



Instituto Politécnico Nacional
Centro de Investigación en Computación

**CONSTRUCCIÓN DE CONDICIONES DE FRONTERA
ARTIFICIALES LOCALES PARA LA SOLUCIÓN NUMÉRICA
DEL PROBLEMA DE TRANSPORTE DE MASA
EN UN MEDIO COMPLEJO EN TIEMPO REAL**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO
DE DOCTOR EN CIENCIAS DE LA COMPUTACIÓN
PRESENTA

M. en C. DENIS FILATOV

Director de Tesis
Dr. MIKHAIL ALEXANDROV ARONOVICH

Codirector de Tesis
Dr. MIKHAIL YUDIN



México D.F., 2003

Resumen

Nota: El español no es la lengua natal del autor.

El objetivo de esta investigación es el desarrollo de un método numérico que permite ahorrar los recursos de la máquina al solucionar el problema de transporte de masa en medios complejos infinitos. El enfoque presentado en el trabajo se basa en la construcción de condiciones de frontera artificiales (CFAs) locales en el marco de la técnica de escisión (o bien, separación; inglés: *splitting*) por procesos físicos.

Para construir las CFAs se supone que la región de interés contiene varias heterogeneidades y fuentes, mientras que en el dominio exterior la ecuación admite la solución analítica. El uso de las técnicas de descomposición de dominio y escisión por coordenadas conduce a las CFAs de una alta precisión, que se utilizan para solucionar el problema de advección-difusión-reacción en un dominio convexo con una frontera artificial suave a trozos.

Se prueba que los problemas de frontera correspondientes están bien planteados, se demuestra que se tiene la convergencia de la solución numérica a la exacta, se presentan estimaciones de errores de las soluciones. Los resultados numéricos confirman el estudio teórico.

Abstract

The objective of this research is the development of a numerical method that permits to save computer resources when solving the mass transportation problem in complex inhomogeneous media. The approach presented in the thesis is based on the construction of local artificial boundary conditions (ABCs) within the framework of splitting by physical processes (also known as time splitting).

To construct the ABCs it is supposed that the region of interest contains various inhomogeneities and sources, while in the exterior domain the problem admits the analytical solution. The use of domain decomposition and splitting by coordinates (or dimensional splitting) leads to highly accurate ABCs which are used for solving the advection-diffusion-reaction equation in an arbitrary convex domain with a piecewise smooth artificial boundary.

It is proved that the corresponding boundary value problems are well-posed; it is demonstrated that the numerical solution converges to the exact one; estimates for the errors are derived. The results of the numerical experiments confirm the theoretical study.

Introducción

Motivación

Al estudiar varios problemas de física matemática, generalmente las soluciones en algún dominio finito son de interés práctico. Sin embargo, en muchos casos las condiciones sobre la frontera de este dominio son desconocidas.

El enfoque más sencillo es colocar la frontera del dominio lo suficientemente lejos para que su influencia en la solución del dominio de interés sea insignificante, y usar allá la condición en el infinito (generalmente se impone cero). Obviamente, la desventaja principal de este enfoque es lo costoso que resulta, en particular, por el tiempo de cómputo invertido en la búsqueda de una solución fuera del dominio de interés. Para disminuir los costos computacionales se puede usar la técnica de mallas anidadas cuando la solución se recalcula consecuentemente de una malla más burda a otra más fina. Sin embargo, este procedimiento causa errores considerables, especialmente al solucionar problemas no estacionarios.

Desde los años 1970's se han venido desarrollando métodos de construcción de *condiciones de frontera artificiales* (CFAs¹) [50, 120]. Al construir las CFAs se supone que los parámetros de la ecuación fuera del dominio de interés son constantes y las fuentes están ausentes. Esta simplificación permite encontrar la solución analítica (puede ser, aproximada) y usarla para construir las condiciones de frontera.

Los métodos de construcción de las CFAs se pueden clasificar en dos grupos: globales y locales.

Los del primer grupo, llamados *globales*, conducen a las CFAs exactas, pero éstas casi siempre son irrealizables desde el punto de vista numérico. La causa de esto último consiste en que las CFAs globales se obtienen mediante transformadas integrales (de Fourier, de Laplace) y por eso se representan en forma de una relación integral no local. Además, algunos de estos métodos son bastante exigentes en la forma de frontera artificial.

¹ En la literatura en inglés frecuentemente se puede encontrar la abreviatura ABCs, *Artificial Boundary Conditions*.

Los del segundo grupo, llamados *locales*, son, al contrario, algorítmicamente más sencillos y a veces no son tan exigentes en la forma de la frontera. Sin embargo, para muchos problemas la precisión de estos métodos no es aceptable. En esta conexión hay que destacar que para las ecuaciones diferenciales que describen varios procesos físicos, en particular, para la ecuación de advección-difusión-absorción², se requieren otras técnicas de construcción de las CFAs, a saber, las que tienen en cuenta las características específicas de cada uno de los procesos físicos. Por el momento tales CFAs no existen en la literatura. Esto determina la actualidad del tema de la tesis.

Objetivo del trabajo

El objetivo del trabajo es el desarrollo de un método de construcción de CFAs locales para la solución numérica de la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción en un dominio convexo arbitrario con una frontera artificial suave a trozos.

Metas de investigación

- 1) Construir familias de operadores diferenciales que se adecuarían al comportamiento real de la solución en los puntos de la frontera artificial.
- 2) Investigar los casos de buen planteamiento de los problemas de frontera obtenidos mediante los métodos del análisis funcional.
- 3) Evaluar teóricamente los errores de las soluciones.
- 4) Hacer experimentos numéricos para confirmar la funcionalidad del método propuesto para valores básicos de los parámetros de la ecuación señalada.
- 5) Hacer experimentos numéricos para demostrar la eficacia del enfoque de las CFAs para reducir el tiempo de cómputo.

Divulgación del trabajo

Los resultados de las investigaciones han sido presentados en congresos internacionales específicos sobre el análisis numérico en Dundee, Reino Unido³ (Numerical Analysis

² A veces esta ecuación se llama *ecuación de advección-difusión-absorción* o *ecuación de transporte de masa*.

³ Beca de la Universidad de Dundee.

2001), los métodos de descomposición en Cocoyoc, México (Domain Decomposition 14, 2002) y Berlín, Alemania⁴ (Domain Decomposition 15, 2003), y los métodos matemáticos en geofísica en Novosibirsk, Rusia (Mathematical Methods in Geophysics 2003). Un informe técnico fue presentado en el Congreso Internacional en Computación (CIC2002), México D.F., México. Sobre el tema de la tesis han sido preparados 9 trabajos.

Volumen y estructura de la tesis

El trabajo consta de una introducción, tres capítulos y una conclusión, contiene 140 páginas, 34 figuras, 18 tablas, una lista de bibliografía de 124 posiciones y un glosario.

En el primer capítulo se describen los métodos existentes para la construcción de las condiciones de frontera artificiales. Se hace su análisis comparativo y se consideran las ventajas y desventajas de varios enfoques.

El segundo capítulo es el principal en el trabajo. Aquí se describe el método propuesto de construcción de las CFAs para la solución numérica de la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción en un dominio convexo con una frontera suave a trozos.

El tercer capítulo muestra los resultados de los experimentos numéricos que confirman la funcionalidad y eficacia del método propuesto.

Agradecimientos

El autor agradece profundamente a su asesor, Prof. Dr. Mikhail Alexandrov, por sus sugerencias en el tema y la oportunidad de preparar la tesis. El trabajo se basa particularmente en los resultados científicos obtenidos por el Dr. Alexandrov en la colaboración con el Prof. Dr. Mikhail Yudin, cuyos consejos valiosos se reconocen con gusto. Por la atención al trabajo y por comentarios muy útiles, el autor también agradece a los Profs. Drs. Juan Díaz de León Santiago, Alexander Gelbukh, Germán González Santos, Adolfo Guzmán Arenas, Sergei Levashkin, Pavel Makagonov, Arkadi Mandel, David Parra Guevara, Zvi Retchkiman Königsberg, Yuri Skiba, Genrikh Tumarkin.

⁴ Beca de la Universidad Libre de Berlin.

Capítulo 1

ESTADO DEL ARTE

Este capítulo está dedicado a la sinopsis de métodos existentes de construcción de condiciones de frontera artificiales en el marco de solución de varios problemas de física matemática. Al describir los métodos se supone que las ecuaciones admiten la solución analítica.

1.1 Métodos de construcción de las CFAs globales

En el trabajo de Halpern [66] el problema de construcción de condiciones de frontera artificiales se considera con respecto a la ecuación de advección-difusión. Usando el método de transformadas integrales, la autora halla la solución de la ecuación en el espacio dual en forma de combinación lineal de las funciones propias del operador diferencial. Luego, haciendo una suposición acerca del comportamiento de la función buscada en el infinito y dejando en la solución solamente los componentes que satisfacen esta condición, mediante la transformada inversa obtiene la CFA exacta global en forma de relación integral entre la función buscada y su derivada sobre la frontera artificial. Esta técnica se aplica en muchos trabajos de otros autores, por eso considerémosla más detalladamente.

Consideremos la ecuación

$$P u = 0, \tag{1.1}$$

donde $P = \partial/\partial t + \partial/\partial x + \mathbf{a} \cdot \nabla - \nu \Delta$. Aquí $u = u(x, y_1, \dots, y_n, t)$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, ∇ es el operador n -dimensional de Hamilton, Δ el operador $(n+1)$ -dimensional de Laplace, $\nu \in \mathbb{R}$. Sea

$x \geq 0$ (el caso de $x \leq 0$ es idéntico). Aplicando a (1.1) la transformada de Fourier en \mathbf{y} y t , obtenemos

$$-v \frac{d^2 \hat{u}}{dx^2} + \frac{d\hat{u}}{dx} + \left(i[\omega + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\eta}] + v|\boldsymbol{\eta}|^2 \right) \hat{u} = 0. \quad (1.2)$$

Aquí $\boldsymbol{\eta}$ y ω son las variables de la transformada de Fourier en \mathbf{y} y t , respectivamente. La solución de la ecuación (1.2) se escribe en la forma

$$\hat{u}(x, \boldsymbol{\eta}, \omega) = \hat{a}(\boldsymbol{\eta}, \omega) e^{\lambda_1 x} + \hat{b}(\boldsymbol{\eta}, \omega) e^{\lambda_2 x}, \quad (1.3)$$

donde $\lambda_1 = \lambda_1(\boldsymbol{\eta}, \omega)$ y $\lambda_2 = \lambda_2(\boldsymbol{\eta}, \omega)$ son las raíces de la ecuación característica

$$-v\lambda^2 + \lambda + i[\omega + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\eta}] + v|\boldsymbol{\eta}|^2 = 0. \quad (1.4)$$

El discriminante de (1.4) es $\delta = 1 + 4iv[\omega + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\eta}] + 4v^2|\boldsymbol{\eta}|^2$. Elijamos $\text{Re} \sqrt{\delta} > 0$. Entonces $\text{Re} \lambda_1 < 0$, $\text{Re} \lambda_2 > 0$. Para que \hat{u} sea acotada cuando $x \rightarrow +\infty$, es necesario que $\hat{b}(\boldsymbol{\eta}, \omega) = 0$, de donde se sigue

$$\hat{u}(x, \boldsymbol{\eta}, \omega) = \hat{a}(\boldsymbol{\eta}, \omega) e^{\lambda_1 x}. \quad (1.5)$$

Derivando (1.5) con respecto a x , obtenemos

$$\frac{d\hat{u}}{dx} - \lambda_1 \hat{u} = 0. \quad (1.6)$$

Aplicando a (1.6) la transformada inversa de Fourier y poniendo $x = x_0 \geq 0$, encontramos

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_1(\boldsymbol{\eta}, \omega) \hat{u}(x_0, \boldsymbol{\eta}, \omega) e^{i(\omega t + \boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{y})} d\omega d\boldsymbol{\eta}. \quad (1.7)$$

La expresión (1.7) es la condición de frontera artificial exacta no local en el punto $x = x_0$.

En otro trabajo de la misma autora [67] se considera una clase más amplia de problemas, los así llamados *sistemas parabólicos incompletos* (inglés: *incompletely*

parabolic systems), es decir, los sistemas hiperbólicos de ecuaciones, en los cuales existen perturbaciones parabólicas (pequeñas) de órdenes altos. Un ejemplo de esos sistemas son las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido viscoso. Análogamente a la técnica usada en [66], aquí también se aplica el método de transformadas integrales, después de que en la solución se dejan sólo las funciones propias, cuya combinación rinde el comportamiento deseado de la solución en el infinito.

Los trabajos de Engquist y Majda [37-39] están dedicados a la construcción de las CFAs para la solución de varios sistemas de onda. Su enfoque se basa en la representación de la solución general en forma de superposición de soluciones parciales y eliminación de todas las ondas incidentes⁵. De tal modo, la solución del problema en el dominio exterior está compuesta solamente por las ondas reflejadas, que permite obtener la asintótica deseada en el infinito. La eliminación de las ondas incidentes en [37-39] se ejecuta exactamente, y como en [66, 67] aquí también se aplica el método de transformadas integrales.

