{x}, y_{j-\frac{1}{2}}) \\ & \approx \int_{y_{i-\frac{1}{2}}}^{y_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\Psi(\hat{x}, y_{j+1}) - \Psi(\hat{x}, y_{j})}{h} - \frac{\Psi(\hat{x}, y_{j}) - \Psi(\hat{x}, y_{j-1})}{h} \right) \\ & \approx h \cdot \left( \frac{u_{i, j+1} - u_{i, j}}{h} - \frac{u_{i, j} - u_{i, j-1}}{h} \right) = u_{i, j+1} - 2u_{i, j} + u_{i, j-1} \end{split}$$

Y para el caso de cualquier función sera el area de la región por el valor de la función en el punto  $(x_i, y_j)$ , es decir:

$$\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f \approx h^2 \cdot f(x_i, y_j)$$

Por lo tanto al desglosar la ecuación:

$$\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{x^2 + y^2}{2} \right) \Psi = \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} E \Psi$$

Resultan términos que podemos integrar con las reglas que hemos propuesto:

$$\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\right) \Psi + \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2}\right) \Psi +$$

$$\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{x^2}{2}\right) \Psi + \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{y^2}{2}\right) \Psi = \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} E \Psi$$

Ahora al integrar cada parte de la siguiente ecuación como se a descrito:

$$\Rightarrow -\frac{1}{2} \left( u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1} \right) + h^2 \left( \frac{x^2 + y^2}{2} \right) u_{i,j} = \lambda h^2 u_{i,j}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2} u_{i+1,j} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j+1} + \left( \frac{2}{h^2} + \frac{x^2 + y^2}{2} \right) u_{i,j} - \frac{1}{2h^2} u_{i-1,j} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j-1} = \lambda u_{i,j}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \ j = 1, 2, \dots, n$$

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz de diferencias finitas, la cual es idéntica a la obtenida por el método de diferencias finitas.

#### 3D

Bueno ahora desarrollemos volumen finito sobre el problema:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Para ello integramos la ecuación diferencial sobre un volumen finito, es decir, un trozo de volumen (3D), cuya forma concreta dependerá de la malla. Para la malla consideremos un mallado del intervalo  $[a,b] \times [a,b] \times [a,b]$ , particionando en n+1 subintervalos cada intervalo [a,b], todos ellos de longitud  $h=\frac{b-a}{n+1}$ ,  $a=x_0 < x_1 < \ldots < x_{n+1} = b$ . Calcularemos, en cada uno de los puntos  $(x_i,y_j,z_k)$ , una aproximación del valor de  $u(x_i,y_j,z_k)$ , a la que llamaremos  $u_{ijk}$ . Conocemos los valores de u en la frontera, de forma que nuestras incógnitas son  $u_{111},u_{211},\ldots,u_{n11},u_{121},u_{221},\ldots,u_{n21},u_{1nn},u_{2n},\ldots,u_{nnn}$ .

Para esto en el caso de la segunda derivada(laplaciano) integraremos y después utilizaremos la aproximación de la derivada de primer orden:

$$\begin{split} & \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d^2}{dx^2} \Psi = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dx} \Psi(x_{i+\frac{1}{2}}, \hat{y}, \hat{z}) - \frac{d}{dx} \Psi(x_{i-\frac{1}{2}}, \hat{y}, \hat{z}) \\ & \approx \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\Psi(x_{i+1}, \hat{y}, \hat{z}) - \Psi(x_{i}, \hat{y}, \hat{z})}{h} - \frac{\Psi(x_{i}, \hat{y}, \hat{z}) - \Psi(x_{i-1}, \hat{y}, \hat{z})}{h} \right) \\ & \approx h^2 \cdot \left( \frac{u_{i+1, j, k} - u_{i, j, k}}{h} - \frac{u_{i, j, k} - u_{i-1, j, k}}{h} \right) = h \cdot (u_{i+1, j, k} - 2u_{i, j, k} + u_{i-1, j, k}) \\ & \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d^2}{dy^2} \Psi = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dy} \Psi(\hat{x}, y_{j+\frac{1}{2}}, \hat{z}) - \frac{d}{dy} \Psi(\hat{x}, y_{j-\frac{1}{2}}, \hat{z}) \\ & \approx \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\Psi(\hat{x}, y_{j+1}, \hat{z}) - \Psi(\hat{x}, y_{j}, \hat{z})}{h} - \frac{\Psi(\hat{x}, y_{j}, \hat{z}) - \Psi(\hat{x}, y_{j-1}, \hat{z})}{h} \right) \\ & \approx h^2 \cdot \left( \frac{u_{i,j+1, k} - u_{i,j, k}}{h} - \frac{u_{i,j, k} - u_{i,j-1, k}}{h} \right) = h \cdot (u_{i,j+1, k} - 2u_{i,j, k} + u_{i,j-1, k}) \end{split}$$

