

Notas de Simulación de Procesos Físicos (I6017)

Prof: Dr. Jorge M. Montes Aréchiga.
Licenciatura en Física, CUCEI, UdeG.

Índice

1. Integración numérica.	3
1.1. Regla del trapecio.	3
1.2. Regla de Simpson.	4
1.3. Estimación del error.	6
1.4. Cuadratura Gaussiana.	6
2. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias.	7
2.1. Método de Euler.	8
2.2. LSODES y LSODA	10
2.3. Aplicación de la solución numérica de las ODEs en sistemas físicos.	10
2.3.1. Péndulo simple.	10
3. Ecuación de Difusión.	12
3.1. Método de Euler adelantado.	12
3.2. Conducción de calor.	14
3.3. Método de Euler atrasado (Implícito).	15
3.4. Método de Crank–Nicolson	18
3.5. Método generalizado θ	19
3.6. Difusión en un medio heterogéneo	20
3.7. Ecuación de difusión en 2D.	21
3.7.1. Discretización en 2D.	21
4. Ecuación de Onda.	24
4.1. Discretización.	24
4.2. Condiciones de frontera	26
4.3. Notación de Índices	27
4.4. Velocidad de onda variable.	29
4.4.1. Condiciones de frontera de Neumann.	31
4.5. Ecuación de Onda en 2D.	31
4.5.1. Discretización en 2D.	32

5. Ecuación de Advección.	33
5.1. Esquema adelantado en tiempo, centrado en espacio.	33
5.2. Esquema “Upwind differences” en espacio.	34
5.3. Esquema Leap–Frog en el tiempo, diferencias centradas en el espacio	34
5.4. Método Lax–Wendroff	35
5.5. Condiciones de frontera periódicas	36
5.6. Aplicaciones de la ecuación de advección.	36
5.6.1. Transporte de una sustancia.	36
Referencias	37

1. Integración numérica.

La manera tradicional para realizar una integración numérica consiste en graficar la función de nuestro interés y dividir en cuadriláteros el área bajo la curva formada por la función. Por esta razón a la integración numérica es conocida también como cuadratura numérica.

La definición de Riemman de una integral está dada por:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h \rightarrow 0} \left[h \sum_{i=1}^{(b-a)/h} f(x_i) \right] \quad (1.1)$$

donde h es el ancho de los cuadriláteros (cajas) en los que se divide el área bajo la curva. De forma numérica la integral de la función $f(x)$ puede aproximarse mediante la suma de las cajas de altura $f(x)$ y ancho w_i :

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^N f(x_i)w_i. \quad (1.2)$$

La ecuación anterior es una ecuación estándar para cualquier algoritmo de integración, la función $f(x)$ se evalúa en N puntos en el intervalo $[a, b]$.

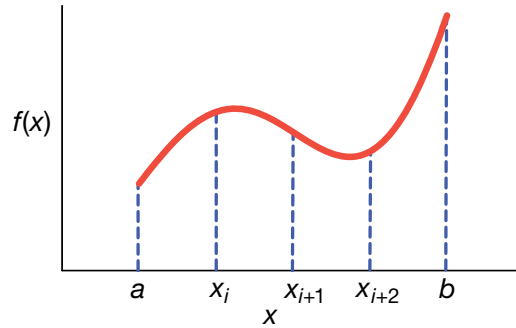


Figura 1: La integral $\int_a^b f(x)dx$ es el área bajo la curva formada por $f(x)$ de a hasta b . El área está dividida en cuatro regiones de ancho h y cinco puntos de integración.

1.1. Regla del trapecio.

La regla del trapecio utiliza valores equiespaciados de x , es decir N puntos $x_i (i = 1..N)$ separados por una distancia h en un intervalo $[a, b]$. Lo anterior

implica que habrá $N - 1$ intervalos de longitud h , donde

$$h = \frac{b - a}{N - 1}, \quad x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, N. \quad (1.3)$$

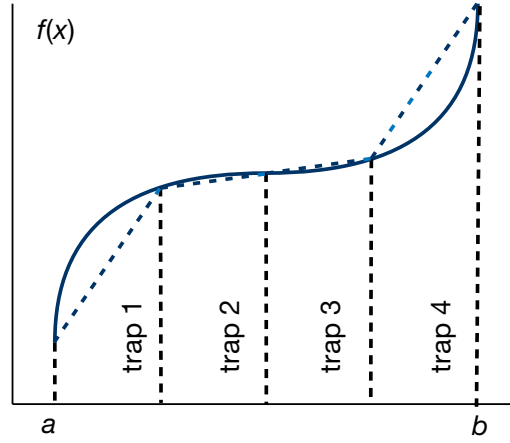


Figura 2: Esquema de los trapecoides formados para cada intervalo.

La regla del trapecioide toma cada intervalo de iteración i y construye un trapecio de ancho h , y el valor de f se toma como la altura promedio $f_i + f_{i+1}$ y el área de cada trapecioide es:

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)dx \sim \frac{h(f_i + f_{i+1})}{2} = \frac{1}{2}hf_i + \frac{1}{2}hf_{i+1}. \quad (1.4)$$

Con el fin de aplicar la regla en la región completa $[a, b]$ se debe añadir la contribución de cada subintervalo

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}f_1 + hf_2 + hf_3 \dots + hf_{N-1} + \frac{h}{2}f_N \quad (1.5)$$

1.2. Regla de Simpson.

La regla de Simpson aproxima a cada intervalo a una parábola para obtener la integral de $f(x)$:

$$f(x) = \alpha x^2 + \beta x + \gamma, \quad (1.6)$$

al igual que en la regla del trapecio, los intervalos deben ser equiespaciados. El área bajo la parábola formada en cada intervalo está dada por:

$$\int_{x_i}^{x_i+h} (\alpha x^2 + \beta x + \gamma)dx = \frac{\alpha x^3}{3} + \frac{\beta x^2}{2} + \gamma x \Big|_{x_i}^{x_i+h}. \quad (1.7)$$

Para relacionar los parámetros α , β y γ con la función hay que analizar un intervalo de $[-1, 1]$, es decir

$$\int_{-1}^1 (\alpha x^2 + \beta x + \gamma) dx = \frac{2\alpha}{3} + 2\gamma, \quad (1.8)$$

de aquí se obtiene que

$$\alpha = \frac{f(1) + f(-1)}{2} - f(0), \quad (1.9)$$

$$\beta = \frac{f(1) - f(-1)}{2}, \quad (1.10)$$

$$\gamma = f(0). \quad (1.11)$$

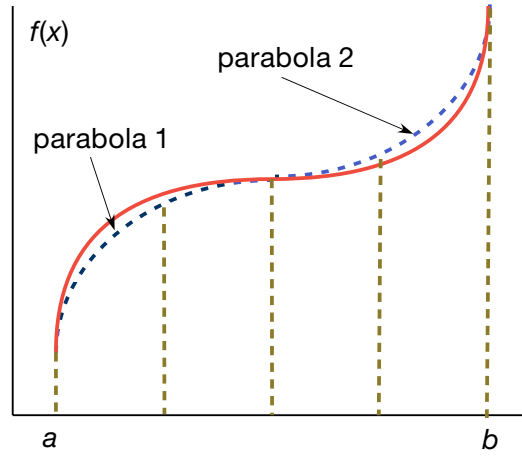


Figura 3: Dos parábolas usadas para aplicar la regla de Simpson.

De esta forma podemos expresar a la integral como la suma ponderada de la función evaluada en tres puntos:

$$\int_{-1}^1 (\alpha x^2 + \beta x + \gamma) dx = \frac{f(-1)}{3} + \frac{4f(0)}{3} + \frac{f(1)}{3}. \quad (1.12)$$

Debido a que se necesitan tres puntos, podemos generalizar el resultado anterior para evaluar la integral en los intervalos adyacentes, en cada caso se evaluará la función en los puntos extremos y central del intervalo:

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_i+h} f(x) dx + \int_{x_i-h}^{x_i} f(x) dx = \frac{h}{3} f_{i-1} + \frac{4h}{3} f_i + \frac{h}{3} f_{i+1}. \quad (1.13)$$

La regla de Simpson requiere que el número total de intervalos sea par, o que el número de puntos N sea impar. Si se añade la contribución de cada subintervalo, podemos aplicar la regla de Simpson a todo el intervalo $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}f_1 + \frac{4h}{3}f_2 + \frac{2h}{3}f_3 + \frac{4h}{3}f_4 + \dots + \frac{4h}{3}f_{N-1} + \frac{h}{3}f_N \quad (1.14)$$

1.3. Estimación del error.

En general, se debe elegir una regla de integración que dé un resultado preciso utilizando el menor número de puntos de integración. Para las reglas del trapecioide y Simpson, una estimación del error está dada por:

$$\mathcal{E}_t = O\left(\frac{[b-a]^3}{N^2}\right) f^{(2)}, \quad \mathcal{E}_s = O\left(\frac{[b-a]^5}{N^4}\right) f^{(4)}. \quad (1.15)$$

donde las derivadas $f^{(2)}$ y $f^{(4)}$ se evalúan en algún lugar dentro de la región de integración. Entonces, a menos que el integrando tenga problemas de comportamiento con sus derivadas, la regla de Simpson debería converger más rápidamente que la regla del trapecioide y con menos error.