Consideremos un ejemplo. Se tiene la ecuación bidimensional de onda

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}. \quad (1.8)$$

Sea $x \leq 0$. Denotemos por ω , ξ y η las variables de la transformada de Fourier en t , x y y , respectivamente. Una solución de (1.8) es

$$u(x, y, t) = e^{i(\omega t - \xi x - \eta y)}. \quad (1.9)$$

Sustituyendo (1.9) en (1.8), obtenemos la relación $\omega^2 = \xi^2 + \eta^2$, de donde para las ondas incidentes encontramos $\xi = +\sqrt{\omega^2 - \eta^2}$. Aplicando a (1.8) la transformada de Fourier en y y t , obtenemos

⁵ Ya que las ondas incidentes se puede interpretar como reflexiones (de la frontera) de las ondas reflejadas, tales CFAs a veces se llaman *no reflejadas* (inglés: *non-reflecting boundary conditions*, NRBC).

$$\frac{d^2 \hat{u}}{dx^2} + \xi^2 \hat{u} = 0, \quad (1.10)$$

donde $\hat{u}(x) \equiv \hat{u}_{\eta, \omega}(x)$. Sus dos linealmente independientes soluciones son $\hat{u}_1(x) = e^{-i|\xi|x}$ y $\hat{u}_2(x) = e^{i|\xi|x}$, el primero de los cuales corresponde a una onda reflejada, mientras el segundo corresponde a una incidente. Ya que la condición de frontera exacta en el punto $x = x_0 \leq 0$ debe eliminar todas las ondas incidentes, tenemos $\hat{u}_2(x)|_{x=x_0} = 0$. Derivando $\hat{u}_1(x)$ con respecto a x , encontramos

$$\left(\frac{d\hat{u}}{dx} + i|\xi|\hat{u} \right) \Big|_{x=x_0} = 0, \quad (1.11)$$

o bien, teniendo en cuenta $\xi = +\sqrt{\omega^2 - \eta^2}$,

$$\left(\frac{d\hat{u}}{dx} + i\sqrt{\omega^2 - \eta^2}\hat{u} \right) \Big|_{x=x_0} = 0. \quad (1.12)$$

Esta relación es la condición de frontera artificial exacta para los valores η y ω fijos. Aplicando a (1.12) la transformada inversa de Fourier, hallamos

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_0} + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} i\sqrt{\omega^2 - \eta^2} \hat{u}(x_0, \eta, \omega) e^{i(\omega t + \eta y)} d\omega d\eta = 0. \quad (1.13)$$

La fórmula (1.13) es la CFA exacta global que elimina todas las ondas incidentes en el punto $x = x_0$. Debido a la presencia del factor $\sqrt{\omega^2 - \eta^2}$ bajo el signo de la integral (este factor se llama *operador pseudo-diferencial* (inglés: *pseudo-differential operator*, “ ψ DO”), comp. con (1.7) y la expresión para $\lambda_1 = (1 - \sqrt{\delta})/(2\nu)$), la condición obtenida no admite una representación explícita.

Gustafsson en [59] considera otro problema hiperbólico, que representa dificultades adicionales desde el punto de vista de construcción de las CFAs. Así, a diferencia de Engquist y Madja, él no requiere que la condición inicial sea distinta de cero exclusivamente dentro del dominio de interés, pero también lo acepta fuera de la frontera

artificial. El uso de las transformadas de Laplace en tiempo y de Fourier en espacio conduce a una relación heterogénea (a diferencia de (1.12)) entre la función buscada y su derivada en el espacio dual, de donde después de la ejecución de las transformadas inversas se obtiene la condición de frontera artificial exacta no local. La misma técnica se utiliza por Gustafsson en [58], Gustafsson y Sundstrom en [60], Ferm y Gustafsson en [40]. Una peculiaridad del trabajo [60] es que la CFA se representa en forma de condición mixta de Dirichlet-Neumann (o bien, de Robin); además, la condición sobre el flujo corresponde al término difusivo, mientras que la condición sobre la función misma es responsable sólo por el proceso de transporte [92]. Esta representación se puede interpretar no rigurosamente como la escisión (o bien, separación) por procesos físicos.

Hay que notar que la desventaja principal de los métodos de construcción de las CFAs, que se basan en el uso de la transformada de Fourier en espacio, es que son aplicables solamente en el caso de una frontera artificial plana. Sin embargo, en muchas situaciones prácticas aparece la necesidad en las CFAs de ser más flexibles desde el punto de vista de la forma de frontera artificial.

En una serie de artículos [108-110, 112] Sofronov propone un método de construcción de las CFAs para la solución de la ecuación tridimensional de onda en el caso de una frontera artificial esférica. Su enfoque se basa en la aplicación de la transformada de Laplace en tiempo junto con la expansión de la solución en una serie de Fourier por polinomios esféricos [5] (véase también [99]). Una técnica similar se utiliza por Sofronov al construir las CFAs para el problema de modelación del flujo de un fluido no viscoso compresible –los resultados de estas investigaciones fueron presentados en [111, 113]. Un método parecido proponen en [62-65] Hagstrom y H. Keller, y también Dgaygui y Joly en [36].

Es necesario destacar que los métodos, propuestos por Hagstrom y H. Keller y también por Sofronov, potencialmente son más flexibles desde el punto de vista de la geometría del dominio computacional. Sin embargo, ya que en las series de Fourier los autores utilizaron las funciones básicas con soporte infinito, sus CFAs son, empero, exigentes en la forma de la frontera. En esta conexión, para extender sus enfoques, como las funciones básicas en la serie de Fourier se pueden usar, por ejemplo, las wavelets [34].

En los trabajos [53, 80] Givoli y J. Keller construyen las CFAs al solucionar las ecuaciones de Laplace y Helmholtz. Su enfoque se basa en la así llamada *aplicación Dirichlet-a-Neumann* (*aplicación DaN*, inglés: *Dirichlet-to-Neumann (DtN) map*). Este método permite representar la derivada normal de la solución en un punto de la frontera artificial por medio de valores de la solución misma, es decir, se tiene la igualdad $\partial u / \partial n = M u$, donde M es un operador no local, definido sobre la frontera artificial, mientras n denota la normal exterior a la frontera. Por ejemplo, para el problema bidimensional

$$\Delta u + k^2 u = f \quad \text{fuera de } \mathbf{R}, \quad (1.14)$$

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial n} = g \quad \text{sobre } \Gamma, \quad (1.15)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sqrt{r} \left(\frac{\partial u}{\partial r} - iku \right) = 0, \quad (1.16)$$

donde \mathbf{R} es una región con una frontera suave Γ , que es rodeada por una frontera artificial esférica S del radio a , el dominio de interés está entre Γ y S , el método de la aplicación DaN conduce a la condición de frontera de la forma (el sumando de $m = 0$ debe ser multiplicado por $1/2$)

$$\frac{\partial u(r, \theta)}{\partial r} \Big|_{r=a} = \frac{1}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{k H_m^{(1)}(ka)}{H_m^{(1)}(ka)} \int_0^{2\pi} \cos m(\theta - \theta') u(a, \theta') d\theta'. \quad (1.17)$$

Aquí $H_m^{(1)}$ es la función de Hankel de orden m (véase, por ejemplo, [11]). La técnica, basada en la aplicación DaN, se utiliza también en el trabajo de Givoli y Vigdergauz [55], Givoli y J. Keller [54], Harari y Hughes [68], Grote y J. Keller [56, 57], Givoli [51], Thompson y Ianculescu [114].

Es obvio que los enfoques, usados por Givoli y J. Keller, Harari y Hughes, Grote y J. Keller, conducen a las CFAs que son más flexibles desde el punto de vista de la forma de frontera artificial. Sin embargo, sus CFAs requieren un tratamiento muy cuidadoso en los puntos singulares de la frontera, es decir, en las esquinas, que es una desventaja del método de DaN.

La realización práctica de las CFAs al solucionar los problemas no estacionarios introduce dificultades adicionales en comparación con el caso estacionario. La causa principal es la globalidad temporal de la relación integral obtenida (véase, por ejemplo, [38, 39, 59, 66, 67]), que conduce a la necesidad de guardar en la memoria de la computadora la información sobre la solución para todos momentos de tiempo. Sin embargo, existen varias clases de problemas, para los cuales se pueden indicar expresiones locales para las condiciones de frontera artificiales. En esta conexión mencionemos acerca del trabajo de Givoli y Cohen [52], donde se considera la ecuación tridimensional de onda. Los autores utilizan la integral de Kirchgoff, es decir, la solución fundamental de esta ecuación (véase, por ejemplo, [5]). El aspecto principal es que en el caso de tres dimensiones la integración de la función bajo la integral se ejecuta por un dominio finito. Notemos que el enfoque, usado por Givoli y Cohen, no es tan exigente en la forma de frontera artificial, como, por ejemplo, el método de transformadas integrales [38, 39, 59, 66, 67]. No obstante, este enfoque no es aplicable para la construcción de las CFAs al solucionar otros tipos de ecuaciones, ya que las últimas tienen otras –¡globales!– soluciones fundamentales. La idea del uso de la fórmula de Kirchgoff está en la base de los trabajos de Ting y Miksis [115], de Moerlose y de Zutter [35], Mathews y Newhouse [85], Nedelec [91].

En una serie de artículos [118-121] Tsynkov, y también en [100] Tsynkov y Ryaben’kii construyen las condiciones de frontera artificiales, basándose en el método de potenciales de diferencias⁶. La esencia de su enfoque consiste en lo siguiente.

Sea la ecuación diferencial

$$Lu = f, \quad \text{supp } f \subset D_I \subset \mathbb{R}^n. \quad (1.18)$$

y sea Γ una frontera artificial del dominio D_I . Consideremos en $D_E = \mathbb{R}^n \setminus D_I$ el problema con coeficientes constantes

$$\tilde{L}u = 0, \quad r = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2} \in D_E, \quad (1.19)$$

$$u \rightarrow 0, \quad r \rightarrow +\infty \quad (1.20)$$

⁶ En la literatura en inglés el método se llama *Method of Difference Potentials* o *Difference Potentials Method* (DPM).

y definamos el operador $\xi = [Tr u]_{|\Gamma}$, que se llama *rastra clara* (inglés: *clear trace*) [20] (véase también [97, 98]). Introduzcamos en todo \mathbf{R}^n el problema auxiliar

$$\tilde{\mathcal{L}} u = g, \quad \text{supp } g \subset D_l \subset \mathbf{R}^n, \quad (1.21)$$

$$u \rightarrow 0, \quad r \rightarrow +\infty. \quad (1.22)$$

La función g en el lado derecho de (1.21) se elige tal que se cumpla $\xi = [Tr \tilde{\mathcal{L}}^{-1} g]_{|\Gamma}$. Por lo tanto, la construcción de las CFAs se reduce a la búsqueda de la solución del problema (1.21)-(1.22), después de que los valores de la función $u = \tilde{\mathcal{L}}^{-1} g$ sobre Γ se utilizan en calidad de una condición de frontera artificial para el problema (1.18). Una de las peculiaridades del método de Tsynkov y Ryaben’kii consiste en que el operador $\tilde{\mathcal{L}}^{-1}$ se representa en forma de diferencias finitas, que en la etapa de solución numérica permite adaptar las CFAs para cada caso concreto de algoritmos numéricos.

Debe advertirse que el enfoque descrito no es exigente en la geometría del dominio computacional. Sin embargo, desde el punto de vista numérico la desventaja de estas CFAs es su globalidad; es obvio, empero, que en la práctica aparece la necesidad de usar condiciones de frontera artificiales locales.

1.2 Métodos de construcción de las CFAs locales

¿Cómo obtener las CFAs locales? El procedimiento más sencillo es usar varias aproximaciones para las condiciones globales ya conocidas. Como ya se ha señalado, la globalidad de las CFAs exactas está causada por la presencia de un factor adicional en la expresión integral, que se llama *operador pseudo-diferencial* (“O Ψ D”). Esto no permite invertir la integral explícitamente. Dos ejemplos de tales operadores son las expresiones $\lambda_1 = (1 - \sqrt{\delta})/(2\nu)$ y $\sqrt{\omega^2 - \eta^2}$ en las fórmulas (1.7) y (1.13), respectivamente.

Utilizando varias aproximaciones racionales (de Taylor, de Padé) para las expresiones del O Ψ D en el espacio dual y suponiendo que se cumple $\eta/\omega \ll 1$ (véase las fórmulas (1.8)-(1.13)), Engquist y Madja en [38] obtienen una familia infinita de

condiciones de frontera artificiales para la ecuación bidimensional de onda. Dos primeros miembros de esta secuencia son

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_0} = 0 \quad (1.23)$$

y

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} \right) \Big|_{x=x_0} = 0. \quad (1.24)$$

La condición de frontera (1.23) corresponde a la aproximación de Taylor de orden cero para la expresión $\sqrt{\omega^2 - \eta^2}$, es decir $\sqrt{\omega^2 - \eta^2} = \omega \left(1 + O(\eta^2 / \omega^2) \right)$. La condición de frontera (1.24) aparece al usar la aproximación de 1^{er} orden $-\sqrt{\omega^2 - \eta^2} = \omega \left(1 - \frac{1}{2} \eta^2 / \omega^2 + O(\eta^4 / \omega^4) \right)$. En [38] se presentan dos siguientes miembros de la secuencia (1.23), (1.24), que corresponden a las aproximaciones de Padé y Taylor de 2^o orden. Higdon en [72-75] generalizó las CFAs de Engquist y Madja para el caso, cuando el ángulo de incidencia de la onda es distinto de $\pi/2$.