$$\begin{split} & \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d^2}{dz^2} \Psi = \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{d}{dz} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, z_{k+\frac{1}{2}}) - \frac{d}{dz} \Psi(\hat{x}, \hat{y}, z_{k-\frac{1}{2}}) \\ & \approx \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\Psi(\hat{x}, \hat{y}, z_{k+1}) - \Psi(\hat{x}, \hat{y}, z_{k})}{h} - \frac{\Psi(\hat{x}, \hat{y}, z_{k}) - \Psi(\hat{x}, \hat{y}, z_{k-1})}{h} \right) \\ & \approx h^2 \cdot \left( \frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k}}{h} - \frac{u_{i,j,k} - u_{i,j,k-1}}{h} \right) = h \cdot (u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}) \end{split}$$

Y para el caso de cualquier función sera el area de la región por el valor de la función en el punto  $(x_i, y_j, z_k)$ , es decir:

$$\int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f \approx h^3 \cdot f(x_i, y_j, z_k)$$

Por lo tanto al desglosar la ecuación:

$$\begin{split} \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2} \right) \Psi \\ &= \int_{z_{k-\frac{1}{3}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{3}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{3}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} E \Psi \end{split}$$

Resultan términos que podemos integrar con las reglas que hemos propuesto:

$$\begin{split} \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \right) \Psi + \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} \right) \Psi + \\ \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi + \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{x^2}{2} \right) \Psi + \\ \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{z^2}{2} \right) \Psi + \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{z^2}{2} \right) \Psi \\ = \int_{z_{k-\frac{1}{2}}}^{z_{k+\frac{1}{2}}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} E \Psi \end{split}$$

Ahora al integrar cada parte de la ecuación como se a descrito:

$$\Rightarrow -\frac{1}{2}h \cdot (u_{i+1,j,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k} + u_{i,j+1,k} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j-1,k}$$

$$+u_{i,j,k+1} - 2u_{i,j,k} + u_{i,j,k-1}) + h^3 \left(\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right) u_{i,j,k} = \lambda h^3 u_{i,j,k}$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{2h^2} u_{i+1,j,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j+1,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j,k+1} + \left(\frac{3}{h^2} + \frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right) u_{i,j}$$

$$-\frac{1}{2h^2} u_{i-1,j,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j-1,k} - \frac{1}{2h^2} u_{i,j,k-1} = \lambda u_{i,j,k}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \ j = 1, 2, \dots, n \ k = 1, 2, \dots, n$$

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz de diferencias finitas, la cual es idéntica a la obtenida por el método de diferencias finitas.

#### 5.3. Método del Elemento Finito

Ahora desarrollaremos el método del elemento finito sobre el problema:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2}\right)\Psi = E\Psi$$

Integrando con la técnica de residuos ponderados con una función de peso  $\phi$  tenemos que:

$$-\frac{1}{2} \int_{-M}^{M} \Psi^{'}(x) \phi(x) dx + \frac{1}{2} \int_{-M}^{M} x^{2} \Psi(x) \phi(x) dx = \lambda \int_{-M}^{M} \Psi(x) \phi(x) dx$$

Ahora integrando por partes tenemos que:

$$\frac{1}{2} \int_{-M}^{M} \Psi^{'}(x) \phi^{'}(x) dx + \frac{1}{2} \int_{-M}^{M} x^{2} \Psi(x) \phi(x) dx - \phi \psi^{'}_{|_{-M}} = \lambda \int_{-M}^{M} \Psi(x) \phi(x) dx$$