Si bien parece que solo es necesario seguir aumentando el número de puntos de integración para obtener una mejor precisión, el error de redondeo relativo tiende a acumularse y, después de N puntos de integración, es decir, aumenta como:

$$\epsilon_{ro} \simeq \sqrt{N}\epsilon_m \quad (1.16)$$

donde $\epsilon_m \sim 10^{15}$ es el error de la máquina.

1.4. Cuadratura Gaussiana.

Se puede reescribir la fórmula básica para integración utilizando una función de pesos $W(x)$, esto es:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b W(x)g(x)dx \simeq \sum_{i=1}^N w_i g(x_i). \quad (1.17)$$

En este método se seleccionan los puntos de la evaluación de manera óptima y no en una forma igualmente espaciada, construida para dar el resultado de un polinomio de grado $2n - 1$ o menos, elegibles para los puntos x_i y los coeficientes w_i para $i = 1, \dots, n$. El dominio de tal cuadratura por regla general es $[-1, 1]$ dada por:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (1.18)$$

Tal cuadratura dará resultados precisos solo si $f(x)$ es aproximado por un polinomio dentro del rango $[-1, 1]$. Para calcular los pesos w_i podemos utilizar:

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2) [P'_n(x_i)]^2} \quad (1.19)$$

donde P_n son polinomios de Legendre en el intervalo $[-1, 1]$. El intervalo para el que está definida la cuadratura se debe “mapear” en el intervalo $a \leq x \leq b$, es decir:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right). \quad (1.20)$$

Ejercicios.

Ejercicio 1.1.

Una lámina plana de material conductor infinita y delgada tiene un orificio circular de radio a cortado en ella. Un disco delgado y plano del mismo material y un radio ligeramente más pequeño llena el orificio circular de la lámina, separado por un anillo aislante muy estrecho. El disco se mantiene a un potencial fijo V , mientras que la lámina infinita se mantiene a potencial cero. Podemos obtener una solución para el potencial a una distancia perpendicular z sobre el borde del disco en términos de la integral elíptica:

$$\Phi(z) = \frac{V}{2} \left(1 - \frac{kz}{\pi a} \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}} \right)$$

donde $k = 2a/(z^2 + 4a^2)^{1/2}$.

1. Calcule el potencial $\Phi(z)$ con $V = 1$, $a = 1, 2, 3$ y $0.05 \leq z \leq 10$.
2. Realice una gráfica de $\Phi(z)$ obtenido con cada valor de a .
3. Discuta sus resultados.

2. Ecuaciones Diferenciales Ordinarias.

Una ecuación diferencial es una ecuación que involucra una función $y(t)$ (con una variable independiente t) y sus derivadas y' , y'' , y''' , etc. El orden de una ecuación diferencial se refiere a la derivada de mayor orden de la función $y(t)$.

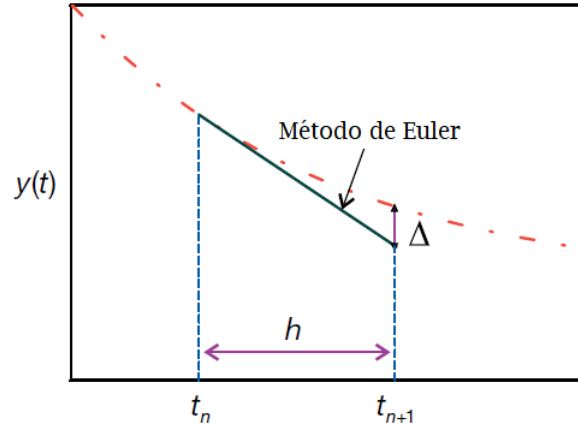


Figura 4: Esquema del método de Euler

Una ecuación diferencial es lineal si tiene la forma:

$$a_n(t)y^{(n)} + a_{n-1}(t)y^{(n-1)} + \cdots + a_1(t)y' + a_0(t)y = f(t) \quad (2.1)$$

donde a_n, \dots, a_0, f son funciones de la variable independiente t . Por ejemplo, la ecuación:

$$y' + ty = t^2$$

es una ecuación lineal de primer orden y la ecuación

$$y'' + ty' + y^2 = t$$

es una ecuación de segundo orden no lineal.

2.1. Método de Euler.

Consideremos una ecuación diferencial ordinaria de primer orden con una condición inicial:

$$y' = f(y, t), \quad y(t_0) = y_0. \quad (2.2)$$

Para obtener la solución por el método de Euler, debemos primero obtener la línea tangente a la función $y(t)$ en $t = t_0$.

$$y = y(t_0) + f(y_0, t_0)(t - t_0) \quad (2.3)$$

donde $y'(t_0) = f(y_0, t_0)$ es la pendiente de $y(t)$ en $t = t_0$.

Después se utiliza la línea tangente para aproximar $y(t)$ a un pequeño paso $t_1 = t_0 + h$:

$$y_1 = y_0 + f(y_0, t_0)(t_1 - t_0) \quad (2.4)$$

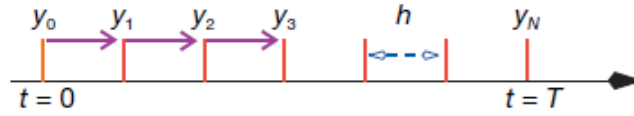


Figura 5: Discretización en el método de Euler.

donde $y_1 \approx y(t_1)$. Después calcular la tangente en (t_1, y_1) y repetir Figura 5.

Entonces la fórmula de Euler nos define una secuencia recursiva.

$$y_{n+1} = y_n + f(y_n, t_n)(t_{n+1} - t_n), \quad y_0 = y(t_0)$$

donde $y_n \approx y(t_n)$ para cada n .

Si tenemos valores equiespaciados de t , la ecuación se puede escribir como:

$$y_{n+1} = y_n + f(y_n, t_n)h, \quad y_0 = y(t_0). \quad (2.5)$$

con $h = t_{n+1} - t_n$.

Implementación en Python.

Usaremos los módulos `numpy` y `matplotlib.pyplot`: Podemos hacer uso de la programación funcional, es decir, escribimos una función donde tendremos el método y otra función donde estará nuestra ecuación diferencial:

```
def euler(f, y0, t):
    y = np.empty(len(t))
    y[0] = y0
    for n in range(0, len(t)-1):
        h = (t[n+1] - t[n])
        y[n+1] = y[n] + f(y[n], t[n])*h
    return y
```

Donde `f` es una función que define a la ODE a resolver, `y0` es una lista con las condiciones iniciales y `t` es un espacio lineal correspondiente al tiempo.

Al igual que en un algoritmo de diferencias adelantadas el error en el método de Euler es $\mathcal{O}(h^2)$.

Ejercicios.

Ejercicio 2.1

Encontrar la solución numérica de la ecuación:

$$\begin{aligned}y' &= -y \cos(t), \quad t \in [0, 5] \\ y(0) &= 1/2\end{aligned}$$

y comparar con la solución analítica:

$$y(t) = \frac{1}{2}e^{-\sin(t)}$$

2.2. LSODES y LSODA

LSODES resuelve sistemas $dy/dt = f$ y en el caso *stiff* trata la matriz jacobiana en su forma dispersa general. El método determina la estructura de dispersión por sí mismo y opcionalmente puede dar esta información. Resuelve los sistemas lineales, mediante un método de factorización inversa LU .

LSODA resuelve sistemas $dy/dt = f$ con una matriz jacobiana densa o en bandas cuando el problema es *stiff*, pero selecciona automáticamente entre métodos *nonstiff* (Adams) y *stiff* (Backward Differentiation Formula). Inicialmente, utiliza el método para problemas *nonstiff* y supervisa dinámicamente los datos para decidir qué método utilizar [1].

En Python este método está implementado en la función `odeint` de Scientific Python

2.3. Aplicación de la solución numérica de las ODEs en sistemas físicos.

2.3.1. Péndulo simple.

Considere un péndulo que consta de una varilla ligera de longitud L a la que se une una bola de masa m . El otro extremo de la varilla está unido a una pared en un punto de modo que la bola del péndulo se mueva en un círculo centrado en este punto. La posición de la masa en el tiempo t se describe completamente por el ángulo $\theta(t)$ de la masa desde la posición recta hacia abajo y se mide en la dirección contraria a las manecillas del reloj. Entonces, la posición de la masa en un tiempo t está dada por:

$$(x, y) = (L \sin(\theta(t)), -L \cos(\theta(t))) \quad (2.6)$$

La velocidad de la masa esta dada por $Ld\theta/dt$ y la aceleración por $Ld^2\theta/dt^2$.

Suponemos que las únicas dos fuerzas que actúan sobre el péndulo son la fuerza de gravedad y una fuerza debida a la fricción. La fuerza gravitacional es una fuerza constante igual a mg que actúa en dirección descendente; la componente de esta fuerza tangente al círculo de movimiento está dada por $-mg \sin \theta$.

Se considera que la fuerza debida a la fricción es proporcional a la velocidad, es decir, $-bLd\theta/dt$ para una constante $b > 0$. Cuando no hay fuerza debida a la fricción ($b = 0$), tenemos un péndulo ideal.