El enfoque señalado se utilizó por Gustafsson en [59] y Giles en [49] (solución de sistemas hiperbólicos), Jiang y Wong en [77] (ecuaciones hiperbólicas de 2^o orden), Halpern en [66] (la ecuación de advección-difusión), Jin y Braza en [78], Halpern en [67], Tourrette en [116], Johnsen y Lynch en [79] (las ecuaciones de Navier-Stokes), Blaschak y Kriegsmann en [33] (las ecuaciones de Maxwell), Kröner en [81] (la ecuación de Euler), Hadley en [61], Schmidt y Deuffhard en [101] (las ecuaciones de Schrödinger y Fresnel). En el trabajo de Mur [90] en el marco de la solución de un problema de difracción también se utiliza el método, propuesto por Engquist y Madja.

En los trabajos de Harari y Hughes [68] y de Grote y J. Keller [56] se hace el análisis de las aplicaciones DaN finitas, a saber: la aplicación original se representa en forma de serie, y luego, a partir de una $m < \infty$, los términos apropiados de la expansión se ignoran, y por lo tanto posteriormente se considera solamente un número finito de los sumandos. Las aplicaciones DaN finitas también se pueden interpretar como aproximaciones de las condiciones de frontera artificiales globales originales.

Es obvio que las CFAs, construidas por los procedimientos descritos, poseen las mismas desventajas, que sus análogos globales.

Para obtener las CFAs locales Bayliss y Turkel en [29-32] proponen otro enfoque, diferente del uso de aproximaciones para el $O\psi D$. En lugar de esto, la solución del problema en el campo lejano⁷ se representa en forma de serie, después de que se construye una familia de operadores diferenciales especiales de tal modo que los primeros m términos de la expansión se transformen a cero. Por ejemplo, para la ecuación tridimensional de onda $\square u = 0$, donde \square es el operador de d'Alembert, la expansión de la solución en el campo lejano en las coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) tiene la forma

$$u(t, r, \theta, \phi) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{u_m(t-r, \theta, \phi)}{r^m}. \quad (1.25)$$

Entonces, al definir

$$\mathbf{B}_m = \prod_{l=1}^m \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2l-1}{r} \right), \quad (1.26)$$

tenemos $\mathbf{B}_m u = O(r^{-2m-1})$, y por lo tanto la expresión $\mathbf{B}_m u|_{r=R_0} = 0$ es la condición de frontera artificial local de orden r^{-2m-1} . Una idea similar está en la base de los trabajos de Peterson [94] y Mitra et al. [87] (véase también [8, 123]).

Enfaticemos que aunque el enfoque propuesto por Bayliss y Turkel no utiliza la transformada de Fourier en espacio, las CFAs obtenidas en sus trabajos dependen de la geometría del dominio computacional. La causa de esto último es que en [29-32] se usan las coordenadas esféricas, y por eso la expansión de la forma (1.25) será diferente en el caso de, por ejemplo, una dimensión. Además, otra desventaja de tal enfoque es que la representación asintótica (1.25) puede ser válida bastante lejos del dominio de interés.

Una idea original de construcción de las CFAs locales al solucionar los problemas de geoelectricidad fue propuesta en una serie de trabajos [23-26] por Yudin, y también por Yudin y Alexandrov [1, 2, 27]. En el marco de su enfoque el espacio original \mathbf{R}^3 se representa en forma de unión de dominios con traslapes. Uno de los dominios –el interior (o

⁷ En la literatura en inglés se puede encontrar la frase *far field*.

bien, computacional)— es finito y contiene varias heterogeneidades y/o fuentes, mientras los otros —el campo lejano— se suponen ser (semi-)infinitos con los parámetros constantes. La solución del problema interior se busca numéricamente, las soluciones exteriores se calculan analíticamente, el proceso iterativo permite ensamblar las soluciones de los dominios inmediatos en los traslapes. Hay que notar que la idea original de descomposición de dominio es de la autoría de Schwarz [102] (véase también [22]).

Es necesario constatar que el enfoque de Yudin tiene menos desventajas. Así, por ejemplo, este método no es tal exigente en la forma de frontera artificial como, digamos, [37-39, 59, 66]. Sin embargo, en dependencia de los parámetros del problema y también del tamaño de los traslapes, a veces el número de iteraciones debe ser bastante grande para obtener la solución con una precisión aceptable.

Un asunto importante es el buen planteamiento de los problemas que aparecen al utilizar unos u otros métodos de construcción de las CFAs. Las investigaciones en esta área fueron hechas por muchos autores teóricamente y experimentalmente (véase, por ejemplo, [29, 37, 53, 57] y muchos trabajos más). En particular, Engquist y Madja en [37] mostraron que la condición de frontera (1.23), obtenida por la aproximación de Taylor de 1^{er} orden, conduce a un problema bien planteado, mientras el problema con la condición de frontera (1.24) está mal planteado. Harari y Hughes en [68] analizan los problemas, que aparecen al construir las CFAs locales sobre la base del método de DaN. El problema es que la operación de truncamiento de la condición de frontera global puede conducir a un problema mal planteado, cuando, por ejemplo, la ecuación tiene varias soluciones o no tiene ninguna. En [68] se afirma que la unicidad de la solución se garantiza por la selección del número m mayor que la cantidad ka (véase la fórmula (1.17)). Trefethen y Halpern en [117] estudian el asunto sobre varias aproximaciones racionales (de Taylor, de Padé, de Chebyshev) de los operadores pseudo-diferenciales, y caracterizan la estabilidad de la solución en los términos de propiedades algebraicas de los aproximantes (colocación de ceros, polos, etc).

1.3 Cuestiones relacionadas

Mencionemos acerca de algunos métodos, relacionados con el problema de construcción de las CFAs.

A veces condiciones de frontera adecuadas se sugieren por la especificidad misma del problema considerado. Así, por ejemplo, al modelar el proceso de propagación de una mancha de petróleo por la superficie del mar se utiliza la condición mixta de Dirichlet-Neumann. Esta condición suficientemente bien describe el comportamiento de la solución sobre la frontera, y por eso no hay necesidad de usar métodos más sofisticados [106]. Bajo unas restricciones la condición mencionada es aplicable al modelar los procesos de propagación de una sustancia en la atmósfera [93, 103, 104, 105, 107] (también [82, 122]).

Otro enfoque para la construcción de las CFAs puede consistir en la búsqueda de tal frontera artificial, en cuyos puntos la solución satisface una condición dada a priori. Particularmente, se puede indicar una clase de problemas, para los cuales las derivadas normales de las soluciones son iguales a cero en los puntos de la frontera artificial. Éste y algunos otros asuntos se discuten en el libro de Oleinik y Radkevich [19].

En algunos casos los datos conocidos a priori son las soluciones mismas en los puntos de la frontera en momentos de tiempo anteriores. Entonces estas soluciones se pueden extrapolar a los siguientes momentos de tiempo para construir las CFAs. La técnica mencionada se utiliza al modelar los procesos de contaminación del aire en México D.F. [88].

Es necesario notar que aunque las soluciones obtenidas con el uso de los métodos señalados pueden ser de una precisión alta, estos enfoques son bastante particulares, y por lo tanto no son aplicables en la mayoría de los casos.

1.4 Conclusión del primer capítulo

En el capítulo se consideraron los enfoques principales para la construcción de condiciones de frontera artificiales al solucionar varios problemas de física matemática. Todo lo antedicho permite concluir que los métodos existentes poseen muchas restricciones: algunos son aplicables solamente en el caso de una frontera artificial plana, otros funcionan cuando la frontera es suave, terceros se orientan a un tipo concreto de ecuaciones. Además, muchos de los métodos son aproximados, lo que también deja una posibilidad para mejorar. Por lo tanto, el problema de construcción de condiciones de frontera artificiales sigue siendo un problema de actualidad.

Capítulo 2

EL MÉTODO DE CONSTRUCCIÓN DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA ARTIFICIALES

La ecuación de advección-difusión-absorción es una de las ecuaciones básicas de física matemática. Esta ecuación es estándar al investigar varios aspectos conectados con los problemas de transporte, difusión y absorción de una sustancia en un medio externo (véase, por ejemplo, [16, 86]). Más adelante en este capítulo se presenta un método de construcción de condiciones de frontera artificiales locales para resolver la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción en un conjunto convexo arbitrario con una frontera suave a trozos.

2.1 Planteamiento del problema

Consideremos la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial(u\varphi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \sigma \varphi = f, \quad (2.1)$$

o bien,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\varphi) - \nabla \cdot (\mu \nabla \varphi) + \sigma \varphi = f. \quad (2.2)$$

Aquí $\varphi = \varphi(x, y, t)$ es la función buscada, que caracteriza la densidad de una sustancia en un punto (x, y) en un momento de tiempo t , $\mathbf{U} = (u(x, y, t), v(x, y, t))$ es el campo vectorial de velocidades, que determina la dirección de transporte de la sustancia en cada

punto del plano \mathbb{R}^2 , $\mu = \mu(x, y, t) \geq 0$ es el coeficiente de difusión, $\sigma = \sigma(x, y, t) \geq 0$ es el coeficiente de absorción, $f = f(x, y, t)$ es la función de fuentes y ∇ es el operador bidimensional de Hamilton. Se supone que las funciones u y v satisfacen la condición de continuidad

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.3)$$

La ecuación (2.1) complementemos con la condición inicial

$$\varphi|_{t=0} = g(x, y) \quad (2.4)$$

y la condición de frontera en el infinito

$$\varphi \rightarrow 0 \text{ cuando } x, y \rightarrow \pm\infty. \quad (2.5)$$

La solución del problema (2.1), (2.4), (2.5) se busca en un conjunto convexo Ω con una frontera artificial suave a trozos Γ . Se supone que los parámetros u , v , y μ son constantes fuera del dominio $\bar{\Omega}$, mientras las fuentes están ausentes, es decir, $f = 0$ en $\mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}$.

2.2 Escisión por procesos físicos

Desde el punto de vista físico la ecuación (2.1) describe tres procesos diferentes. El primero, la propagación de la sustancia por una trayectoria, se describe por la ecuación de transporte

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \frac{\partial(u\varphi_1)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi_1)}{\partial y} = 0, \quad (2.6)$$

el segundo está conectado con la difusión de la sustancia –

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \right) = 0, \quad (2.7)$$

el tercero –con su absorción:

$$\frac{\partial \varphi_3}{\partial t} + \sigma \varphi_3 = f. \quad (2.8)$$

(Sin la pérdida de generalidad las fuentes f se pueden poner sólo en el lado derecho de la ecuación (2.8).) En tal planteamiento la solución del i -ésimo problema es la condición inicial para el $(i+1)$ -ésimo, es decir,

$$\varphi_1|_{t=0} = g(x, y), \quad (2.9)$$

$$\varphi_2|_{t=0} = \varphi_1(x, y, t)|_{t=\tau}, \quad (2.10)$$

$$\varphi_3|_{t=0} = \varphi_2(x, y, t)|_{t=\tau}. \quad (2.11)$$

Demostremos que la solución consecutiva de los problemas (2.6), (2.9), (2.7), (2.10) y (2.8), (2.11) es equivalente a la solución del problema original (2.1), (2.4), (2.5). Para simplicidad supongamos que la solución se busca en todo el plano \mathbb{R}^2 y que las funciones u , v , μ y σ son constantes, mientras $f \equiv 0$.

Consideremos las integrales de Fourier

$$\varphi = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\xi, \eta, t) e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta, \quad (2.12)$$

$$g = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi, \eta) e^{i(\xi x + \eta y)} d\xi d\eta.$$

Entonces la solución exacta del problema (2.1), (2.4), (2.5) tiene la forma

$$\varphi = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi, \eta) e^{i[\xi(x-ut) + \eta(y-vt)] - [\sigma + \mu(\xi^2 + \eta^2)]t} d\xi d\eta. \quad (2.13)$$

Si para las funciones φ_1 , φ_2 , φ_3 también se tienen las representaciones del tipo (2.12), entonces para sus componentes Fourier Φ_1 , Φ_2 , Φ_3 se tienen las expresiones

$$\Phi_1(t) = Ge^{-i(\xi u + \eta v)t}, \quad (2.14)$$

$$\Phi_2(t) = \Phi_1(\tau)e^{-\mu(\xi^2 + \eta^2)t}, \quad (2.15)$$

$$\Phi_3(t) = \Phi_2(\tau)e^{-\sigma t}. \quad (2.16)$$

Aquí ξ y η son fijos. Poniendo en (2.14) $t = \tau$ y sustituyendo $\Phi_1(\tau)$ en (2.15), hallamos $\Phi_2(\tau) = Ge^{-i(\xi u + \eta v)\tau} e^{-\mu(\xi^2 + \eta^2)\tau}$. Luego, sustituyendo $\Phi_2(\tau)$ en (2.16), obtenemos

$$\Phi_3(\tau) = Ge^{-i(\xi u + \eta v)\tau} e^{-\mu(\xi^2 + \eta^2)\tau} e^{-\sigma\tau}, \quad (2.17)$$

de donde

$$\varphi_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi, \eta) e^{i[\xi(x-u\tau) + \eta(y-v\tau)] - [\sigma + \mu(\xi^2 + \eta^2)]\tau} d\xi d\eta. \quad (2.18)$$

Se puede ver que cuando $t = \tau$, las expresiones (2.13) y (2.18) son idénticas.

Observación 2.1. En la realidad las funciones u , v , μ y σ no son constantes, también la situación se complica debido a la presencia de fuentes f , y por eso el algoritmo de escisión no da la solución exacta cuando $t = t_n$, $n \in \mathbb{N}$. Por lo tanto, al solucionar los problemas numéricamente, el paso temporal τ debe ser bastante pequeño. Su valor concreto se determina experimentalmente.