Ahora usando la interpolación de elemento finito  $\Psi(x) = \sum_{j=0}^{N+1} \phi_j(x) \psi_j$  podemos aproximar los valores de  $\Psi$  y  $\Psi'$  con lo cual tenemos que:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N+1} \left( \int_{-M}^{M} \phi_i'(x) \phi_j'(x) \right) \psi_j dx \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N+1} \left( \int_{-M}^{M} x^2 \phi_i(x) \phi_j(x) \right) \psi_j dx - \phi \psi_{|_{-M}}' = \lambda \sum_{j=0}^{N+1} \left( \int_{-M}^{M} x^2 \phi_i(x) \phi_j(x) \right) \psi_j dx$$

Ahora considerando un elemento interno tenemos que:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N+1} \left( \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_i'(x) \phi_j'(x) \right) \psi_j dx \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N+1} \left( \int_{x_i}^{x_{i+1}} x^2 \phi_i(x) \phi_j(x) \right) \psi_j dx = \lambda \sum_{j=0}^{N+1} \left( \int_{x_i}^{x_{i+1}} x^2 \phi_i(x) \phi_j(x) \right) \psi_j dx$$

Para calcular cada entrada he usado cuadratura gaussiana de orden 4.

Con lo cual tenemos los coeficientes de la matriz del método de elementos finito. Mi método basado en Cholesky para calcular el eigenvalor a fallado, lo que he hecho es generar las matrices y con matlab calcular los eigenvalues, a continuación el resultado para N=10 me da que  $E_0=2,8646$ .

Para la version 2D y 3D intentaré reparar esto para no depender de matlab. De lo contrario generaré archivos que pueda leer matlab y la instrucción correspondiente.

## 6. Integración por Cuadraturas

Nota histórica:

En las formulas de integración se considera usualmente que los espaciamientos son iguales, es decir que la variable independiente x esta dividida en intervalos equiespaciados. Gauss observo que a falta de exigir la condición de conocimiento de la función f(x) en valores predeterminados, una formula de tres términos requeriría seis parámetros y correspondería a una formula de integración polinómica de grado cinco. Las formulas gaussianas pueden aplicarse cuando la función f(x) se conoce explícitamente si por el contrario, se conocen valores equiespaciados de la función ya que estas han sido evaluadas experimentalmente, se deben usar las formulas de integración numérica.

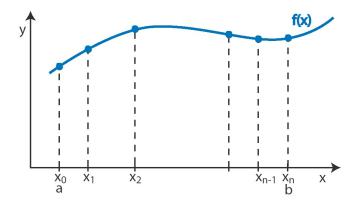


Figura 2: Función evaluada en puntos no necesariamente equidistantes.

Integrar por cuadraturas significa que dada f(x) una función definida en un intervalo [a, b] vamos a aproximar el valor de la integral de f(x) en [a, b] utilizando la evaluación de f(x) en ciertos puntos de [a, b]. Es decir, una fórmula de integración numérica se puede escribir como

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_{i} f(x_{i})$$

donde  $x_i$  representa los puntos de evaluación de f(x) y  $w_i$  el peso de cada punto de evaluación.

El objetivo de este método es aproximar la función f(x), por un polinomio  $P_n(x)$  que sea ortogonal con respecto a una función de peso dada, en el intervalo de integración, es decir:

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$
  
$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

Donde w(x) son funciones de peso,  $P_n(x)$  es el polinomio seleccionado y  $R_n(x)$  es el residuo originado por la aproximación, y los  $x_i$  son los ceros del polinomio, que se encuentran en el intervalo.