Con lo anterior, tenemos que la segunda ley de Newton nos da una ecuación diferencial de segundo orden:

$$mL\theta'' = -bL\theta' - mg \sin \theta \quad (2.7)$$

Reescribiendo

$$\theta''(t) + \beta\theta'(t) + \alpha \sin(\theta(t)) = 0 \quad (2.8)$$

donde $\beta = b/m$ y $\alpha = g/L$, son constantes positivas. Podemos convertir la ecuación anterior en un sistema de ecuaciones de primer orden. Si definimos la velocidad angular $\omega(t) = \theta'(t)$, obtenemos el sistema:

$$\begin{aligned} \theta'(t) &= \omega(t) \\ \omega'(t) &= -\beta\omega(t) - \alpha \sin(\theta(t)) \end{aligned}$$

Sea:

$$y(t) = \begin{pmatrix} \theta(t) \\ \omega(t) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Implementación en Python.

Para resolver este sistema utilizaremos la función `odeint`, esta función toma como argumentos de entrada, la función que define al sistema de ecuaciones diferenciales a resolver, las condiciones iniciales `y0` y el vector de tiempo `t`. Primero definimos la función con el sistema de ecuaciones:

```
def pendulo(y, t, beta, alpha):
    theta, omega = y
    dydt = [omega,
            -beta*omega - alpha*np.sin(theta)]
    return dydt
```

Después de definir algunos parámetros de entrada, resolvemos:

```
sol = odeint(pendulo, y0, t, args=(beta, alpha))
```

3. Ecuación de Difusión.

3.1. Método de Euler adelantado.

Muchos de los problemas en física pueden ser modelados por ecuaciones diferenciales parabólicas que se resuelven para la incógnita $u(x, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(b(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + c(x, t)u + d(x, t) \quad (3.1)$$

donde b es positivo. Se necesita una condición inicial dada en $t = 0$ es decir:

$$u(x, 0) = u^0(x) \quad (3.2)$$

donde $u^0(x)$ es una función dada. La solución debe satisfacer la ecuación (3.1) para $t > 0$ y x en una región abierta R . La solución puede estar definida en una región cerrada y debe satisfacer ciertas condiciones de frontera, estas pueden involucrar a la variable en si u o a su primer derivada temporal $\partial u / \partial t$.

Si $x = 0$ es la frontera izquierda, la condición de frontera sería de la forma:

$$\alpha_0(t)u + \alpha_1(t)\frac{\partial u}{\partial x} = \alpha_2(t) \quad (3.3)$$

donde

$$\alpha_0 \geq 0, \alpha_1 \leq 0 \quad \text{y} \quad \alpha_0 - \alpha_1 > 0 \quad (3.4)$$

Y en la frontera derecha, $x = 1$ tenemos:

$$\beta_0(t)u + \beta_1(t)\frac{\partial u}{\partial x} = \beta_2(t) \quad (3.5)$$

donde

$$\beta_0 \geq 0, \beta_1 \geq 0 \quad \text{y} \quad \beta_0 + \beta_1 > 0 \quad (3.6)$$

Para aproximar la ecuación anterior por diferencias finitas, dividimos el dominio cerrado $\bar{R} \times [0, T_F]$ en un conjunto de líneas paralelas a los ejes x y t para formar una cuadrícula o malla.

Suponemos que las líneas están espaciadas por Δx y Δt . Las intersecciones

$$(x_i = i\Delta x, t_n = n\Delta t), i = 0, 1, \dots, I, n = 0, 1, \dots \quad (3.7)$$

donde $\Delta x = 1/I$, son llamados puntos de malla, un ejemplo se puede los puntos de malla se pueden ver en la Figura 6. La solución se obtendrá para cada punto de malla, es decir:

$$u_i^n \approx u(x_i, t_n) \quad (3.8)$$

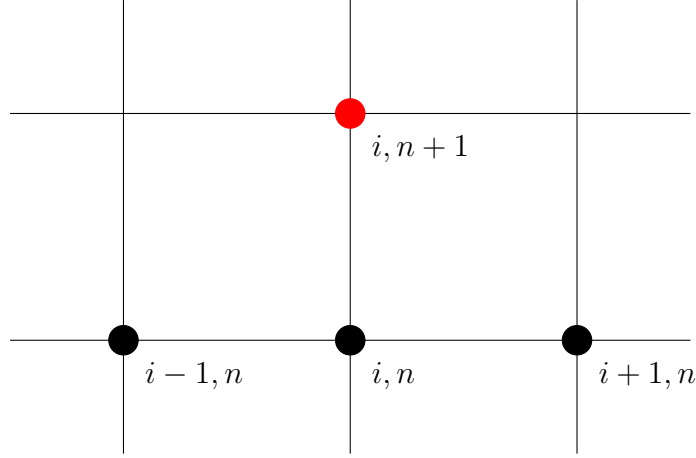


Figura 6: Stencil del esquema adelantado en tiempo, centrado en espacio.

Para el problema usaremos diferencias adelantadas para la parte temporal:

$$\frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t} \approx \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_n) \quad (3.9)$$

y diferencias centradas para la derivada parcial de segundo orden espacial:

$$\frac{u(x_{i+1}, t_n) - 2u(x_i, t_n) + u(x_{i-1}, t_n))}{(\Delta x)^2} \approx \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_n) \quad (3.10)$$

Igualando los términos y cambiando la notación:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.11)$$

tenemos que:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \mu (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (3.12)$$

donde

$$\mu := \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad (3.13)$$

Cada valor en el nivel de tiempo $t_n + 1$ puede calcularse independientemente a partir de los valores en el tiempo t_n ; por esta razón se denomina esquema de diferencias explícitas.

Finalmente para las condiciones iniciales y de frontera tendríamos

$$u_i^0 = u^0(x_i), i = 1, 2, \dots, I - 1 \quad (3.14)$$

$$u_0^n = u_i^n = 0, n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.15)$$

Implementación en Python.

El siguiente código es un ejemplo de el método de Euler, nótese que se está usando vectorización para optimizar el cálculo.

```
def euler(Nt, dx, dt, u0, L, alpha):
    mu = (dt/(dx**2))
    x = np.arange(0, L+dx, dx)
    t = np.arange(0, Nt*dt, dt)

    sol = np.zeros((Nt, len(x)))
    u_n = np.zeros(len(x))

    u0 = u0(x)
    u = u0
    for n in range(Nt):
        u_n[1:-1] = u[1:-1] + mu*(u[:-2] - 2*u[1:-1] + u[2:])
        u = u_n
        sol[n] = u
    return x, t, mu, sol
```

Ejercicios.

Ejercicio 3.1

Obtener la solución numérica de la ecuación

$$\begin{aligned}u_t &= u_{xx} \quad \text{para } t > 0, 0 < x < 1 \\u^0(0) &= u^0(1) = 0 \\u^0(x) &= e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-L/2)^2}, \sigma = 0.5\end{aligned}$$

3.2. Conducción de calor.

La conducción de calor es un proceso difusivo, y se puede aproximar resolviendo la ecuación de calor; en una dimensión:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.16)$$

donde α es un coeficiente de difusividad térmica que va a depender del tipo de material conductor y T es la temperatura. Discretizando la ecuación tenemos

$$T_j^{n+1} = T_i^n + \mu(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \quad (3.17)$$

sujeto a la restricción de estabilidad:

$$\mu = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (3.18)$$

En este tipo de problemas en lugar de especificar el valor de la solución en la frontera, es preciso especificar el valor de la derivada de la solución en la frontera. Este tipo de condiciones de frontera se conocen como **Condiciones de frontera de Neumann**. Supongamos que en el lado derecho del dominio existe un flujo de calor, la C.F se expresa como:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1} = q(t) \quad (3.19)$$

y discretizando:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1} \approx \frac{T_i^n - T_{i-1}^n}{\Delta x} = q(t) \quad (3.20)$$

En el contexto de la conducción de calor, la derivada espacial de la temperatura es la densidad de flujo de calor o simplemente flujo de calor q con unidades de W/m².

3.3. Método de Euler atrasado (Implícito).

Las simulaciones con el esquema de Euler adelantado muestran que la restricción del paso de tiempo, $\mu \leq 1/2$ que significa $\Delta t \leq \Delta x^2/(2\alpha)$, puede ser relevante al comienzo del proceso de difusión, cuando la solución cambia bastante rápido, pero a medida que aumenta el tiempo, el proceso se ralentiza y un Δt pequeño puede ser un inconveniente.

Mediante el uso de esquemas implícitos, que conducen a sistemas acoplados de ecuaciones lineales que deben resolverse en cada paso de tiempo, es posible tener cualquier tamaño de Δt (pero la precisión disminuye al aumentar Δt).

Si utilizamos el esquema adelantado podemos escribir la ecuación de difusión como:

$$\frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.21)$$

Ahora suponemos que u_i^{n-1} ya está calculado, pero todas las cantidades en el “nuevo” paso de tiempo n son desconocidas. Esta vez no es posible resolver con respecto a u_i^n porque este valor está acoplado a sus vecinos en el espacio, u_{i-1}^n y u_{i+1}^n , que también son desconocidos, ver Figura 7.