El método de escisión por procesos físicos se usa ampliamente para resolver varios problemas de dinámica de fluidos y gases (véase, por ejemplo, [7, 9, 21]), meteorología y oceanología [13, 14, 17, 18], etc. Sin embargo, por el momento este enfoque no se ha usado en los trabajos, dedicados al problema de construcción de las CFAs. Más adelante se consideran dos problemas: la sección 2.3 está dedicada a la construcción de condiciones de

frontera artificiales para la solución de la ecuación de transporte, mientras que en la sección 2.4 se presenta un método de construcción de las CFAs para el problema de difusión¹.

2.3 Advección

Consideremos la ecuación de transporte (para generalidad vamos a suponer que las fuentes f son distintos de cero en el lado derecho)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial(u\varphi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi)}{\partial y} = f, \quad (2.19)$$

o bien, en la forma vectorial,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\varphi) = f. \quad (2.20)$$

Aquí $\varphi = \varphi(x, y, t)$ es la función buscada, $\mathbf{U} = (u(x, y, t), v(x, y, t))$ es el campo de velocidades, mientras $f = f(x, y, t)$ denota las fuentes. Se supone que para los componentes del campo \mathbf{U} se cumple la condición de continuidad

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0. \quad (2.21)$$

Ecuación (2.19) complementemos con la condición inicial

$$\varphi|_{t=0} = g(x, y) \quad (2.22)$$

y la condición de frontera en el infinito

$$\varphi \rightarrow 0 \text{ cuando } x, y \rightarrow \pm\infty. \quad (2.23)$$

¹ Es obvio que al solucionar la ecuación de absorción (2.8) no hay necesidad en condiciones de frontera. Realmente, a diferencia de los procesos de transporte y difusión, la absorción de sustancia es un proceso espacialmente *local*, lo que significa que la ecuación (2.8) no contiene derivadas espaciales. Por eso más adelante el problema correspondiente no se considera.

La solución del problema (2.19), (2.22), (2.23) se busca en el dominio convexo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ con la frontera Γ .

2.3.1 Descomposición de dominio

Representemos el plano original \mathbb{R}^2 en forma de unión de un dominio interior y exterior D_I y D_E , respectivamente, es decir,

$$\mathbb{R}^2 = D_I \cup D_E, \quad (2.24)$$

donde

$$\begin{aligned} D_I &\supset \bar{\Omega}, \\ D_E &\stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Aquí $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. Sea el campo \mathbf{U} constante fuera del dominio de interés $\bar{\Omega}$ y sea $f = 0$

en D_E . Denotemos $\varphi_I \equiv \varphi|_{(x,y) \in D_I}$, $g_I \equiv g|_{(x,y) \in D_I}$, $f_I \equiv \begin{cases} f, & \text{si } (x,y) \in \bar{\Omega} \\ 0, & \text{si } (x,y) \notin \bar{\Omega} \end{cases}$,

$\varphi_E \equiv \varphi|_{(x,y) \in D_E}$, $g_E \equiv g|_{(x,y) \in D_E}$ y reescribamos la ecuación (2.19) y la condición inicial (2.22) para cada uno de los dominios. Tenemos:

$$\frac{\partial \varphi_I}{\partial t} + \frac{\partial(u\varphi_I)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi_I)}{\partial y} = f_I, \quad (2.26)$$

$$\varphi_I|_{t=0} = g_I(x, y), \quad (2.27)$$

y

$$\frac{\partial \varphi_E}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi_E}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi_E}{\partial y} = 0, \quad (2.28)$$

$$\varphi_E|_{t=0} = g_E(x, y). \quad (2.29)$$

Denotemos por \mathbf{U}_n la proyección del vector \mathbf{U} sobre la normal exterior n a la frontera ∂D_I del dominio D_I . Entonces se tiene la representación

$$\partial D_I = \partial D_I^+ \cup \partial D_I^-, \quad (2.30)$$

donde

$$\begin{aligned} \partial D_I^+ &\stackrel{\text{def}}{=} \{(x, y) \in \partial D_I \mid \mathbf{U}_n > 0\}, \\ \partial D_I^- &\stackrel{\text{def}}{=} \{(x, y) \in \partial D_I \mid \mathbf{U}_n \leq 0\}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Para solucionar el problema interior (2.26), (2.27) es necesario imponer una condición de frontera para la función φ_I sólo sobre la parte ∂D_I^- , ya que sobre ∂D_I^+ la solución se determina por el método de características (véase, por ejemplo, [6, 83, 106]).

2.3.2 Imponiendo la condición de frontera para el problema interior

Sea $\tau \in \mathbb{R}$ fijo. Sea también $D_{E,\tau}$ un subdominio del dominio D_E , definido por la fórmula (Fig. 2-1)

$$D_{E,\tau} \stackrel{\text{def}}{=} \{(x, y) \in D_E \mid (x - ut, y - vt) \notin \bar{\Omega} \quad \forall t \in [0, \tau]\}. \quad (2.32)$$

Entonces la solución del problema exterior (2.28), (2.29) en el dominio $D_{E,\tau}$ cuando $t = \tau$ es

$$\varphi_E(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in D_{E,\tau}, t=\tau} = g_E(x - ut, y - vt) \Big|_{(x,y) \in D_{E,\tau}, t=\tau}, \quad (2.33)$$

Ya que τ es arbitrario, de la continuidad de la solución del problema (2.19), (2.22), (2.23) sobre la frontera ∂D_I^- , es decir, de la igualdad

$$\varphi_E(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \partial D_I^-} = \varphi_I(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \partial D_I^-}, \quad (2.34)$$

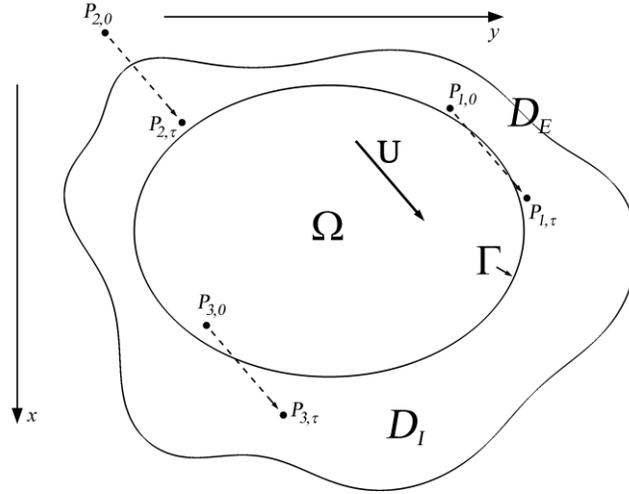


Fig. 2-1. Hacia la definición del subdominio $D_{E,\tau}$. Aquí $P_{1,3,\tau} \notin D_{E,\tau}$, $P_{2,\tau} \in D_{E,\tau}$.

con cuenta de $\partial D_I^- \subset D_{E,\tau}$ obtenemos

$$\chi(x, y, t) = g_E(x - ut, y - vt) \Big|_{(x,y) \in \partial D_I^-}, \quad (2.35)$$

Aquí $\chi(x, y, t)$ es una función de frontera, que determina el comportamiento de la función φ_I sobre ∂D_I^- . La expresión (2.35) es la condición de frontera artificial exacta local para el problema (2.26), (2.27).

2.3.3 Buen planteamiento del problema interior

El buen planteamiento del problema de advección se demuestra en la base del concepto de *solución generalizada* (véase, por ejemplo, [12]). Todas las normas construidas abajo son resultados del autor.

Pongamos

$$\psi(x, y, t) \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_I(x, y, t) - g(x - ut, y - vt). \quad (2.36)$$

Entonces $\varphi_I(x, y, t) = \psi(x, y, t) + g(x - ut, y - vt)$. Sustituyendo esta expresión en (2.26), (2.27) y (2.35), obtendremos el problema

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial(u\psi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\psi)}{\partial y} = f_\psi, \quad (2.37)$$

$$\psi|_{t=0} = 0, \quad (2.38)$$

$$\psi(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_t^-} = 0, \quad (2.39)$$

donde

$$f_\psi = f_t - \frac{\partial g(x-ut, y-vt)}{\partial t} - \frac{\partial(ug(x-ut, y-vt))}{\partial x} - \frac{\partial(vg(x-ut, y-vt))}{\partial y}. \quad (2.40)$$

Debido a la definición (2.36), los problemas (2.26), (2.27), (2.35) y (2.37)-(2.39) son idénticos.

Sea $\Xi = D_t \times (0, T)$, donde $T > 0$, y sea $L_2(\Xi)$ el espacio de Hilbert de funciones, definidas sobre Ξ , con el producto escalar

$$(p, q) = \int_{\Xi} p(x, y, t)q(x, y, t)d\Xi \quad (2.41)$$

y la norma $\|p\| = (p, p)^{1/2}$. Consideremos un conjunto M de funciones continuamente diferenciables $\psi(x, y, t)$, definidas sobre $\bar{\Xi}$, que satisfacen la condición (2.38) y tienen la norma finita

$$\|\psi\|_H = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\|\psi\|_T^2 + \alpha \|\psi\|_{\partial D_t^+}^2}. \quad (2.42)$$

Aquí $\bar{\Xi} = \bar{D}_t \times [0, T]$, $\bar{D}_t = D_t \cup \partial D_t$, $\alpha > 0$ es fijo, mientras $\|\psi\|_T$ y $\|\psi\|_{\partial D_t^+}$ se determinan por las fórmulas

$$\|\psi\|_T = \sqrt{\int_{D_t} |\psi(x, y, T)|^2 dD_t}, \quad (2.43)$$

$$\|\psi\|_{\partial D_t^+} = \sqrt{\int_0^T \int_{\partial D_t^+} |\psi|^2 d\partial D_t^+ dt}. \quad (2.44)$$

Introduzcamos sobre M el producto escalar

$$(p, q)_H = \frac{1}{2} \left[(p, q)_T + \alpha (p, q)_{\partial D_t^+} \right], \quad (2.45)$$

donde

$$(p, q)_T = \int_{D_t} p(x, y, T) q(x, y, T) dD_t, \quad (2.46)$$

$$(p, q)_{\partial D_t^+} = \int_0^T \int_{\partial D_t^+} p(x, y, t) q(x, y, t) d\partial D_t^+ dt, \quad (2.47)$$

y denotemos por $H(\Xi)$ el espacio de Hilbert $(\overline{M}, \|\cdot\|_H)$.

Definición 2.1. Una función ψ del espacio $H(\Xi)$ se llama *solución generalizada* del problema (2.37)-(2.39), si satisface la identidad

$$(\psi_t, \lambda) + (\nabla \cdot (\mathbf{U}\psi), \lambda) = (f_\psi, \lambda) \quad (2.48)$$

para cualquier función $\lambda \in H(\Xi)$ (véase, por ejemplo, [12]).

En (2.48) $(\cdot)_t$ denota la derivada parcial con respecto a la variable t . La fórmula (2.48) fue obtenida por la multiplicación de la ecuación (2.37) por la función λ y la integración por el dominio Ξ .

Teorema 2.1. *El problema (2.26), (2.27), (2.35) está bien planteado en el sentido de existencia, unicidad y estabilidad de la solución.*

Para la demostración del teorema es necesario y suficiente mostrar que el problema (2.37)-(2.39) tiene la única solución generalizada $\psi(x, y, t)$, que depende continuamente de los datos iniciales.

Demostración. Existencia de solución. Denotemos por $a_i\langle\psi, \lambda\rangle$, donde $i = 1, 2$, i -ésimo sumando en la expresión (2.48). Entonces $a_i\langle\psi, \lambda\rangle$ son funcionales lineales acotados en el espacio $H(\Xi)$ con respecto a la variable ψ . Realmente, si $\beta = \max_{\Xi} |\mathbf{U}| < \infty$, entonces

$$|a_1\langle\psi, \lambda\rangle| \equiv |(\psi_t, \lambda)| \leq \|\psi_t\| \|\lambda\| < \infty, \quad (\text{T.1})$$

$$|a_2\langle\psi, \lambda\rangle| \equiv |(\nabla \cdot (\mathbf{U}\psi), \lambda)| \leq \beta (\|\psi_x\| + \|\psi_y\|) \|\lambda\| < \infty, \quad (\text{T.2})$$

donde $(\cdot)_x$ y $(\cdot)_y$ son las derivadas parciales en x y y , respectivamente. Por consiguiente, de acuerdo con el teorema de Riesz (véase, por ejemplo, [10, 12]), para cada $a_i\langle\psi, \lambda\rangle$ existe el único elemento $p_i \in H(\Xi)$ tal que $\forall \psi \in H(\Xi)$

$$a_i\langle\psi, \lambda\rangle = (\psi, p_i)_H, \quad i = 1, 2. \quad (\text{T.3})$$

La correspondencia $\lambda \rightarrow p_i$ permite considerar los operadores lineales $L_i : H(\Xi) \rightarrow H(\Xi)$ y escribir $p_i = L_i \lambda$, $i = 1, 2$. Si $f_\psi \in L_2(\Xi)$, entonces el lado derecho de (2.48) (denotémosla por $a_3\langle f_\psi, \lambda\rangle$) también es un funcional lineal acotado (con respecto a λ) –

$$|a_3\langle f_\psi, \lambda\rangle| \equiv |(f_\psi, \psi)| \leq \|f_\psi\| \|\psi\|, \quad (\text{T.4})$$

y, por consiguiente, $\exists! R \in H(\Xi)$ tal que $\forall \lambda \in H(\Xi)$ se cumple

$$a_3\langle f_\psi, \lambda\rangle = (R, \lambda)_H. \quad (\text{T.5})$$

Por lo tanto, la expresión (2.48) es representable en la forma

$$(\psi, L\lambda)_H = (R, \lambda)_H. \quad (\text{T.6})$$

Aquí $L = \sum_{i=1}^2 L_i$.