Hay varias cuadraturas que tienen que ver con los polinomios que definen los coeficientes de aproximación y el intervalo de integración, dare una lista de ejemplos típicos con sus respectivas formulas para calcular los pesos y dominios de integración.

| Cuadratura      | Intervalo                    | Peso                              |
|-----------------|------------------------------|-----------------------------------|
| Gauss-Legendre  | [a,b] = [-1,1]               | w(z) = 1                          |
| Gauss-Chebyshev | [a,b] = [-1,1]               | $w(z) = (1 - z^2)^{-\frac{1}{2}}$ |
| Gauss-Jacobi    | [a,b] = [-1,1]               | $w(z) = (z-1)^a (z+1)^b$          |
| Gauss-Laguerre  | $[a,b] = [0,+\infty)$        | $w(z) = z^a e^{-z}$               |
| Gauss-Hermite   | $[a,b] = (-\infty, +\infty)$ | $w(z) = e^{-z^2}$                 |

Una fórmula de integración numérica se denomina exacta de orden M si, para cualquier polinomio P(x) de grado menor o igual que M la fórmula es exacta. La fórmula de cuadratura de Gauss que utiliza n puntos es exacta de orden M=2n-1.

## 6.1. Cuadratura de Gauss

La cuadratura gaussiana es una cuadratura que selecciona los puntos de la evaluación de manera óptima y no en una forma igualmente espaciada, construida para dar el resultado de una polinomio de grado 2n-1 o menos, elegibles para los puntos  $x_i$  y los coeficientes  $w_i$  para  $i=1,\ldots,n$ . El dominio de tal cuadratura por regla es de intervalo [-1,1] dada por:

$$\int_{-1}^{1} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

Tal cuadratura dará resultados precisos solo si f(x) es aproximado por un polinomio dentro del rango [-1,1]. Si la función puede ser escrita como f(x) = w(x)g(x), donde g(x) es un polinomio aproximado y w(x) es conocido.

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} w(x)g(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_{i}g(x_{i})$$

Cuando integramos sobre un intervalo arbitrario [a, b] podemos hacer un cambio de variable para llegar a una integral en el intervalo [-1, 1]

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right) dx$$

usando las cuadraturas a esta expresión llegamos a

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^{n} w_{i} f\left(\frac{b-a}{2} x_{i} + \frac{a+b}{2}\right)$$

#### Pesos y puntos de integración

Veamos como se construye la fórmula de Cuadratura de Gauss utilizando un sólo punto:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = w_0 f(x_0)$$

Para calcular  $w_0$  y  $x_0$  vamos a exigir que la fórmula se exacta para polinomios de grado 0 y 1,es decir

$$\int_{-1}^{1} 1 dx = 2 = w_0 f(x_0) = w_0 \cdot 1 \Rightarrow w_0 = 2$$

$$\int_{-1}^{1} x dx = 0 = w_0 f(x_0) = 2 \cdot x_0 \Rightarrow x_0 = 0$$

Se denominan polinomios de Legendre  $L_n(x)$  a la familia de polinomios dada por  $L_0(x)=1, L_1(x)=x,$  y para n=2,3,...

$$nL_n(x) = (2n-1)xL_{n-1}(x) - (N-1)L_{n-2}(x)$$

Con ello en mente tenemos el siguiente teorema:

Sean  $\{\hat{x}_k\}_{k=1,\dots,n}$  los ceros del polinomio de Legendre  $L_n(x)$ . Si definimos

$$\hat{w}_k = \int_{-1}^1 \frac{\prod_{i \neq k} (x - \hat{x}_i)}{\prod_{i \neq k} (\hat{x}_k - \hat{x}_i)} dx$$

entonces la formula de integración numérica generada por los puntos  $\hat{x}_k$  y  $\hat{w}_k$  es exacta hasta el orden 2n-1 en el intervalo [-1,1].

Con este teorema ya tenemos una manera completa de hacer integración numérica sobre intervalos acotados basada en cuadraturas Gauss-Lengendre. La demostración de dicho teorema queda pendiente.

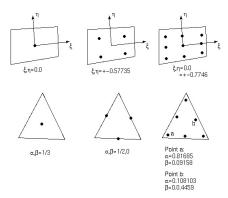


Figura 3: Puntos de Gauss dependiendo de la función de forma y grado de la función.