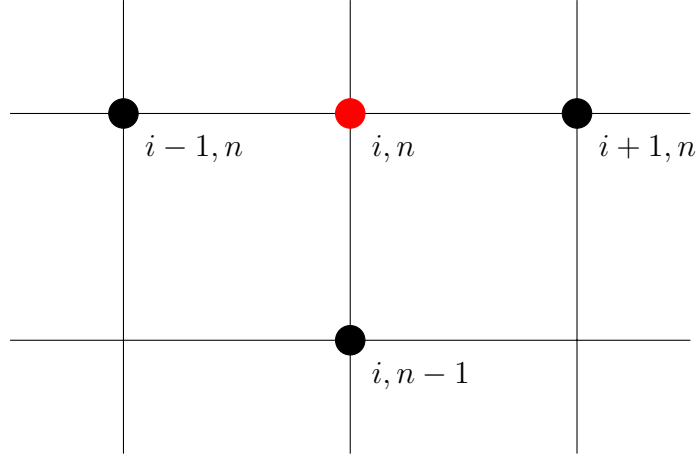


Figura 7: Stencil del esquema atrasado en tiempo, centrado en espacio.

Tomemos el caso cuando $N_x = 3$, donde N_x es el numero total del puntos de malla en x , para $i = 1, \dots, N_x - 1 = 1, 2$ tenemos:

$$\frac{u_1^n - u_1^{n-1}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_2^n - 2u_1^n + u_0^n}{\Delta x^2} \quad (3.22)$$

$$\frac{u_2^n - u_2^{n-1}}{\Delta t} = \alpha \frac{u_3^n - 2u_2^n + u_1^n}{\Delta x^2}. \quad (3.23)$$

donde los valores en la frontera u_0^n y u_3^n son conocidos. Acomodando las incógnitas u_1^n y u_2^n en el lado izquierdo y multiplicando por Δt tenemos:

$$(1 + 2\mu)u_1^n - \mu u_2^n = u_1^{n-1}, \quad (3.24)$$

$$-\mu u_1^n + (1 + 2\mu)u_2^n = u_2^{n-1}. \quad (3.25)$$

Este es un sistema de ecuaciones 2×2 acoplado para las incógnitas u_1^n y u_2^n . en forma matricial tenemos:

$$\begin{pmatrix} 1 + 2\mu & -\mu \\ -\mu & 1 + 2\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^{n-1} \\ u_2^{n-1} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

En el caso general la ecuación (1) da lugar a un sistema acoplado de ecuaciones de $(N_x - 1) \times (N_x - 1)$ para todas las incógnitas u_i^n en los puntos espaciales $i = 1, \dots, N_x - 1$, entonces podemos reescribir la ecuación (1) como:

$$-\mu u_{i-1}^n + (1 + 2\mu)u_i^n - \mu u_{i+1}^n = u_{i-1}^{n-1} \quad (3.27)$$

para $i = 1, \dots, N_x - 1$. Aquí podríamos imponer las condiciones de frontera, es decir:

$$u_0^n = 0 \quad (3.28)$$

$$u_{N_x}^0 = 0 \quad (3.29)$$

Este sistema de ecuaciones algebraicas se puede escribir en forma matricial:

$$AU = b \quad (3.30)$$

donde $U = (u_0^n, \dots, u_{N_x}^n)$.

La matriz A tiene la forma:

$$A = \begin{pmatrix} A_{0,0} & A_{0,1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ A_{1,0} & A_{1,1} & A_{1,2} & \ddots & & & & & \vdots \\ 0 & A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \ddots & 0 & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & 0 & A_{j,j-1} & A_{j,j} & A_{j,j+1} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & A_{N_x-1,N_x} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & A_{N_x,N_x-1} & A_{N_x,N_x} \end{pmatrix}$$

Los elementos diferentes de cero están dados por:

$$A_{i,i-1} = -\mu \quad (3.31)$$

$$A_{i,i} = 1 + 2\mu \quad (3.32)$$

$$A_{i,i+1} = -\mu \quad (3.33)$$

para los puntos de malla $i = 1, \dots, N_x - 1$.

La primera y la última ecuación del sistema corresponden a las condiciones de frontera, donde la solución es conocida, y por lo tanto debemos tener:

$$A_{0,0} = 1 \quad (3.34)$$

$$A_{0,1} = 0 \quad (3.35)$$

$$A_{N_x,N_x-1} = 0 \quad (3.36)$$

$$A_{N_x,N_x} = 1 \quad (3.37)$$

Finalmente podemos escribir a b como:

$$b = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_i \\ \vdots \\ b_{N_x} \end{pmatrix}$$

con

$$b_0 = 0 \quad (3.38)$$

$$b_i = u_i^{n-1}, \quad i = 1, \dots, N_x - 1 \quad (3.39)$$

$$b_{N_x} = 0 \quad (3.40)$$

La matriz A contiene cantidades que no cambian en el tiempo. Por lo tanto, A puede formarse antes de que entremos en las fórmulas recursivas para la evolución temporal. Sin embargo, el lado derecho b debe actualizarse en cada paso de tiempo.

3.4. Método de Crank–Nicolson

En el esquema de Crank–Nicolson se utilizan diferencias centradas en tiempo y espacio en combinación con un promedio en el tiempo. Se requiere que la ecuación se satisfaga en los puntos de malla espacial, pero en medio de los puntos de malla temporal.

$$\frac{\partial}{\partial t} u \left(x_i, t_{n+\frac{1}{2}} \right) = \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} u \left(x_i, t_{n+\frac{1}{2}} \right) + f \left(x_i, t_{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (3.41)$$

para $i = 1, \dots, N_x - 1$ y $n = 0, \dots, N_t - 1$.

En el lado derecho de la ecuación tenemos una expresión de la forma:

$$\frac{1}{\Delta x^2} \left(u_{i-1}^{n+\frac{1}{2}} - 2u_i^{n+\frac{1}{2}} + u_{i+1}^{n+\frac{1}{2}} \right) + f_i^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.42)$$

El problema es que no calculamos $u_i^{n+\frac{1}{2}}$, entonces podemos remplazar este término por un promedio aritmético:

$$u_i^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2} (u_i^n + u_i^{n+1}) \quad (3.43)$$

Y de igual manera para el término fuente:

$$f_i^{n+\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2} (f_i^n + f_i^{n+1}) \quad (3.44)$$

Reescribiendo el lado izquierdo de la ecuación y re-acomodando tenemos:

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} - \frac{1}{2}\mu (u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}) &= u_i^n + \frac{1}{2}\mu (u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) \\ &+ \frac{1}{2}f_i^{n+1} + \frac{1}{2}f_i^n \end{aligned} \quad (3.45)$$

Como en el esquema de Euler atrasado, las nuevas incógnitas u_{i-1}^{n+1} , u_i^{n+1} , y u_{i+1}^{n+1} están acopladas en un sistema lineal $AU = b$, donde A tiene la misma estructura

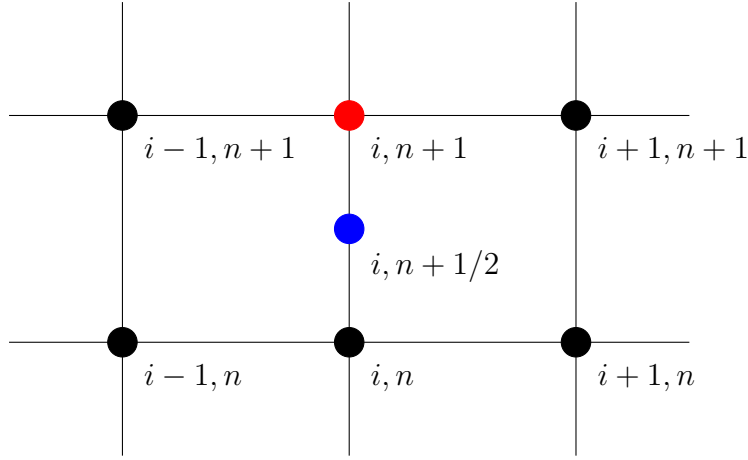


Figura 8: Stencil del esquema de Crank–Nicolson.

que en el caso de Euler atrasado:

$$A_{i,i-1} = -\frac{1}{2}\mu \quad (3.46)$$

$$A_{i,i} = 1 + \mu \quad (3.47)$$

$$A_{i,i+1} = -\frac{1}{2}\mu \quad (3.48)$$

para los puntos internos, $i = 1, \dots, N_x - 1$. Las ecuaciones para los puntos en la frontera son:

$$A_{0,0} = 1 \quad (3.49)$$

$$A_{0,1} = 0 \quad (3.50)$$

$$A_{N_x, N_x-1} = 0 \quad (3.51)$$

$$A_{N_x, N_x} = 1 \quad (3.52)$$

Y b está dado por:

$$b_0 = 0 \quad (3.53)$$

$$b_i = u_i^{n-1} + \frac{1}{2} (f_i^n + f_i^{n+1}), \quad i = 1, \dots, N_x - 1 \quad (3.54)$$

$$b_{N_x} = 0 \quad (3.55)$$

3.5. Método generalizado θ

Para la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} = G(u) \quad (3.56)$$

donde $G(u)$ es algún operador diferencial espacial, el método- θ está dado por:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \theta G(u_i^{n+1}) + (1 - \theta)G(u_i^n) \quad (3.57)$$

La característica importante de este esquema de discretización es que se puede implementar una sola fórmula y luego generar una familia de esquemas dependiendo del valor de θ :

- $\theta = 0$ resulta en el esquema de Euler adelantado en tiempo.
- $\theta = 1$ resulta en el esquema de Euler atrasado en tiempo.
- $\theta = \frac{1}{2}$ resulta en el esquema de Crank–Nicolson en tiempo.