Se tiene el siguiente lema.

Lema 2.1. Sea $L : H(\Xi) \rightarrow R(H(\Xi))$. Entonces el operador inverso $L^{-1} : R(H(\Xi)) \rightarrow H(\Xi)$ existe y es acotado.

Demostración. Es suficiente mostrar que $\forall p \in H(\Xi)$

$$(p, Lp)_H \geq (p, p)_H. \quad (\text{L.1})$$

Realmente, si se cumple (L.1), entonces de $Lp = 0$ se sigue que $p \equiv 0$, es decir, $\ker L = \{0\}$, y, por eso (véase, por ejemplo, [12]), para L existe el operador inverso L^{-1} , y además

$$\|L^{-1}\|_H = \sup_{q \in R(H(\Xi))} \frac{\|L^{-1}q\|_H}{\|q\|_H} = \sup_{p \in H(\Xi)} \frac{\|p\|_H^2}{\|p\|_H \|Lp\|_H} \leq \sup_{p \in H(\Xi)} \frac{(p, p)_H}{(p, Lp)_H} \leq 1, \quad (\text{L.2})$$

es decir, L^{-1} es acotado. (Aquí $q = Lp$.)

Sea $p \in H(\Xi)$. Entonces se tienen las estimaciones

$$a_1 \langle p, p \rangle = \frac{1}{2} \int_{D_t} p^2(x, y, T) dD_t = \frac{1}{2} \|p\|_T^2, \quad (\text{L.3})$$

$$a_2 \langle p, p \rangle = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\partial D_t^+} \mathbf{U}_n p^2 d\partial D_t^+ dt \geq \frac{\gamma}{2} \|p\|_{\partial D_t^+}^2. \quad (\text{L.4})$$

Aquí $\gamma > 0$. Para obtener (L.4) se utilizó el teorema de divergencia (véase, por ejemplo, [11]), la condición de continuidad (2.21) y la condición de frontera (2.39). Por consiguiente, eligiendo en (2.42) α menor que γ , obtendremos

$$(p, Lp)_H = a_1 \langle p, p \rangle + a_2 \langle p, p \rangle \geq \frac{1}{2} \left[\|p\|_T^2 + \gamma \|p\|_{\partial D_t^+}^2 \right] \geq (p, p)_H. \quad (\text{L.5})$$

El lema está probado. ■

Sean L^{-1} el operador, inverso a L , y \tilde{L}^{-1} una extensión de L^{-1} sobre todo el espacio $H(\Xi)$ tal que $\tilde{L}^{-1}L = E$. Debido al lema 2.1, L^{-1} existe y es acotado, y, por consiguiente,

existe y es acotada la extensión $\tilde{\mathcal{L}}^{-1}$. El operador $[\tilde{\mathcal{L}}^{-1}]^*$, adjunto a $\tilde{\mathcal{L}}^{-1}$, es único y tiene la misma norma que $\tilde{\mathcal{L}}^{-1}$. Por eso, $\forall p = \mathcal{L}\lambda \in H(\Xi)$ la igualdad

$$(\psi, p)_H = (\psi, \mathcal{L}\lambda)_H = (R, \lambda)_H = (R, \tilde{\mathcal{L}}^{-1}p)_H = \left([\tilde{\mathcal{L}}^{-1}]^* R, p \right)_H \quad (\text{T.7})$$

se cumple si y sólo si $\psi = [\tilde{\mathcal{L}}^{-1}]^* R$. La existencia de solución está probada.

Unicidad de solución. Supongamos que existen dos soluciones: ψ_1 y ψ_2 . Entonces para la diferencia $w = \psi_1 - \psi_2$ el problema (2.37)-(2.39) tiene la forma

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial(uw)}{\partial x} + \frac{\partial(vw)}{\partial y} = 0, \quad (\text{T.8})$$

$$w|_{t=0} = 0, \quad (\text{T.9})$$

$$w(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_t^-} = 0. \quad (\text{T.10})$$

En su turno, la expresión (2.48) cuando $\lambda = w$ se escribirá como

$$\frac{1}{2} \int_{D_t} w^2(x, y, T) dD_t + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\partial D_t^+} \mathbf{U}_n w^2 d\partial D_t^+ dt = 0. \quad (\text{T.11})$$

Ya que los dos sumandos en el lado izquierdo son positivos, (T.11) se cumple si y sólo si $w = 0$, de donde $\psi_1 = \psi_2$. La unicidad de solución está probada.

Estabilidad de solución. Sean ψ_1 y ψ_2 dos soluciones generalizadas, que corresponden a dos datos iniciales diferentes $\{g_1, f_{\psi,1}\}$ y $\{g_2, f_{\psi,2}\}$, respectivamente, donde $g_{1,2}$ son las condiciones iniciales, mientras $f_{\psi,1,2}$ son los lados derechos (o bien, las fuentes). Consideremos la función $\delta\psi = \psi_1 - \psi_2$. Sustituyéndola en (2.48) y poniendo $\lambda = \delta\psi$, obtenemos

$$\frac{1}{2} \|\delta\psi\|_T^2 + \frac{\gamma}{2} \|\delta\psi\|_{\partial D_t^+}^2 \leq \frac{1}{2} \|\delta g\|_0^2 + \|\delta f_\psi\| \|\delta\psi\|. \quad (\text{T.12})$$

Aquí $\|\delta g\|_0 = \sqrt{\int_{D_I} |\delta g(x, y)|^2 dD_I}$, $\delta f_\psi = f_{\psi,1} - f_{\psi,2}$, $\delta g = g_1 - g_2$. Por consiguiente, existen

dos constantes $\rho, \chi \in [0, \infty)$ tales que se cumple

$$\frac{1}{2}\|\delta\psi\|_T^2 + \frac{\gamma}{2}\|\delta\psi\|_{\partial D_I^+}^2 \leq \|\delta\psi\|_{\Xi} \left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0 \right), \quad (\text{T.13})$$

donde

$$\|\delta\psi\|_{\Xi} = \rho\|\delta\psi\|_T + \chi\|\delta\psi\|_{\partial D_I^+}.^2 \quad (\text{T.14})$$

Ya que cada sumando en el lado izquierdo no es mayor que la expresión en el lado derecho, se tienen las estimaciones

$$\begin{aligned} \|\delta\psi\|_T &\leq \sqrt{2\|\delta\psi\|_{\Xi} \left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0 \right)}, \\ \|\delta\psi\|_{\partial D_I^+} &\leq \sqrt{\frac{2}{\gamma}\|\delta\psi\|_{\Xi} \left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0 \right)}. \end{aligned} \quad (\text{T.15})$$

Por consiguiente,

$$\|\delta\psi\|_{\Xi} = \rho\|\delta\psi\|_T + \chi\|\delta\psi\|_{\partial D_I^+} \leq \left(\sqrt{2}\rho + \sqrt{\frac{2}{\gamma}}\chi \right) \sqrt{\|\delta\psi\|_{\Xi} \left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0 \right)}, \quad (\text{T.16})$$

de donde encontramos

$$\|\delta\psi\|_{\Xi} \leq \left(\sqrt{2}\rho + \sqrt{\frac{2}{\gamma}}\chi \right)^2 \left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0 \right). \quad (\text{T.17})$$

La estabilidad de solución y el teorema están probados. ■

² Así, por ejemplo, se pueden tomar

$$\rho^* \geq \frac{\|\delta\psi\|_T}{2\left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0\right)}, \quad \chi^* \geq \frac{\gamma\|\delta\psi\|_{\partial D_I^+}}{2\left(\|\delta f_\psi\| + \|\delta g\|_0\right)}.$$

Observación 2.2. Ya que la solución del problema exterior (2.28), (2.29) no depende del comportamiento de la función $g(x, y)$ en el campo lejano, el método propuesto de construcción de las CFAs para el problema de advección (2.26), (2.27), (2.35) es aplicable incluso si la condición (2.23) no se tiene.

2.4 Difusión

Consideremos la ecuación de difusión (para generalidad vamos a suponer que las fuentes f son distintas de cero en el lado derecho)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = f. \quad (2.49)$$

Aquí $\varphi = \varphi(x, y, t)$ es la función buscada, $\mu = \mu(x, y, t) \geq 0$ es el coeficiente de difusión y $f = f(x, y, t)$ denota las fuentes. La ecuación (2.49) complementemos con la condición inicial

$$\varphi|_{t=0} = g(x, y) \quad (2.50)$$

y la condición de frontera en el infinito

$$\varphi \rightarrow 0 \text{ cuando } x, y \rightarrow \pm\infty. \quad (2.51)$$

Se requiere hallar la solución del problema (2.49)-(2.51) en el dominio convexo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, acotado por la frontera Γ .

2.4.1 Descomposición de dominio

Representemos el plano original \mathbb{R}^2 en forma de unión de un dominio interior y exterior D_I y D_E , respectivamente, es decir,

$$\mathbb{R}^2 = D_I \cup D_E, \quad (2.52)$$

donde

$$D_I \supset \bar{\Omega}, \quad (2.53)$$

$$D_E \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}.$$

Aquí $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. Se supone que el coeficiente de difusión μ es constante fuera del dominio $\bar{\Omega}$, y también que las fuentes f están ausentes en D_E . Reescribamos la ecuación (2.49) para el dominio D_E en la forma

$$\frac{\partial \varphi_E}{\partial t} - \mu \Delta \varphi_E = 0, \quad (2.54)$$

donde $\varphi_E \equiv \varphi|_{(x,y) \in D_E}$ y Δ es el operador bidimensional de Laplace. También,

$$\varphi_E|_{t=0} = g_E(x, y), \quad (2.55)$$

donde $g_E \equiv g|_{(x,y) \in D_E}$, y

$$\varphi_E \rightarrow 0 \text{ cuando } x, y \rightarrow \pm\infty. \quad (2.56)$$

Para encontrar la única solución del problema exterior (2.54)-(2.56), es necesario imponer una condición de frontera sobre Γ . Escribamos

$$\varphi_E|_{\Gamma} = \theta(x, y, t), \quad (2.57)$$

donde $\theta(x, y, t)$ es una función, definida sobre el conjunto Γ . Aplicando a (2.54), (2.56) y (2.57) la transformada de Laplace en tiempo y teniendo en cuenta la condición (2.55), obtendremos el problema

$$s\Phi - \mu\Delta\Phi = g_E, \quad (2.58)$$

$$\Phi \rightarrow 0 \text{ cuando } x, y \rightarrow \pm\infty, \quad (2.59)$$

$$\Phi|_{\Gamma} = \Theta(x, y, s). \quad (2.60)$$

Aquí $s \in \mathbb{C}$ es la variable de la transformada de Laplace, mientras $\Phi = \Phi(x, y, s)$ y $\Theta = \Theta(x, y, s)$ son las imágenes de las funciones φ_E y θ , respectivamente.

Reescribamos la ecuación (2.58) en la forma

$$s\Phi - \mu(A_x + A_y)\Phi = g_E, \quad (2.61)$$

donde $A_x = \partial^2/\partial x^2$, $A_y = \partial^2/\partial y^2$. De acuerdo con la técnica de escisión por coordenadas (véase, por ejemplo, [18, 82, 95, 122]) en lugar de (2.61) se puede escribir

$$(\Lambda_x + \Lambda_y)\Phi = g_E, \quad (2.62)$$

donde $\Lambda_x = \Lambda_x(s, \mu)$ y $\Lambda_y = \Lambda_y(s, \mu)$ son las representaciones formales de los operadores de (2.61), que actúan en Φ en las direcciones x y y , respectivamente. Consideremos el conjunto $\mathbf{R}_y \stackrel{\text{def}}{=} \{y \mid -\infty < y < +\infty\}$ y fijemos una línea coordinada $y = y^*$, donde $y^* \in \mathbf{R}_y$. Se tiene

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_y &= \mathbf{R}_y^{\bar{\Omega}} \cup \mathbf{R}_y^{\infty}, \\ \mathbf{R}_y^{\bar{\Omega}} \cap \mathbf{R}_y^{\infty} &= \emptyset, \end{aligned} \quad (2.63)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_y^{\bar{\Omega}} &\stackrel{\text{def}}{=} \{y \in \mathbf{R}_y \mid \exists x \in \mathbf{R}_x : (x, y) \in \bar{\Omega}\}, \\ \mathbf{R}_y^{\infty} &\stackrel{\text{def}}{=} \{y \in \mathbf{R}_y \mid (x, y) \notin \bar{\Omega} \forall x \in \mathbf{R}_x\}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

donde $\mathbf{R}_x \stackrel{\text{def}}{=} \{x \mid -\infty < x < +\infty\}$. Por lo tanto, según si la línea $y = y^*$ cruza el conjunto $\bar{\Omega}$ o no, la función $\Phi(x, y, s)|_{y=y^*}$ puede ser hallada por una de las siguientes dos fórmulas.

Caso primero. Sea $y^* \in \mathbf{R}_y^{\bar{\Omega}}$. Entonces existe (por lo menos uno) $x \in [x_1, x_2] \subset \mathbf{R}_x$ tal que $(x, y^*) \in \bar{\Omega}$ (Fig. 2-2).