Lista de coeficientes de  $w_i$  y puntos  $x_i$  para n = 1, ..., 5

| Número    |                      |                       |
|-----------|----------------------|-----------------------|
| de puntos | Puntos               | Pesos                 |
| n         | $ x_i $              | $ w_i $               |
| 1         | $x_1 = 0$            | $w_1 = 2$             |
| 2         | $x_1 = -1/\sqrt{3}$  | $w_1 = 1$             |
|           | $x_2 = 1/\sqrt{3}$   | $w_2 = 1$             |
| 3         | $x_1 = -0.77459663$  | $w_1 = 0.55555$       |
|           | $x_2 = 0$            | $w_2 = 0.88888$       |
|           | $x_3 = 0.7745966$    | $w_3 = 0.55555$       |
| 4         | $x_1 = -0.861136311$ | $w_1 = 0.3478548451$  |
|           | $x_2 = -0.33998104$  | $w_2 = 0,6521451549$  |
|           | $x_3 = 0.33998104$   | $w_3 = 0.6521451549$  |
|           | $x_4 = 0.861136311$  | $w_4 = 0.3478548451$  |
| 5         | $x_1 = -0.90617984$  | $w_1 = 0.23692688509$ |
|           | $x_2 = -0.53846931$  | $w_2 = 0.4786286705$  |
|           | $x_3 = 0$            | $w_3 = 0.56888888$    |
|           | $x_4 = 0.53846931$   | $w_4 = 0,4786286705$  |
|           | $x_5 = 0.90617984$   | $w_5 = 0.23692688509$ |

#### Ejemplo

Aproxime la integral  $f(x) = x^3 + 2x^2$  de 1 a 5 cuando n = 2 mediante el método de cuadratura de Gauss y después comparemos con el resultado exacto.

$$\int_{1}^{5} (x^{3} + 2x^{2}) dx$$
$$\int_{1}^{5} (x^{3} + 2x^{2}) dx = 238,66667$$

$$n = 2$$
  
 $2n - 1 = 2(2) - 1 = 3$ 

Con n=2 podemos resolver la integral con exactitud para todos los polinomios de grado igual o menor a 3 para f(x)

$$\frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right) \, dx = \frac{5-1}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{5-1}{2}x + \frac{5+1}{2}\right) \, dx = 2 \int_{-1}^{1} f\left(2x+3\right) \, dx$$

$$\approx 2\sum_{i=1}^{2} w_i f(2x_i + 3) = 2(w_1 f(2x_1 + 3) + w_2 f(2x_2 + 3)) = 238,66667$$

#### 6.2. Hermite

Cuando el intervalo [a, b] es infinito, es decir,  $a = -\infty$  o  $b = \infty$ , hay que emplear otros métodos para aproximar las integrales. En el caso  $[a, b] = (-\infty, \infty)$ ,

se utilizan los ceros de los denominados polinomios de Hermite. En este caso, la fórmula de integración numérica aproxima la integral de la siguiente forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$

#### Polinomios de Hermite

Los polinomios de Hermite vienen definidos en toda la recta real. Definimos los polinomios de Hermite por:

$$H_n = (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}, n \in \mathbb{N}.$$

Resulta que cada  $H_n$  es un polinomio de grado n, además se tiene que

$$H_n(-t) = (-1)^n H_n(t).$$

Así los primero 5 polinomios de Hermite son:

$$H_0(t) = 1 
H_1(t) = 2t 
H_2(t) = 4t^2 - 2 
H_3(t) = 8t^3 - 12t 
H_4(t) = 16t^4 - 48t^2 + 12t$$

Quisiéramos poder definir un espacio de funciones con base estos polinomios, para eso necesitamos que sean ortogonales entre si.

Para eso usaremos la función de peso  $\omega(t)=e^{-t^2},$  con el usual producto interno

$$\langle H_m, H_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} H_m(t) H_n(t) \omega(t) dt$$

Asumiendo que  $n \ge m$  tenemos que

$$\langle H_m, H_n \rangle = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} H_m(t) \frac{d^n e^{-t^2}}{dt^n} dt$$

Ahora para poder integrar esta expresión utilizaremos integración por partes, obteniendo

$$\langle H_m, H_n \rangle = (-1)^{n+1} 2m \int_{-\infty}^{\infty} H_{m-1}(t) \frac{d^{n-1}e^{-t^2}}{dt^{n-1}} dt$$