Es decir $t_{n+\theta} = \theta t_{n+1} + (1 - \theta)t_n$.

Aplicando este método a la ecuación de difusión en 1D tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = & \alpha \left(\theta \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + (1 - \theta) \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) \\ & + \theta f_i^{n+1} + (1 - \theta)f_i^n \end{aligned} \quad (3.58)$$

Que nos lleva a un sistema de matrices con:

$$A_{i,i-1} = -\mu\theta, \quad A_{i,i} = 1 + 2\mu\theta, \quad A_{i,i+1} = -\mu\theta \quad (3.59)$$

y para b_i tenemos:

$$b_i = u_i^n + \mu(1 - \theta) \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \Delta t \theta f_i^{n+1} + \Delta t(1 - \theta)f_i^n \quad (3.60)$$

3.6. Difusión en un medio heterogéneo

La difusión en medios heterogéneos normalmente implica un coeficiente de difusión no constante, es decir, $\alpha = \alpha(x)$. Un modelo 1D para difusión considerando este tipo de coeficiente es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x, t), \quad x \in (0, L), t \in (0, T], \quad (3.61)$$

$$u(x, 0) = I(x), \quad x \in [0, L], \quad (3.62)$$

$$u(0, t) = U_0, \quad t > 0, \quad (3.63)$$

$$u(L, t) = U_L, \quad t > 0. \quad (3.64)$$

Y discretizando con el método- θ generalizado tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = & \theta \frac{1}{\Delta x^2} \left(\alpha_{i+\frac{1}{2}} (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) - \alpha_{i-\frac{1}{2}} (u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) \right) \\ & + (1 - \theta) \frac{1}{\Delta x^2} \left(\alpha_{i+\frac{1}{2}} (u_{i+1}^n - u_i^n) - \alpha_{i-\frac{1}{2}} (u_i^n - u_{i-1}^n) \right) \\ & + \theta f_i^{n+1} + (1 - \theta) f_i^n, \end{aligned} \quad (3.65)$$

donde podemos tomar la media aritmética para α , por ejemplo:

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\alpha_i + \alpha_{i+1}).$$

3.7. Ecuación de difusión en 2D.

La ecuación de difusión en dos dimensiones está dada por:

$$u_t = \alpha (u_{xx} + u_{yy}) + f(x, y) \quad (3.66)$$

en el dominio

$$(x, y) \in [0, L_x] \times [0, L_y], t \in [0, T] \quad (3.67)$$

con $u = 0$ en las fronteras y $u(x, y, 0) = I(x, y)$ como condición inicial.

3.7.1. Discretización en 2D.

El dominio temporal $[0, T]$ se representa como un número finito de puntos de malla:

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N_t-1} < t_{N_t} = T$$

y el dominio espacial $[0, L_x] \times [0, L_y]$

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x-1} < x_{N_x} = L_x$$

$$0 = y_0 < y_1 < y_2 < \dots < y_{N_y-1} < y_{N_y} = L_y$$

para una malla uniformemente distribuida, tenemos Δt , Δx , Δy constantes, entonces:

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x, i = 0, \dots, N_x, \\ y_j &= j\Delta y, j = 0, \dots, N_y, \\ t_n &= n\Delta t, n = 0, \dots, N_t \end{aligned} \quad (3.68)$$

donde $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, $i = 0, \dots, N_x$, $\Delta y = y_j - y_{j-1}$, $j = 0, \dots, N_y$ y $\Delta t = t_n - t_{n-1}$, $n = 0, \dots, N_t$, donde N_x , N_y y N_t son los números de puntos en x , y y t respectivamente.

Se puede utilizar la regla unificada θ para la discretización, esta regla nos permite implementar a partir de una sola fórmula, los esquemas de Euler adelantado, Euler atrasado (implícito) y Crank-Nicolson:

- $\theta = 0$: Euler adelantado.
- $\theta = 1$: Euler atrasado.
- $\theta = 1/2$: Crank–Nicolson.

Con lo anterior podemos reemplazar las derivadas parciales por la forma de diferencias finitas:

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = & \theta \left(\alpha \left(\frac{u_{i-1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j-1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j+1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) + f_{i,j}^{n+1} \right) + \\ & (1 - \theta) \left(\alpha \left(\frac{u_{i-1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j-1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) + f_{i,j}^n \right) \end{aligned} \quad (3.69)$$

y reagrupando tenemos:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} - \theta \left(F_x (u_{i-1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i+1,j}^{n+1}) + F_y (u_{i,j-1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j+1}^{n+1}) \right) = & \quad (3.70) \\ (1 - \theta) \left(F_x (u_{i-1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i+1,j}^n) + F_y (u_{i,j-1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j+1}^n) \right) + \\ \theta \Delta t f_{i,j}^{n+1} + (1 - \theta) \Delta t f_{i,j}^n + u_{i,j}^n \end{aligned}$$

donde

$$F_x = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}, \quad F_y = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta y^2} \quad (3.71)$$

La ecuación (3.70) es un sistema lineal acoplado en el nivel $n + 1$. Esto es, se tiene que resolver un sistema algebraico de la forma $Ac = b$, donde A es la matriz de coeficientes, c es el vector de incógnitas y b es el vector de términos independientes.

Para armar el sistema se deben de “mapear” las incógnitas $u_{i,j}^{n+1}$ en el vector c que solo tiene un índice, entonces se introduce un mapeo $m(i, j)$ para un punto de malla con índices (i, j) a una correspondiente incógnita p en el sistema de ecuaciones, es decir:

$$p = m(i, j) = j(N_x + 1) + i \quad \text{o} \quad p = m(i, j) = i(N_y + 1) + j$$

Al mapear las incógnitas en el índice p la matriz de coeficientes que se forma es

una matriz dispersa en la cual la mayoría de los elementos son cero:

Sea p el índice $m(i, j)$ correspondiente al punto de malla (i, j) , los índices de la matriz de coeficientes diferentes de cero están dados por:

$$\begin{aligned}
A_{m(i,j),m(i,j)} &= A_{p,p} = 1 + \theta(F_x + F_y) \\
A_{p,m(i-1,j)} &= A_{p,p-1} = -\theta F_x \\
A_{p,m(i+1,j)} &= A_{p,p+1} = -\theta F_x \\
A_{p,m(i,j-1)} &= A_{p,p-(N_x+1)} = -\theta F_y \\
A_{p,m(i,j+1)} &= A_{p,p+(N_x+1)} = -\theta F_y
\end{aligned} \tag{3.72}$$

Y finalmente el vector de términos independientes:

$$b_p = u_i + (1 - \theta) \left(F_x \left(u_{i-1,j}^n - 2_{i,j}^n + u_{i,j}^n \right) + F_y \left(u_{i,j-1}^n - 2_{i,j}^n + u_{i,j+1}^n \right) \right) + \frac{\theta \Delta t f_{i,j}^{n+1}}{(1 - \theta) \Delta t f_{i,j}^n} \quad (3.73)$$

4. Ecuación de Onda.

La ecuación de onda en una dimensión está dada por:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \quad x \in (0, L), \quad t \in (0, T] \quad (4.1)$$

$$u(x, 0) = I(x), \quad x \in [0, L] \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, 0) = V(x), \quad x \in [0, L] \quad (4.3)$$

$$u(0, t) = 0, \quad t \in (0, T] \quad (4.4)$$

$$u(L, t) = 0, \quad t \in (0, T] \quad (4.5)$$

En este caso la ecuación contiene una derivada parcial de segundo orden en el la parte temporal, debido a esto son necesarias dos condiciones iniciales, la condición (2) especifica la forma inicial de una perturbación que se especifica con la función $I(x)$ y la condición (3) indica la velocidad inicial es cero. Y las condiciones de frontera nos dicen que el desplazamiento u en las fronteras es cero.

La solución $u(x, t)$ varía en espacio y tiempo y describe ondas que se mueven a una velocidad c de izquierda a derecha.

4.1. Discretización.

El dominio temporal $[0, T]$ se representa como un número finito de puntos de malla:

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N_t-1} < t_{N_t} = T$$

y el dominio espacial $[0, L]$

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x-1} < x_{N_x} = L$$

para una malla uniformemente distribuida, tenemos Δt y Δx constantes, entonces:

$$x_i = i\Delta x, i = 0, \dots, N_x, \quad t_n = n\Delta t, n = 0, \dots, N_t \quad (4.6)$$

y $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, $i = 0, \dots, N_x$ y $\Delta t = t_n - t_{n-1}$, $n = 0, \dots, N_t$, donde N_x y N_t son los números de puntos en x y t respectivamente. La solución aproximada u_i^n estará dada en cada punto de malla (x_i, t_n) para $i = 0, \dots, N_x$ y $n = 0, \dots, N_t$ (Figura 9).