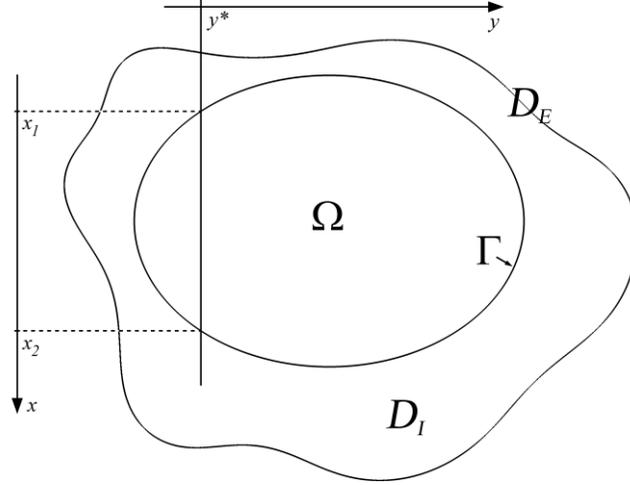


Fig. 2-2. Una línea coordinada $y = y^*$ cruza el conjunto $\bar{\Omega}$.

Sea $x \geq x_2$ (el caso $x \leq x_1$ es análogo). Entonces la solución de la ecuación

$$s\Phi_x^{\bar{\Omega}} - \mu A_x \Phi_x^{\bar{\Omega}} = g_{E_x}^{\bar{\Omega}}, \quad (2.65)$$

donde $\Phi_x^{\bar{\Omega}}(x, s) \equiv \Phi(x, y, s) \Big|_{x \geq x_2, y=y^*}$, $g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) \equiv g_E(x, y) \Big|_{x \geq x_2, y=y^*}$, tiene la forma

$$\Phi_x^{\bar{\Omega}}(x, s) = M_1^{\bar{\Omega}}(x, s)e^{k_1 x} + M_2^{\bar{\Omega}}(x, s)e^{k_2 x}, \quad (2.66)$$

donde $k_{1,2} = \pm \sqrt{s/\mu}$ y

$$M_1^{\bar{\Omega}}(x, s) = \frac{1}{\mu(k_2 - k_1)} \int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_1 x} dx + C_1, \quad (2.67)$$

$$M_2^{\bar{\Omega}}(x, s) = \frac{1}{\mu(k_1 - k_2)} \int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_2 x} dx + C_2.$$

Teniendo en cuenta las condiciones de frontera $\Phi_x^{\bar{\Omega}}(x, s) \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow +\infty$ y $\Phi_x^{\bar{\Omega}}(x, s)|_{x=x_2} = \Theta(x_2, y^*, s)$ (son las fórmulas (2.59) y (2.60), respectivamente), hallamos

$$C_1 = 0,$$

$$C_2 = \frac{1}{\mu(k_2 - k_1)} \left(\int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_2 x} dx - e^{(k_1 - k_2)x} \int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_1 x} dx \right) \Big|_{x=x_2} + \Theta(x_2, y^*, s) e^{-k_2 x_2}, \quad (2.68)$$

de donde

$$\begin{aligned} \Phi_x^{\bar{\Omega}}(x, s) &= \frac{1}{\mu(k_2 - k_1)} \left(e^{k_1 x} \int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_1 x} dx - e^{k_2 x} \int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_2 x} dx \right) + \\ &+ \frac{e^{k_2 x}}{\mu(k_2 - k_1)} \left(\int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_2 x} dx - e^{(k_1 - k_2)x} \int g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) e^{-k_1 x} dx \right) \Big|_{x=x_2} + \\ &+ \Theta(x_2, y^*, s) e^{k_2(x-x_2)}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

Caso segundo. Sea ahora $y = y^*$ una línea coordinada, que no cruza el conjunto $\bar{\Omega}$. Consideremos la ecuación

$$s \Phi_x^\infty - \mu A_x \Phi_x^\infty = g_{E_x}^\infty, \quad (2.70)$$

donde $\Phi_x^\infty(x, s) \equiv \Phi(x, y, s)|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*}$, $g_{E_x}^\infty(x) \equiv g_E(x, y)|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*}$. Su solución se escribe en la forma

$$\Phi_x^\infty(x, s) = M_1^\infty(x, s) e^{k_1 x} + M_2^\infty(x, s) e^{k_2 x}, \quad (2.71)$$

$$M_1^\infty(x, s) = \frac{1}{\mu(k_2 - k_1)} \int g_{E_x}^\infty(x) e^{-k_1 x} dx + C_1, \quad (2.72)$$

$$M_2^\infty(x, s) = \frac{1}{\mu(k_1 - k_2)} \int g_{E_x}^\infty(x) e^{-k_2 x} dx + C_2.$$

La condición de frontera (2.59) resulta $C_1 = C_2 = 0$, y, por consiguiente, para $\Phi_x^\infty(x, s)$ se puede escribir

$$\Phi_x^\infty(x, s) = \frac{1}{\mu(k_2 - k_1)} \left(e^{k_1 x} \int g_{E_x}^\infty(x) e^{-k_1 x} dx - e^{k_2 x} \int g_{E_x}^\infty(x) e^{-k_2 x} dx \right). \quad (2.73)$$

Similarmente pueden ser obtenidas las fórmulas para $\Phi_y^{\bar{\Omega}}(y, s)$ y $\Phi_y^\infty(y, s)$.

2.4.2 Una familia de soluciones aproximadas del problema exterior

Regresemos a la fórmula (2.69). Construyamos una partición $\Pi_1 \stackrel{\text{def}}{=} \{q_0, \dots, q_{N-1}, q_N, q_{N+1}, \dots, q_{+\infty}\}$ para el semi-intervalo $[x_2, +\infty)$, $q_0 = x_2$, y en cada segmento $[q_{N-1}, q_N] \subset \Pi_1$, $N \in \mathbf{N}$, aproximemos la función $g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)$ por una función trazadora (inglés: *spline*) de 3^o orden (véase, por ejemplo, [15])

$$g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) \Big|_{x \in [q_{N-1}, q_N]} \approx c_3^{(N)} x^3 + c_2^{(N)} x^2 + c_1^{(N)} x + c_0^{(N)}. \quad (2.74)$$

Sustituyendo (2.74) en (2.69), encontramos

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{x,3}^{\bar{\Omega}}(x, s, N) &= \frac{c_3^{(N)} x^3 + c_2^{(N)} x^2 + c_1^{(N)} x + c_0^{(N)}}{s} + \frac{2\mu(3c_3^{(N)} x + c_2^{(N)})}{s^2} - \\ &- \left(\frac{c_3^{(N)} x^3 + c_2^{(N)} x^2 + c_1^{(N)} x + c_0^{(N)}}{s} + \frac{2\mu(3c_3^{(N)} x + c_2^{(N)})}{s^2} \right) \Big|_{x=x_2} e^{k_2(x-x_2)} + \\ &+ \Theta(x_2, y^*, s) e^{k_2(x-x_2)}. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Consideremos ahora la expresión (2.73). De manera análoga, sea $\Pi_2 \stackrel{\text{def}}{=} \{q_{-\infty}, \dots, q_{N-1}, q_N, q_{N+1}, \dots, q_{+\infty}\}$ una partición del intervalo $(-\infty, +\infty)$. Para cada $[q_{N-1}, q_N] \subset \Pi_2$, $N \in \mathbf{Z}$, escribamos

$$g_{E_x}^\infty(x) \Big|_{x \in [q_{N-1}, q_N]} \approx c_3^{(N)} x^3 + c_2^{(N)} x^2 + c_1^{(N)} x + c_0^{(N)}. \quad (2.76)$$

Entonces

$$\tilde{\Phi}_{x,3}^{\infty}(x,s,N) = \frac{c_3^{(N)}x^3 + c_2^{(N)}x^2 + c_1^{(N)}x + c_0^{(N)}}{s} + \frac{2\mu(3c_3^{(N)}x + c_2^{(N)})}{s^2}. \quad (2.77)$$

Mediante las tablas de la transformada de Laplace (véase, por ejemplo, [11]) en el caso de $y^* \in \mathbf{R}_y^{\bar{\Omega}}$ hallamos

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{E,3}(x,y,t) \Big|_{x \geq x_2, y=y^*} &= c_3^{(N)}x^3 + c_2^{(N)}x^2 + c_1^{(N)}x + c_0^{(N)} + 2\mu(3c_3^{(N)}x + c_2^{(N)})t - \\ &\quad - (c_3^{(N)}x^3 + c_2^{(N)}x^2 + c_1^{(N)}x + c_0^{(N)}) \Big|_{x=x_2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu t}} \right) - \\ &\quad - 2\mu(3c_3^{(N)}x + c_2^{(N)}) \Big|_{x=x_2} \int_0^t \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu \tau}} \right) d\tau + \\ &\quad + \mathbf{L}^{-1} \left[\Theta(x_2, y^*, s) e^{k_2(x-x_2)} \right]. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Aquí $\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{+\infty} e^{-z^2} dz$, mientras \mathbf{L}^{-1} denota la transformada inversa de Laplace. Si

$y^* \in \mathbf{R}_y^{\infty}$, entonces

$$\tilde{\varphi}_{E,3}(x,y,t) \Big|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*} = c_3^{(N)}x^3 + c_2^{(N)}x^2 + c_1^{(N)}x + c_0^{(N)} + 2\mu(3c_3^{(N)}x + c_2^{(N)})t. \quad (2.79)$$

Es significativo que las soluciones (2.78) y (2.79) no dependen de los coeficientes de la función trazadora (y, por consiguiente, de las particiones Π_1 y Π_2 tampoco). Realmente, notando que $2(3c_3^{(N)}x + c_2^{(N)})$ es aproximadamente la segunda derivada de la función $g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)$ (respectivamente, de $g_{E_x}^{\infty}(x)$) en el segmento $[q_{N-1}, q_N]$, y también teniendo en cuenta (2.74) (respectivamente, (2.76)), se pueden reescribir las expresiones (2.78) y (2.79) en la forma

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_{E,3}(x, y, t) \Big|_{x \geq x_2, y=y^*} &= g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) + \mu t \frac{\partial^2 g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^2} - \\
&- g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) \Big|_{x=x_2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu t}} \right) - \\
&- \mu \frac{\partial^2 g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_2} \int_0^t \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu \tau}} \right) d\tau + \\
&+ \mathbf{L}^{-1} [\Theta(x_2, y^*, s) e^{k_2(x-x_2)}]
\end{aligned} \tag{2.80}$$

y

$$\tilde{\varphi}_{E,3}(x, y, t) \Big|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*} = g_{E_x}^{\infty}(x) + \mu t \frac{\partial^2 g_{E_x}^{\infty}(x)}{\partial x^2}. \tag{2.81}$$

respectivamente.

Hasta ahora ha sido hallada una solución aproximada del problema exterior (2.54)-(2.57) en la dirección x para una línea coordinada arbitraria $y = y^*$, donde $y^* \in \mathbf{R}_y$. Incrementando el orden de la función trazadora de tres a cinco, respectivamente encontramos

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_{E,5}(x, y, t) \Big|_{x \geq x_2, y=y^*} &= g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) + \mu t \frac{\partial^2 g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^2} + \mu^2 \frac{t^2}{2} \frac{\partial^4 g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^4} - \\
&- g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x) \Big|_{x=x_2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu t}} \right) - \\
&- \mu \frac{\partial^2 g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=x_2} \int_0^t \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu \tau}} \right) d\tau - \\
&- \mu^2 \frac{\partial^4 g_{E_x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^4} \Big|_{x=x_2} \int_0^t \operatorname{erfc} \left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu \tau}} \right) (t-\tau) d\tau + \\
&+ \mathbf{L}^{-1} [\Theta(x_2, y^*, s) e^{k_2(x-x_2)}]
\end{aligned} \tag{2.82}$$

y

$$\tilde{\varphi}_{E,5}(x, y, t) \Big|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*} = g_{E_x}^{\infty}(x) + \mu t \frac{\partial^2 g_{E_x}^{\infty}(x)}{\partial x^2} + \mu^2 \frac{t^2}{2} \frac{\partial^4 g_{E_x}^{\infty}(x)}{\partial x^4}. \tag{2.83}$$

Generalmente, para una $d \geq 3$ impar se pueden escribir

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \geq x_2, y=y^*} &= \sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g_{E,x}^{\bar{\Omega}}(x) t^m}{\partial x^{2m} m!} - \\
&- g_{E,x}^{\bar{\Omega}}(x)\Big|_{x=x_2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu t}}\right) - \\
&- \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g_{E,x}^{\bar{\Omega}}(x)}{\partial x^{2m}}\Big|_{x=x_2} \int_0^t \operatorname{erfc}\left(\frac{x-x_2}{2\sqrt{\mu \tau}}\right) \frac{(t-\tau)^{m-1}}{(m-1)!} d\tau + \\
&+ \mathbf{L}^{-1}\left[\Theta(x_2, y^*, s) e^{k_2(x-x_2)}\right]
\end{aligned} \tag{2.84}$$

y

$$\tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*} = \sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g_{E,x}^{\infty}(x) t^m}{\partial x^{2m} m!}. \tag{2.85}$$

Empleando otra vez la técnica de escisión por coordenadas, finalmente encontramos la solución en las dos direcciones en la forma

$$\varphi_{E,d}(x,y,t) = \varphi_{E,x,d}(x,y,t) + \varphi_{E,y,d}(x,y,t) - g_E(x,y), \tag{2.86}$$

donde

$$\varphi_{E,x,d}(x,y,t) = \begin{cases} \tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \geq x_2, y=y^*}, & \tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \leq x_1, y=y^*}, & \text{si } y^* \in \mathbf{R}_y^{\bar{\Omega}}, \\ \tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*}, & & \text{si } y^* \in \mathbf{R}_y^{\infty}. \end{cases} \tag{2.87}$$