Por lo tanto usando inducción sobre m tenemos que:

$$\langle H_m, H_n \rangle = (-1)^m (-1)^n 2^m m! \int_{-\infty}^{\infty} H_0(t) \frac{d^{n-m} e^{-t^2}}{dt^{n-m}} dt$$

De aquí si tenemos la desigualdad estricta n > m, entonces

$$\langle H_m, H_n \rangle = (-1)^m (-1)^n 2^m m! \int_{-\infty}^{\infty} H_0(t) \frac{d^{n-m-1}e^{-t^2}}{dt^{n-m-1}} dt_{|_{-\infty}} = 0$$

Si n=m

$$\langle H_m, H_n \rangle = 2^m m! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} dt = 2^m m! \sqrt{\pi}$$

Por lo tanto el conjunto  $\{H_n\}$  forma una base ortogonal del espacio de funciones.

Además podemos definir el conjunto de funciones  $F_n(t) = \frac{H_n e^{t^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}$ , con el cual se cumple que

 $\int_{-\infty}^{\infty} F_n(t) F_m(t) dt = \delta_{nm}$ 

La relación de recurrencia nos permite poder crear un función recursiva, para formar los polinomios de hermite.

```
double hermite(double x, int n){
    if(n==0) return 1.0;
    if(n==1) return 2*x;
    return (2*x*hermite(x, n-1)-2*(n-1)*hermite(x, n-2));
}
```

#### 7. Conclusiones

Hoy en día contamos con computadoras muy poderosas, que hace años ni siquiera se podían imaginar estas computadoras en tan corto tiempo y a pesar de ello los métodos para la resolución de ecuaciones con algoritmos programables ya estaban bastante estudiados, sin embargo aun hoy en día hay muchas ecuaciones que no somos capaces de resolver, únicamente confiando con el poder de la computadora, es por ello que mencionamos la siguiente lista de hechos:

- Para resolver EDP's se requieren métodos numéricos eficientes.
- El incremento en poder de cómputo permite atacar problemas que anteriormente eran intratables.
- Un análisis previo de las EDP's a resolver contribuyen a elegir adecuadamente el método numérico a utilizar.
- Es indispensable comprender el fundamento teórico de los esquemas de solución numérica.
- Aún con el poder de computo disponible, existen problemas fuera de nuestro alcance. Es necesario estudiar a fondo las EDP's asociadas para intentar obtener buenos resultados.

Necesitamos estudiar más fondo los problemas para que le sea factible a una computadora poder darnos buenas aproximaciones a las soluciones que deseamos. De lo contrario a pesar del gran poder que tienen actualmente no serán solubles sin el análisis apropiado. Es por ello que debemos hacer un esfuerzo por entender el marco teórico en el que viven los problemas que queremos resolver así como de las capacidades reales que tiene la computadora, con el fin de obtener **soluciones útiles** que nos acerquen más a una mejor comprensión de nuestro entorno.

# Referencias

- [Strikwerda2004] J. C. Strikwerda, Finite difference Schemes and Partial Differential Equations. SIAM. 2004.
- [Ciarlet2002] P. G. Ciarlet, The Finite Element Method for Elliptic Problems. SIAM. 2002.
- [Samarskii 2007] A. A. Samarskii, P. N. Vabishchevich. Numerical Methods for Solving Inverse Problems of Mathematical Physics. Inverse and Ill-Posed Series. Walter de Gruyter. 2007. Berlin.
- [Agbezuge] Finite Element Solution of the Poisson equation with Dirichlet Boundary Conditions in a rectangular domain
- [1] http://es.wikipedia.org/wiki/Oscilador\_arm%C3%B3nico Definición de Wikipedia 07/12/2012.
- [articulo01] FINITE VOLUME DISCRETIZATIONS FOR EIGENVALUE PROBLEMS WITH APPLICATIONS TO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATIONS. XIAOYING DAI, XINGAO GONG, ZHANG YANG, DIER ZHANG, AND AIHUI ZHOU, 2011 Society for Industrial and Applied Mathematics, MULTISCALE MODEL. SIMUL, Vol. 9, No. 1, pp. 208-240.