Si remplazamos las derivadas parciales de segundo orden por diferencias centradas tenemos:

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} = c^2 \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + f_i^n \quad (4.7)$$

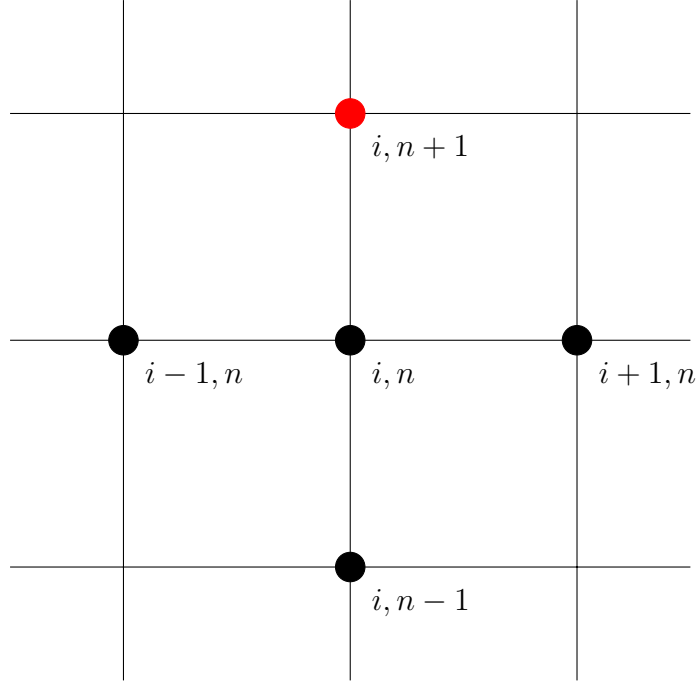


Figura 9: Stencil del esquema centrado en tiempo, centrado en espacio.

También es necesario remplazar la derivada de la condición inicial por una aproximación en diferencias finitas:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x_i, t_0) \approx \frac{u_i^1 - u_i^{-1}}{2\Delta t} = V_i \quad (4.8)$$

De aquí que:

$$u_i^{-1} = u_i^1 - 2\Delta t V_i, \quad i = 0, \dots, N_x \quad (4.9)$$

Y la otra condición inicial puede ser calculada como:

$$u_i^0 = I(x_i), \quad i = 0, \dots, N_x \quad (4.10)$$

Suponiendo que conocemos los valores de u_i^n y u_i^{n-1} , la única incógnita en la ecuación (4.7) sería u_i^{n+1} que podemos obtener por:

$$u_i^{n+1} = -u_i^{n-1} + 2u_i^n + C^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + \Delta t^2 f_i^n \quad (4.11)$$

donde introducimos el parámetro

$$C = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (4.12)$$

Conocido como número de Courant.

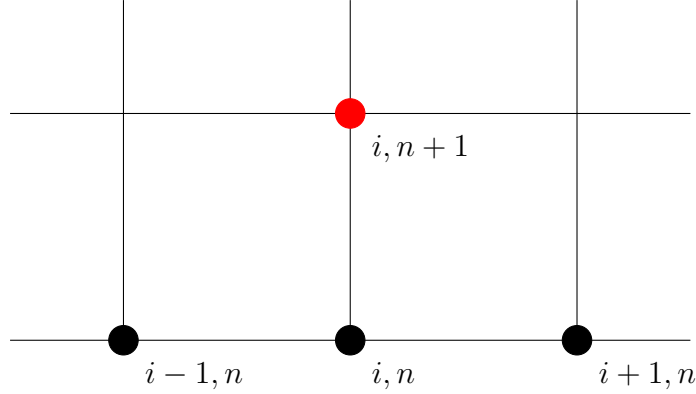


Figura 10: Stencil del esquema en el primer paso de tiempo.

La versión discreta de la EDP presenta solo un parámetro, C , este parámetro, junto con N_x , gobiernan la calidad de la solución numérica. Tanto el parámetro físico primario c como los parámetros numéricos Δx y Δt se agrupan en C .

Se supone que con el esquema anterior, deberíamos de comenzar con $n = 1$, es to es calcular u^2 partiendo de u^0 y u^1 , pero desconocemos el valor de u^1 , además si quisiéramos aplicar la ecuación (4.11) también necesitamos u_i^{-1} que es una cantidad que está fuera del dominio del tiempo (Figura 10). Podemos utilizar una combinación de la condición inicial de la ecuación (4.9) y la ecuación (4.11) para calcular la solución en $n = 0$ y así quitar la dependencia de u_i^{-1} :

$$u_i^1 = u_i^0 - \frac{1}{2}C^2 (u_{i+1}^0 - 2u_i^0 + u_{i-1}^0) + \frac{1}{2}\Delta t^2 f_i^0 \quad (4.13)$$

Con lo anterior, podemos definir los pasos necesarios para la solución numérica de la ecuación de onda:

1. Calcular $u_i^0 = I(x_i)$ para $i = 0, \dots, N_x$.
2. Calcular u_i^1 con (4.13) e imponer $u_i^1 = 0$ en los puntos de frontera $i = 0$ y $i = N_x$, para $n = 1, 2, \dots, N - 1$.
3. Para cada paso de tiempo $n = 1, 2, \dots, N_t - 1$:
 - a) Aplicar (4.11) para obtener u_i^{n+1} para $i = 1, \dots, N_x - 1$.
 - b) Imponer $u_i^{n+1} = 0$ en los puntos de frontera $i = 0, i = N_x$.

4.2. Condiciones de frontera

La condición de frontera $u = 0$ en la ecuación de onda refleja la onda pero u cambia de signo, mientras que la condición $u_x = 0$ refleja la onda preservando el

signo de la solución. Cuando la onda choca con la frontera y es reflejada, se aplica la condición

$$\frac{\partial u}{\partial n} \equiv \mathbf{n} \cdot \nabla u = 0. \quad (4.14)$$

La derivada $\partial/\partial n$ está en la dirección normal hacia afuera de la frontera. Para un dominio de 1D $[0, L]$, tenemos que

$$\left. \frac{\partial}{\partial n} \right|_{x=L} = \left. \frac{\partial}{\partial x} \right|_{x=L}, \quad \left. \frac{\partial}{\partial n} \right|_{x=0} = - \left. \frac{\partial}{\partial x} \right|_{x=0} \quad (4.15)$$

Como estamos utilizando diferencias centradas, podemos aproximar la ecuación (4.14) en $x = 0$ y $t = t_n$ como:

$$\frac{u_{-1}^n - u_n^n}{2\Delta x} = 0 \quad (4.16)$$

El problema es que u_{-1}^n no es un valor de u que se está calculando ya que el punto está fuera de la malla. Sin embargo, si combinamos (4.16) con el esquema para $i = 0$ tenemos:

$$u_i^{n+1} = -u_i^{n-1} + 2u_i^n + C^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \quad (4.17)$$

con lo anterior podemos eliminar la dependencia con u_{-1}^n . De la ecuación (4.14) tenemos que $u_{-1}^n = u_n^n$, que se puede utilizar en (4.16) para aproximar u_0^{n-1} :

$$u_i^{n+1} = -u_i^{n-1} + 2u_i^n + 2C^2 (u_{i+1}^n - u_i^n), \quad i = 0 \quad (4.18)$$

De manera similar para $x = L$ tenemos:

$$\frac{u_{N_x+1}^n - u_{N_x-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (4.19)$$

si combinamos con el esquema para $i = N_x$ podemos obtener un esquema modificado para el valor $u_{N_x}^{n+1}$:

$$u_i^{n+1} = -u_i^{n-1} + 2u_i^n + 2C^2 (u_{i-1}^n - u_i^n), \quad i = N_x \quad (4.20)$$

Esta modificación del esquema en las fronteras se tiene que hacer en la formula especial para la primera iteración.

4.3. Notación de Índices

Con el fin de facilitar la implementación es conveniente introducir una notación de índices. Esto es, podemos escribir x_i seguido de $i \in \mathcal{I}_x$ en lugar de $i = 0, \dots, N_x$

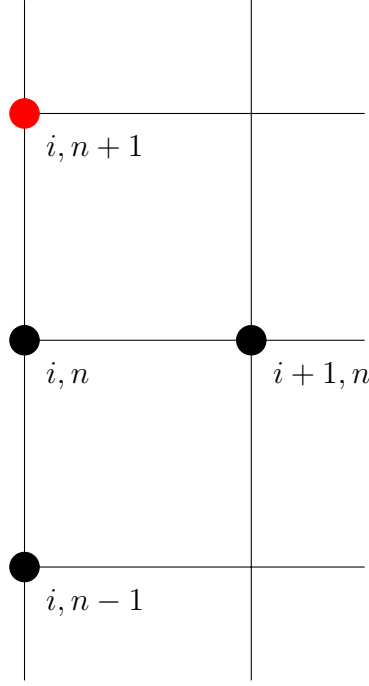


Figura 11: Stencil del esquema centrado en tiempo, centrado en espacio para la condición de frontera en $x = 0$.

donde $\mathcal{I}_s = \{0, \dots, N_x\}$. Esta notación es útil al momento de implementar el algoritmo como código.