Aquí $\tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \geq x_2, y=y^*}$ y $\tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \in \mathbf{R}_x, y=y^*}$ se calculan por las fórmulas (2.84) y (2.85), respectivamente, $\tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \leq x_1, y=y^*}$ es análoga a $\tilde{\varphi}_{E,d}(x,y,t)\Big|_{x \geq x_2, y=y^*}$, mientras que la expresión para $\varphi_{E,y,d}(x,y,t)$ puede ser obtenida de $\varphi_{E,x,d}(x,y,t)$ por el cambio de las variables espaciales. Por ejemplo, cuando $d = 3$, $x_A^* \in \mathbf{R}_x^{\infty}$ y $y_A^* \in \mathbf{R}_y^{\infty}$, tenemos

$$\varphi_{E,3}(x, y, t) \Big|_{x=x_A^*, y=y_A^*} = \left[g_E(x, y) + \mu t \frac{\partial^2 g_E}{\partial x^2} + \mu t \frac{\partial^2 g_E}{\partial y^2} \right] \Big|_{x=x_A^*, y=y_A^*}; \quad (2.88)$$

cuando $d = 5$, $x_B^* \in \mathbf{R}_x^{\bar{\Omega}}$ y $y_B^* \in \mathbf{R}_y^{\infty}$, se cumple (Fig. 2-3)

$$\begin{aligned} \varphi_{E,5}(x, y, t) \Big|_{x=x_B^*, y=y_B^*} = & \left[g_E(x, y) + \mu t \frac{\partial^2 g_E}{\partial x^2} + \mu^2 \frac{t^2}{2} \frac{\partial^4 g_E}{\partial x^4} + \right. \\ & + \mu t \frac{\partial^2 g_E}{\partial y^2} + \mu^2 \frac{t^2}{2} \frac{\partial^4 g_E}{\partial y^4} - \\ & - g_E(x, y) \Big|_{x=x_B^*, y=y_1} \operatorname{erfc} \left(\frac{y_1 - y}{2\sqrt{\mu t}} \right) - \\ & - \mu \frac{\partial^2 g_E}{\partial y^2} \Big|_{x=x_B^*, y=y_1} \int_0^t \operatorname{erfc} \left(\frac{y_1 - y}{2\sqrt{\mu \tau}} \right) d\tau - \\ & - \mu^2 \frac{\partial^4 g_E}{\partial y^4} \Big|_{x=x_B^*, y=y_1} \int_0^t \operatorname{erfc} \left(\frac{y_1 - y}{2\sqrt{\mu \tau}} \right) (t - \tau) d\tau + \\ & \left. + \mathbf{L}^{-1} \left[\Theta(x_B^*, y_1, s) e^{k_2(y_1 - y)} \right] \right] \Big|_{x=x_B^*, y=y_B^*}. \end{aligned} \quad (2.89)$$

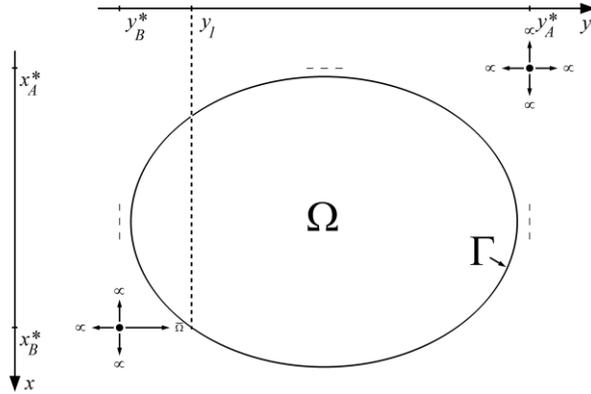


Fig. 2-3. Las soluciones $\varphi_{E,d} \Big|_{x=x^*, y=y^*}$ del problema exterior se calculan según si las líneas coordenadas $x = x^*$, $y = y^*$ cruzan el conjunto $\bar{\Omega}$.

La expresión (2.86) representa una familia infinita de soluciones aproximadas del problema exterior (2.54)-(2.57).

2.4.3 Imponiendo las condiciones de frontera para el problema interior

Consideremos el problema interior

$$\frac{\partial \varphi_I}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi_I}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi_I}{\partial y} \right) = f_I, \quad (2.90)$$

$$\varphi_I|_{t=0} = g_I(x, y), \quad (2.91)$$

$$\varphi_I|_{\partial D_I} = \chi(x, y, t). \quad (2.92)$$

Aquí $\varphi_I \equiv \varphi|_{(x,y) \in D_I}$, $f_I \equiv \begin{cases} f, & \text{si } (x, y) \in \bar{\Omega} \\ 0, & \text{si } (x, y) \notin \bar{\Omega} \end{cases}$, $g_I \equiv g|_{(x,y) \in D_I}$, ∂D_I denota una frontera

del dominio D_I , mientras $\chi(x, y, t)$ es una función de frontera para φ_I , definida sobre ∂D_I . Sea $\mathbb{T} \stackrel{\text{def}}{=} \{t_0, t_1, t_2, \dots, t_N\}$ una partición del segmento temporal $[0, T]$, $t_0 = 0$, $t_N = T$, $T > 0$.

Se tiene el siguiente teorema.

Teorema 2.2. Sean (2.49)-(2.53), $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ un dominio convexo con una frontera Γ , $\mu = \mu(x, y, t)$ y $f(x, y, t)$ el coeficiente de difusión y la función de fuentes, respectivamente, definidos en el dominio $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. Sean también $\mu = \text{Const}$ y $f \equiv 0$ en $\mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}$. Entonces para cualquier $d \geq 3$ impar, para un momento fijo de tiempo $t_n \in \mathbb{T}$, existe un dominio convexo $Q \supset \bar{\Omega}$ con una frontera S , tan que la solución aproximada $\varphi_{E,d}(x, y, t)$ del problema (2.49)-(2.51) en $t = t_n$ sobre S (y, generalmente hablando, más adelante al infinito) no es influenciada por μ y f de $\bar{\Omega}$.

Demostración. Demos una estimación cualitativa para el tamaño del dominio Q (y, por consiguiente, para la colocación de S), basándose en el análisis de dimensiones y el π -teorema (véase, por ejemplo, [3]). De acuerdo con lo último, cualquier ley física, expresada por una función ξ de p cantidades dimensionales –

$$\xi(v_1, v_2, v_3, \dots, v_p) = 0, \quad (\text{T.1})$$

– es representable en forma de relación entre $p - q$ combinaciones adimensionales (los así llamados π -grupos) de estas cantidades, es decir,

$$\xi(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_{p-q}) = 0. \quad (\text{T.2})$$

Aquí q es el número de cantidades fundamentales (tales como masa, tiempo, etc.).

Para la función ξ que expresa la conexión entre el tamaño l del área de propagación de la sustancia φ bajo la influencia de la difusión μ por el tiempo t_n , tenemos: $v_1 = l$, $v_2 = \varphi$, $v_3 = \mu$, $v_4 = t_n$. Para las dimensiones de estas cantidades se tiene:

$$[l] = L, [\varphi] = ML^{-2}, [\mu] = L^2T^{-1}, [t_n] = T. \quad (\text{T.3})$$

Aquí L denota longitud, T tiempo, y M masa. Como cantidades fundamentales, elijamos, por ejemplo, l , φ y t_n . Entonces $p = 4$, $q = 3$, y, por consiguiente, de acuerdo con el π -teorema existe el único ($p - q = 4 - 3 = 1$) grupo adimensional de la forma

$$\pi_1 = l^\alpha \varphi^\beta \mu^\gamma t_n^\delta = k^{2\gamma}, \quad (\text{T.4})$$

donde $\alpha = -2\gamma$, $\beta = 0$, $\gamma \in \mathbf{R}$, $\delta = \gamma$, mientras k es un número no negativo real. Esto conduce a

$$l = \frac{1}{k} \sqrt{\mu t_n}. \quad (\text{T.5})$$

Ya que $\mu = \mu(x, y, t)$ en $\bar{\Omega}$, hay que usar el máximo de l , i.e., $l_{\max} = \max_{(x,y,t) \in \bar{\Omega} \times [0,T]} \frac{1}{k} \sqrt{\mu t_n}$, y por eso la parte regular (o bien, suave) de la frontera S del dominio Q puede ser obtenida como

$$S_{reg} \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid (x, y) = (x, y)_\Gamma + nl_{\max} \right\}. \quad (\text{T.6})$$

Aquí n es la normal exterior a Γ en el punto $(x, y)_\Gamma \in \Gamma$, que pasa por toda la parte regular de la frontera. Si Γ no tiene singularidades (i.e., esquinas), entonces se puede definir $S = S_{reg}$ y terminar la prueba. Si no, hay que hacer una construcción adicional. Sea s_i un punto singular de Γ . Poniendo

$$a_i = nl_{\max} + \lim_{(x,y) \in \Gamma \rightarrow s_i, -0} (x, y), \quad b_i = nl_{\max} + \lim_{(x,y) \in \Gamma \rightarrow s_i, +0} (x, y), \quad (\text{T.7})$$

obtenemos la parte singular de S en la forma (Fig. 2-4)

$$S_{sing} \stackrel{\text{def}}{=} \bigcup_{i=1}^M S_{sing, i} \equiv \bigcup_{i=1}^M [a_i, b_i]. \quad (\text{T.8})$$

Aquí M es el número de singularidades sobre Γ . Finalmente escribamos

$$S = S_{reg} \cup S_{sing}. \quad (\text{T.9})$$

La convexidad del dominio Q se sigue de la construcción (T.6)-(T.9), ya que el conjunto $\bar{\Omega}$ es convexo. ■

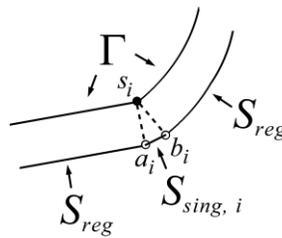


Fig. 2-4. Hacia la construcción de la parte singular de la frontera S .

Observación 2.3. Notemos que φ desapareció en la fórmula (T.4) ($\beta = 0$), como debe haber hecho. Realmente, intuitivamente parece que la cantidad l no debe depender de la sustancia φ misma (y de las fuentes f tampoco, ya que $[f] = [\varphi]/[t_n]$), y por lo tanto l se determina solamente por el coeficiente de difusión μ y tiempo t_n .

Observación 2.4. Generalmente, para la frontera S se puede proponer otra definición, diferente de las fórmulas (T.6)-(T.9). Entonces el dominio Q puede ser un conjunto arbitrario (no necesariamente convexo).

El teorema 2.2 permite calcular la solución aproximada $\varphi_{E,d}(x, y, t)$ del problema (2.49)-(2.51) sobre S en $t = t_n$ como si μ fuera constante y $f \equiv 0$ en $\bar{\Omega}$. Por consiguiente, $\varphi_{E,x,d}(x, y, t)\Big|_{(x,y^*) \in S, t=t_n}$ puede ser calculada por (2.85) en lugar de (2.84), aun cuando la línea coordinada $y = y^*$ cruza el conjunto $\bar{\Omega}$. Más general, en las dos direcciones, se tiene el siguiente corolario.

Corolario 2.1. Sean (2.52) y (2.53), donde $D_I \equiv Q$, $\partial D_I \equiv S$. Sea también $d \geq 3$ un número impar, $t_n \in T$ fijo. Entonces la solución aproximada $\varphi_{E,d}(x, y, t)$ del problema (2.49)-(2.51) puede ser calculada sobre ∂D_I por la fórmula (comp. con (2.85)-(2.86))

$$\varphi_{E,d}(x, y, t)\Big|_{(x,y) \in \partial D_I, t=t_n} = \left[\sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{t^m}{m!} \left(\frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} + \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \right) - g(x, y) \right]\Big|_{(x,y) \in \partial D_I, t=t_n}. \quad (2.93)$$

El requerimiento de continuidad de la solución del problema (2.49)-(2.51) sobre la frontera ∂D_I , es decir, la igualdad $\varphi_{E,d}(x, y, t)\Big|_{(x,y) \in \partial D_I} = \varphi_I(x, y, t)\Big|_{(x,y) \in \partial D_I}$, conduce a una familia infinita de condiciones de frontera artificiales locales para el problema (2.90)-(2.92) de la forma

$$\chi(x, y, t) \equiv \varphi_I(x, y, t)\Big|_{(x,y) \in \partial D_I} = \left[\sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{t^m}{m!} \left(\frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} + \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \right) - g(x, y) \right]\Big|_{(x,y) \in \partial D_I}, \quad (2.94)$$

o bien,

$$\chi(x, y, t) \equiv \varphi_I(x, y, t)\Big|_{(x,y) \in \partial D_I} = \left[\sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{t^m}{m!} \left(\frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} + \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \right) + g(x, y) \right]\Big|_{(x,y) \in \partial D_I}. \quad (2.95)$$

2.4.4 Buen planteamiento del problema interior

Similarmente al problema de advección, el buen planteamiento del problema de difusión se demuestra con el uso del concepto de *solución generalizada* (véase, por ejemplo, [12]). Todas las normas construidas abajo y los resultados correspondientes son originales.