El primer índice del conjunto se denominará \mathcal{I}_x^0 y el último \mathcal{I}_x^{-1} . Cuando necesitamos omitir el primer elemento del conjunto, usamos \mathcal{I}_x^+ para el subconjunto restante $\mathcal{I}_x^+ = \{1, \dots, N_x\}$. De manera similar, si el último elemento va a ser eliminado, escribimos $\mathcal{I}_x^- = \{0, \dots, N_x - 1\}$ para los índices restantes. Todos los índices correspondientes a los puntos internos de la malla están especificados por $\mathcal{I}_x^i = \{1, \dots, N_x - 1\}$. Para el dominio del tiempo, resulta natural utilizar explícitamente 0 como primer índice, por lo que normalmente escribiremos $n = 0$ y t_0 en lugar de $n = \mathcal{I}_t^0$.

En el plano x, t se tienen entonces los índices:

$$\mathcal{I}_x = \{0, \dots, N_x\}, \quad \mathcal{I}_t = \{0, \dots, N_t\} \quad (4.21)$$

Tabla 1: Analogía de notación de índices con Python.

Índice	Índice en Python
\mathcal{I}_x	<code>Ix</code>
\mathcal{I}_x^0	<code>Ix[0]</code>
\mathcal{I}_x^{-1}	<code>Ix[-1]</code>
\mathcal{I}_x^-	<code>Ix[:-1]</code>
\mathcal{I}_x^+	<code>Ix[1:]</code>
\mathcal{I}_x^i	<code>Ix[1:-1]</code>

El esquema con notación de índices quedaría como:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{1}{2}C^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \quad i \in \mathcal{I}_x^i, n = 0 \quad (4.22)$$

$$u_i^{n+1} = -u_i^{n-1} + 2u_i^n + C^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \quad i \in \mathcal{I}_x^i, n \in \mathcal{I}_t^i \quad (4.23)$$

$$u_i^{n+1} = 0, \quad i = \mathcal{I}_x^0, n \in \mathcal{I}_t^- \quad (4.24)$$

$$u_i^{n+1} = 0, \quad i = \mathcal{I}_x^{-1}, n \in \mathcal{I}_t^- \quad (4.25)$$

4.4. Velocidad de onda variable.

Consideremos una velocidad de onda variable, esto es: $c = c(x)$, generalmente esto se debe al movimiento de onda propagándose en un dominio compuesto de diferentes medios físicos. Cuando estos medios difieren en sus propiedades físicas, la velocidad de onda c se ve afectada y dependerá de su posición en el espacio.

Para facilitar el desarrollo usaremos una función $q(x) = c^2(x)$, entonces la ecuación de onda queda de la forma:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(q(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x, t) \quad (4.26)$$

y en cada punto de malla tendríamos:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x_i, t_n) = \frac{\partial}{\partial x} \left(q(x_i) \frac{\partial}{\partial x} u(x_i, t_n) \right) + f(x_i, t_n) \quad (4.27)$$

donde tenemos que discretizar el término:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(q(x_i) \frac{\partial}{\partial x} u(x_i, t_n) \right) = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(q(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right]_i^n \quad (4.28)$$

Para la discretización, definimos:

$$\phi = q(x) \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4.29)$$

y utilizamos diferencias centradas en $x = x_i$ para la derivada de ϕ

$$\left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_i^n \approx \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x}, \quad (4.30)$$

discretizando tenemos:

$$\phi_{i+\frac{1}{2}} = q_{i+\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2}}^n \approx q_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}, \quad (4.31)$$

de igual forma:

$$\phi_{i-\frac{1}{2}} = q_{i-\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2}}^n \approx q_{i-\frac{1}{2}} \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}. \quad (4.32)$$

De lo anterior tenemos que:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(q(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right]_i^n \approx \frac{1}{\Delta x^2} \left(q_{i+\frac{1}{2}} (u_{i+1}^n - u_i^n) - q_{i-\frac{1}{2}} (u_i^n - u_{i-1}^n) \right) \quad (4.33)$$

Si q es una función conocida de x , se puede evaluar $q_{i+\frac{1}{2}}$ como $q(x_i + \frac{1}{2})$ con $x_{i+\frac{1}{2}} = x_i + \frac{1}{2}\Delta x$. Sin embargo en muchos casos c es una función discreta en los puntos de malla x_i . Para evaluar q entre los puntos de malla x_i y $x_{i+\frac{1}{2}}$ utilizamos la media aritmética:

$$q_{i+\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2} (q_i + q_{i+1}). \quad (4.34)$$

Sustituyendo y resolviendo para u_i^{n+1} tenemos:

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= -u_i^{n-1} + 2u_i^n \\ &+ \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \left(\frac{1}{2} (q_i + q_{i+1}) (u_{i+1}^n - u_i^n) - \frac{1}{2} (q_i + q_{i-1}) (u_i^n - u_{i-1}^n) \right) \\ &+ \Delta t^2 f_i^n \end{aligned} \quad (4.35)$$

Como sabemos el criterio de estabilidad está dado por $\Delta t \leq \Delta x/c$. En este caso $c = c(x)$, es decir, el criterio de estabilidad dependerá de la posición en el dominio del espacio. Entonces debemos de elegir un Δt lo suficientemente pequeño para que $\Delta t \leq \Delta x/c(x)$, esto es:

$$\Delta t \leq \beta \frac{\Delta x}{\max_{x \in [0, L]} c(x)} \quad (4.36)$$

el parámetro β se incluye como un factor de “seguridad”, en situaciones donde c varíe significativamente, generalmente $\beta < 1$ nos dará una solución estable.

4.4.1. Condiciones de frontera de Neumann.

Las condiciones de frontera que especifican el valor de $\partial u / \partial n$ (o u_n), se conocen como condiciones de frontera de Neumann. Cuando se especifican valores de u se conocen como condiciones de frontera de Dirichlet. Cuando tenemos valores cero en las fronteras ($u_n = 0$ o $u = 0$), se dice que tenemos condiciones de Neumann o Dirichlet homogéneas.

Consideremos condiciones de frontera de Neumann $\partial u / \partial x = 0$ en $x = L = N_x \Delta x$, que se discretizan como

$$\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_{i+1}^n = u_{i-1}^n \quad (4.37)$$

para $i = N_x$. Utilizando el esquema de la ec. (31) en el punto $i = N_x$ con $u_{i+1}^n = u_i^n|_1$ tenemos que:

$$u_i^{n+1} = -u_i^{n-1} + 2u_i^n + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \left(q_{i+\frac{1}{2}}(u_{i-1}^n - u_i^n) - q_{i-\frac{1}{2}}(u_i^n - u_{i-1}^n)\right) + \Delta t^2 f_i^n \quad (4.38)$$

$$= -u_i^{n-1} + 2u_i^n + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \left(q_{i+\frac{1}{2}} + q_{i-\frac{1}{2}}\right) (u_{i-1}^n - u_i^n) + \Delta t^2 f_i^n \quad (4.39)$$

$$\approx -u_i^{n-1} + 2u_i^n + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 2q_i (u_{i-1}^n - u_i^n) + \Delta t^2 f_i^n \quad (4.40)$$

donde usamos:

$$q_{i+\frac{1}{2}} + q_{i-\frac{1}{2}} = 2q_i + 2 \left(\frac{d^2 q}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (4.41)$$

$$\approx 2q_i \quad (4.42)$$

4.5. Ecuación de Onda en 2D.

La ecuación de onda en dos dimensiones en el dominio espacio-tiempo $\Omega \times (0, T]$ con sus correspondientes condiciones iniciales y de frontera está dada por:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c^2 (u_{xx} + u_{yy}) + f(x, y, t), & (x, y) \in \Omega, t \in (0, T] \\ u(x, y, 0) &= I(x, y), & (x, y) \in \Omega \\ u_t(x, y, 0) &= V(x, y), & (x, y) \in \Omega \\ u &= 0, & (x, y) \in \partial\Omega, t \in (0, T] \end{aligned} \quad (4.43)$$

donde $\partial\Omega$ es la frontera del dominio Ω definido en el rectángulo $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$.

La condición inicial es una perturbación que se especifica con la función $I(x)$ y la otra condición indica que la derivada de u en $t = 0$ es igual a una función $V(x, y)$. Y las condiciones de frontera nos dicen que el desplazamiento u en las fronteras es cero.

4.5.1. Discretización en 2D.

El dominio temporal $[0, T]$ se representa como un número finito de puntos de malla:

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{N_t-1} < t_{N_t} = T$$

y el dominio espacial $[0, L_x] \times [0, L_y]$

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{N_x-1} < x_{N_x} = L_x$$

$$0 = y_0 < y_1 < y_2 < \cdots < y_{N_y-1} < y_{N_y} = L_y$$

para una malla uniformemente distribuida, tenemos Δt y Δx constantes, entonces:

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x, i = 0, \dots, N_x, \\ y_j &= j\Delta y, j = 0, \dots, N_y, \\ t_n &= n\Delta t, n = 0, \dots, N_t \end{aligned} \tag{4.44}$$

donde $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, $i = 0, \dots, N_x$, $\Delta y = y_j - y_{j-1}$, $j = 0, \dots, N_y$ y $\Delta t = t_n - t_{n-1}$, $n = 0, \dots, N_t$, donde N_x , N_y y N_t son los números de puntos en x , y y t respectivamente. La solución aproximada $u_{i,j}^n$ estará dada en cada punto de malla (x_i, y_j, t_n) para $i = 0, \dots, N_x$, $j = 0, \dots, N_y$ y $n = 0, \dots, N_t$.

En forma de diferencias finitas la ecuación de onda en 2D tiene la forma:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= -u_{i,j}^{n-1} + 2u_{i,j}^n + \\ &C_x^2 (u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) + C_y^2 (u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n) + \Delta t^2 f_{i,j}^n \end{aligned} \tag{4.45}$$

con C_x y C_y definidas como:

$$C_x = c \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad C_y = c \frac{\Delta t}{\Delta y} \tag{4.46}$$

En las fronteras $u_{i,j}^{n+1} = 0$ para $i = 0, j = 0, \dots, N_y$; $i = N_x, j = 0, \dots, N_y$; $j = 0, i = 0, \dots, N_x$; y $j = N_y, i = 0, \dots, N_x$. Al igual que con el caso en 1D, tenemos que conocer la solución para $n = 0$, entonces:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^1 &= u_{i,j}^0 + \Delta t V_{i,j} + \\ &\frac{1}{2} C_x^2 (u_{i+1,j}^0 - 2u_{i,j}^0 + u_{i-1,j}^0) + \frac{1}{2} C_y^2 (u_{i,j+1}^0 - 2u_{i,j}^0 + u_{i,j-1}^0) + \\ &\frac{1}{2} \Delta t^2 f_{i,j}^0 \end{aligned} \tag{4.47}$$

5. Ecuación de Advección.

Consideremos un problema de advección pura:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} &= 0, & x \in (0, L), t \in (0, T] \\ u(x, 0) &= I(x), & x \in (0, L) \\ u(0, t) &= U_0, & t \in (0, T]\end{aligned}\tag{5.1}$$

En la ecuación anterior v es un parámetro dado que representa la velocidad de transporte de una cantidad u dado un flujo. Solo tenemos una condición de frontera ya que la derivada espacial es de primer orden. En este tipo de problemas la información en $x = 0$ y la condición inicial son transportadas en el dominio en dirección x positiva si tenemos que $v > 0$.

Si eliminamos la condición de frontera y consideramos un proceso en un dominio infinito $(-\infty, \infty)$, la solución a esta EDP es simplemente

$$u(x, t) = I(x - vt).\tag{5.2}$$

5.1. Esquema adelantado en tiempo, centrado en espacio.

Un primer intento de resolver una EDP la anterior normalmente será buscar un esquema de discretización del tiempo que sea explícito para evitar resolver sistemas de ecuaciones lineales. En el espacio, anticipamos que las diferencias centradas son más precisas y, por lo tanto, mejores.

El dominio temporal $[0, T]$ se representa como un número finito de puntos de malla:

$$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N_t-1} < t_{N_t} = T\tag{5.3}$$

y el dominio espacial $[0, L]$

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x-1} < x_{N_x} = L\tag{5.4}$$

para una malla uniformemente distribuida, tenemos Δt y Δx constantes, entonces:

$$x_i = i\Delta x, i = 0, \dots, N_x, \quad t_n = n\Delta t, n = 0, \dots, N_t\tag{5.5}$$

y $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, $i = 0, \dots, N_x$ y $\Delta t = t_n - t_{n-1}$, $n = 0, \dots, N_t$, donde N_x y N_t son los números de puntos en x y t respectivamente. La solución aproximada u_i^n estará dada en cada punto de malla (x_i, t_n) para $i = 0, \dots, N_x$ y $n = 0, \dots, N_t$.

Con lo anterior, podemos escribir la ecuación de advección en su forma discreta:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -v \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}\tag{5.6}$$

y despejando para u^{n+1} , tenemos:

$$u^{n+1} = u^n - \frac{1}{2}C (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad (5.7)$$

donde C es el número de Courant

$$C = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \quad (5.8)$$

5.2. Esquema “Upwind differences” en espacio.

Dado que la PDE refleja el transporte de información junto con un flujo en la dirección x positiva, cuando $v > 0$, es conveniente un esquema que vaya hacia atrás (o contra flujo) en la derivada espacial para recopilar información sobre el cambio de la función, es decir

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_n) = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}. \quad (5.9)$$

Este esquema se conoce como “upwind” es el correspondiente a un esquema atrasado en tiempo, en nombre viene de que es la diferencia en contra del flujo en problemas de advección.

Esta discretización espacial permite obtener soluciones estables con

$$u_i^{n+1} = u_i^n - C (u_i^n - u_{i-1}^n) \quad (5.10)$$

si $C \leq 1$ y si se utiliza el esquema leapfrog la solución es exacta para $C = 1$.

5.3. Esquema Leap–Frog en el tiempo, diferencias centradas en el espacio

Otro esquema explícito es hacer “salto” sobre $2\Delta t$ en el tiempo y combinarlo con diferencias centradas en el espacio:

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - C (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n). \quad (5.11)$$

Se necesita un esquema especial para calcular u^1 , que puede ser otro método diferente.

Una característica particular de la solución numérica de esta ecuación es:

$$u(x_i, t_{n+1}) = u(x_{i-1}, t_n), \quad (5.12)$$

si $x_i = i\Delta x$ y $t_n = n\Delta t$ son puntos en una malla uniforme. Vemos esta relación de:

$$\begin{aligned} u(i\Delta x, (n+1)\Delta t) &= I(i\Delta x - v(n+1)\Delta t) \\ &= I((i-1)\Delta x - vn\Delta t - v\Delta t + \Delta x) \\ &= I((i-1)\Delta x - vn\Delta t) \\ &= u((i-1)\Delta x, n\Delta t) \end{aligned} \quad (5.13)$$

con $v = \Delta x / \Delta t$.

5.4. Método Lax–Wendroff

El método Lax–Wendroff se basa en tres ideas:

1. Expresar la nueva incógnita u_i^{n+1} en términos de cantidades conocidas en $t = t_n$ mediante un polinomio de Taylor de segundo grado.
2. Reemplazar las derivadas temporales en $t = t_n$ por derivadas espaciales, utilizando la EDP.
3. Discretizar las derivadas espaciales por diferencias de segundo orden para lograr un esquema con precisión $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Primero tenemos que el polinomio de Taylor de segundo grado,

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_i^n \quad (5.14)$$

De la PDE tenemos que las derivadas temporales pueden ser sustituidas por derivadas espaciales:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.15)$$

y además,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (5.16)$$

Sustituyendo en la fórmula polinomial del Taylor tenemos:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - v\Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 v^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i^n. \quad (5.17)$$

Para obtener una precisión de segundo orden en el espacio ahora usamos diferencias centrales:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{1}{2} C (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{1}{2} C^2 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (5.18)$$

Este es el esquema explícito de Lax–Wendroff.

De las ecuaciones anteriores, notamos que el método de Lax-Wendroff no es más que un esquema de diferencias centrales en el espacio y Euler Adelantado en tiempo, que sabemos que es inútil debido a la inestabilidad incondicional que presenta, pero aquí se añade un término de difusión artificial $1/2\Delta tv^2$. Esto nos dice que podemos tomar un esquema inestable y agregar algo de difusión para estabilizarlo. Este es un truco común para lidiar con problemas de advección.

5.5. Condiciones de frontera periódicas

Hasta ahora, hemos dado el valor en la frontera izquierda, u_0^n , y usamos el esquema para propagar la señal de la solución a través del dominio. A menudo, queremos seguir tales señales durante largas series de tiempo, es aquí donde las condiciones de frontera periódicas son útiles, ya que permiten que una señal que sale por la frontera derecha entre inmediatamente en la frontera izquierda y se propague de nuevo a través del dominio. La condición de frontera periódica es

$$u(0, t) = u(L, t), \quad u_0^n = u_{N_x}^n \quad (5.19)$$

Esto es, en la primera ecuación, que involucra a u_0^n , insertamos $u_{N_x}^n$, y en la última ecuación, que involucra a $u_{N_x}^{n+1}$ insertamos u_0^{n+1} .

5.6. Aplicaciones de la ecuación de advección.

5.6.1. Transporte de una sustancia.

La difusión de una sustancia tiene lugar en un medio sólido, pero en un fluido podemos tener dos mecanismos de transporte: uno por difusión y otro por advección. Este último surge del hecho de que las partículas de la sustancia se mueven con la velocidad del fluido v de manera que el flujo efectivo ahora consiste en dos y no solo en un componente:

$$q = -\alpha \nabla c + vc. \quad (5.20)$$

Insertado en la ecuación $\nabla \cdot q = 0$ obtenemos el término adicional de advección $\nabla \cdot (vc)$. Muy a menudo tratamos con flujos incompresibles, $\nabla \cdot v = 0$ tales que el término advectivo se convierte en $v \cdot \nabla c$. La ecuación de transporte de masa para una sustancia es entonces:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \cdot \nabla c = \alpha \nabla^2 c. \quad (5.21)$$

Referencias

¹A. Hindmarsh y L. Petzold, “LSODES, Ordinary Differential Equations System Sparse Matrices”, (2005).