Denotemos $\pi(x, y, t) = \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{t^m}{m!} \left(\frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} + \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \right) + g(x, y)$ y pongamos

$$\psi(x, y, t) \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_I(x, y, t) - \pi(x, y, t). \quad (2.96)$$

De aquí, despejando la función $\varphi_I(x, y, t)$ y sustituyéndola en (2.90)-(2.92), obtenemos el problema

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = f_\psi, \quad (2.97)$$

$$\psi|_{t=0} = 0, \quad (2.98)$$

$$\psi(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_I} = 0, \quad (2.99)$$

donde

$$f_\psi = f_I - \frac{\partial \pi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \pi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \pi}{\partial y} \right). \quad (2.100)$$

Debido a la definición (2.96), los problemas (2.90)-(2.92) y (2.97)-(2.99) son equivalentes.

Sea $\Xi = D_I \times (0, T)$, donde $T > 0$, y sea $L_2(\Xi)$ el espacio de Hilbert de funciones, definidas sobre Ξ , con el producto escalar

$$(p, q) = \int_{\Xi} p(x, y, t) q(x, y, t) d\Xi \quad (2.101)$$

y la norma $\|p\| = (p, p)^{1/2}$. Consideremos un conjunto M de funciones $\psi(x, y, t)$ dos veces continuamente diferenciables, definidas sobre Ξ , que satisfacen la condición (2.98) y tienen la norma finita

$$\|\psi\|_H = \sqrt{\frac{1}{2}\|\psi\|_T^2 + \alpha\|\psi_x\|^2 + \alpha\|\psi_y\|^2}. \quad (2.102)$$

Aquí $\bar{\Xi} = \bar{D}_I \times [0, T]$, $\bar{D}_I = D_I \cup \partial D_I$, $(\cdot)_x$ y $(\cdot)_y$ son las derivadas parciales en x y y , respectivamente, $\alpha > 0$ es fijo, mientras $\|\psi\|_T$ se determina como

$$\|\psi\|_T = \sqrt{\int_{D_I} |\psi(x, y, T)|^2 dD_I}. \quad (2.103)$$

Introduzcamos sobre M el producto escalar

$$(p, q)_H = \frac{1}{2}(p, q)_T + \alpha(p_x, q_x) + \alpha(p_y, q_y), \quad (2.104)$$

donde

$$(p, q)_T = \int_{D_I} p(x, y, T)q(x, y, T)dD_I, \quad (2.105)$$

y denotemos por $H(\Xi)$ el espacio de Hilbert $(\bar{M}, \|\cdot\|_H)$.

Definición 2.2. Una función ψ del espacio $H(\Xi)$ se llama *solución generalizada* del problema (2.97)-(2.99), si ella satisface la identidad

$$(\psi_t, \lambda) + (\mu\psi_x, \lambda_x) + (\mu\psi_y, \lambda_y) = (f_\psi, \lambda) \quad (2.106)$$

para cualquier función $\lambda \in H(\Xi)$ (véase, por ejemplo, [12]).

Aquí $(\cdot)_t$ es la derivada parcial en tiempo. La fórmula (2.106) fue obtenida por la multiplicación de la ecuación (2.97) por la función λ y la integración por partes por el área $\bar{\Xi}$ con la condición de frontera (2.99).

Teorema 2.3. Para cualquier $d \geq 3$ impar el problema (2.90)-(2.92) con la función de frontera $\chi(x, y, t)$, calculada por la fórmula (2.95), está bien planteado.

Para probar el teorema es necesario y suficiente mostrar que existe la única solución generalizada del problema (2.97)-(2.99), que depende continuamente de los datos iniciales.

Demostración. Existencia de solución. Denotemos por $a_i\langle\psi, \lambda\rangle$, $i = 1, 2, 3$, i -ésimo sumando en la expresión (2.106). Entonces $a_i\langle\psi, \lambda\rangle$ son funcionales lineales acotados en el espacio $H(\Xi)$ con respecto a ψ . Realmente, si $\beta = \max_{\Xi} \mu < \infty$, entonces

$$|a_1\langle\psi, \lambda\rangle| \equiv |(\psi_t, \lambda)| \leq \|\psi_t\| \|\lambda\| < \infty, \quad (\text{T.1})$$

$$|a_2\langle\psi, \lambda\rangle| \equiv |(\mu\psi_x, \lambda_x)| \leq \beta \|\psi_x\| \|\lambda_x\| < \infty. \quad (\text{T.2})$$

El caso de $a_3\langle\psi, \lambda\rangle$ se demuestra analógicamente. Por consiguiente, de acuerdo con el teorema de Riesz (véase, por ejemplo, [10, 12]), para cada $a_i\langle\psi, \lambda\rangle$ existe el único elemento $p_i \in H(\Xi)$ tal que $\forall \psi \in H(\Xi)$

$$a_i\langle\psi, \lambda\rangle = (\psi, p_i)_H, \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{T.3})$$

Consideremos los operadores lineales $L_i: H(\Xi) \rightarrow H(\Xi)$ y escribamos $p_i = L_i \lambda$, $i = 1, 2, 3$. Si $f_\psi \in L_2(\Xi)$, entonces el lado derecho de (2.106) (denotémosla por $a_4\langle f_\psi, \lambda\rangle$) es un funcional lineal acotado con respecto a la variable λ –

$$|a_4\langle f_\psi, \lambda\rangle| \equiv |(f_\psi, \lambda)| \leq \|f_\psi\| \|\lambda\|, \quad (\text{T.4})$$

y, por eso, $\exists! R \in H(\Xi)$ tal que $\forall \lambda \in H(\Xi)$ se tiene

$$a_4\langle f_\psi, \lambda\rangle = (R, \lambda)_H. \quad (\text{T.5})$$

De tal modo, la expresión (2.106) es representable en la forma

$$(\psi, L\lambda)_H = (R, \lambda)_H. \quad (\text{T.6})$$

Aquí $L = \sum_{i=1}^3 L_i$.

Se cumple el siguiente lema.

Lema 2.2. *Sea $L : H(\Xi) \rightarrow R(H(\Xi))$. Entonces el operador inverso $L^{-1} : R(H(\Xi)) \rightarrow H(\Xi)$ existe y es acotado.*

Demostración. Así mismo como para el lema 2.1 de la sección 2.3.3, es suficiente mostrar que $\forall p \in H(\Xi)$

$$(p, Lp)_H \geq (p, p)_H. \quad (\text{L.1})$$

Sea $p \in H(\Xi)$. Entonces se tienen las estimaciones

$$a_1 \langle p, p \rangle = \frac{1}{2} \int_{D_t} p^2(x, y, T) dD_t = \frac{1}{2} \|p\|_T^2, \quad (\text{L.2})$$

$$a_2 \langle p, p \rangle = \int_0^T \int_{D_t} \mu \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 dD_t dt \geq \gamma \|p_x\|^2, \quad (\text{L.3})$$

$$a_3 \langle p, p \rangle = \int_0^T \int_{D_t} \mu \left(\frac{\partial p}{\partial y} \right)^2 dD_t dt \geq \gamma \|p_y\|^2. \quad (\text{L.4})$$

Aquí $\gamma > 0$. Pongamos en la definición (2.102) α menor que γ . Entonces

$$(p, Lp)_H = \sum_{i=1}^3 a_i \langle p, p \rangle \geq \frac{1}{2} \|p\|_T^2 + \gamma \|p_x\|^2 + \gamma \|p_y\|^2 \geq (p, p)_H. \quad (\text{L.5})$$

El lema está probado. ■

Sean L^{-1} el operador, inverso a L , y \tilde{L}^{-1} una extensión de L^{-1} sobre todo $H(\Xi)$, $\tilde{L}^{-1}L = E$. Por el lema 2.2, L^{-1} existe y es acotado. Por consiguiente, existe y es acotada la extensión \tilde{L}^{-1} . El operador adjunto $[\tilde{L}^{-1}]^*$ es único y tiene la misma norma. Por lo tanto, $\forall p = L\lambda \in H(\Xi)$ la igualdad

$$(\psi, p)_H = (\psi, \mathbf{L}\lambda)_H = (R, \lambda)_H = (R, \tilde{\mathbf{L}}^{-1}p)_H = \left([\tilde{\mathbf{L}}^{-1}]^* R, p \right)_H \quad (\text{T.7})$$

se cumple si y sólo si $\psi = [\tilde{\mathbf{L}}^{-1}]^* R$. La existencia de solución está probada.

Unicidad de solución. Supongamos que existen dos soluciones: ψ_1 y ψ_2 . Entonces para su diferencia $w = \psi_1 - \psi_2$ el problema (2.97)-(2.99) es

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0, \quad (\text{T.8})$$

$$w|_{t=0} = 0, \quad (\text{T.9})$$

$$w(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_t} = 0, \quad (\text{T.10})$$

y la expresión (2.106) para $\lambda = w$ se escribe como

$$\frac{1}{2} \int_{D_t} w^2(x, y, T) dD_t + \int_0^T \int_{D_t} \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 dD_t dt + \int_0^T \int_{D_t} \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 dD_t dt = 0. \quad (\text{T.11})$$

Ya que todos los sumandos en el lado izquierdo son positivos, (T.11) se cumple si y sólo si $w = 0$, de donde $\psi_1 = \psi_2$. La unicidad de solución está probada.

Estabilidad de solución. Sean ψ_1 y ψ_2 dos soluciones generalizadas, que corresponden a dos datos iniciales diferentes $\{g_1, f_{\psi,1}\}$ y $\{g_2, f_{\psi,2}\}$, respectivamente, donde $g_{1,2}$ son las condiciones iniciales, mientras $f_{\psi,1,2}$ son los lados derechos (fuentes). Consideremos la función $\delta\psi = \psi_1 - \psi_2$. Sustituyéndola en (2.106) y poniendo $\lambda = \delta\psi$, obtenemos

$$\frac{1}{2} \|\delta\psi\|_T^2 + \gamma \left(\|\delta\psi_x\|^2 + \|\delta\psi_y\|^2 \right) \leq \frac{1}{2} \|\delta g\|_0^2 + \|\delta f_\psi\| \|\delta\psi\|. \quad (\text{T.12})$$

Aquí $\|\delta g\|_0 = \sqrt{\int_{D_t} |\delta g(x, y)|^2 dD_t}$, $\delta f_\psi = f_{\psi,1} - f_{\psi,2}$, $\delta g = g_1 - g_2$. Ya que el lado izquierdo

de (T.12) está acotado, existen dos constantes $\rho, \chi \in [0, \infty)$ tales que

$$\frac{1}{2}\|\delta\psi\|_T^2 + \gamma\left(\|\delta\psi_x\|^2 + \|\delta\psi_y\|^2\right) \leq \|\delta\psi\|_{\Xi}\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right), \quad (\text{T.13})$$

donde

$$\|\delta\psi\|_{\Xi} = \rho\|\delta\psi\|_T + \chi\left(\|\delta\psi_x\| + \|\delta\psi_y\|\right).^3 \quad (\text{T.14})$$

Ya que cada sumando en el lado izquierdo de (T.13) no es mayor que la expresión en el lado derecho, se tienen las estimaciones

$$\begin{aligned} \|\delta\psi\|_T &\leq \sqrt{2\|\delta\psi\|_{\Xi}\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right)}, \\ \|\delta\psi_x\| &\leq \sqrt{\frac{\|\delta\psi\|_{\Xi}\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right)}{\gamma}}, \\ \|\delta\psi_y\| &\leq \sqrt{\frac{\|\delta\psi\|_{\Xi}\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right)}{\gamma}}. \end{aligned} \quad (\text{T.15})$$

Por consiguiente,

$$\|\delta\psi\|_{\Xi} = \rho\|\delta\psi\|_T + \chi\left(\|\delta\psi_x\| + \|\delta\psi_y\|\right) \leq \left(\sqrt{2}\rho + \frac{2}{\sqrt{\gamma}}\chi\right)\sqrt{\|\delta\psi\|_{\Xi}\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right)}, \quad (\text{T.16})$$

de donde obtenemos

$$\|\delta\psi\|_{\Xi} \leq \left(\sqrt{2}\rho + \frac{2}{\sqrt{\gamma}}\chi\right)^2\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right). \quad (\text{T.17})$$

La estabilidad de solución y el teorema están probados. ■

³ Así, se pueden elegir

$$\rho^* \geq \frac{\|\delta\psi\|_T}{2\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right)}, \quad \chi^* \geq \frac{\gamma \max\{\|\delta\psi_x\|, \|\delta\psi_y\|\}}{\left(\|\delta f_\nu\| + \|\delta g\|_0\right)}.$$

2.4.5 Algunas estimaciones y observaciones

Estimemos qué tan lejos de Γ debe colocarse la frontera ∂D_I del dominio D_I . Siguiendo la fórmula (T.5) del Teorema 2.2, se puede escribir $l_{\max} = \max_{(x,y,t) \in \Omega \times [0,T]} \frac{1}{k} \sqrt{\mu\tau}$, donde τ es un paso temporal utilizado en los cálculos numéricos. Por consiguiente, la frontera ∂D_I puede ser obtenida por (T.6)-(T.9). El coeficiente de proporcionalidad k puede ser hallado empíricamente.

Consideremos el asunto acerca del error sobre la frontera ∂D_I . Sustituyendo (2.94) en (2.54), tenemos

$$\begin{aligned}
\varepsilon_d(x, y, t) &\equiv \frac{\partial \varphi_I}{\partial t} - \mu \Delta \varphi_I = \\
&= \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} + \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} - \\
&- \mu \left[\sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial x^{2(m+1)}} \frac{t^m}{m!} + \sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial x^2 \partial y^{2m}} \frac{t^m}{m!} - \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial y^2 \partial x^{2m}} \frac{t^m}{m!} + \sum_{m=0}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial y^{2(m+1)}} \frac{t^m}{m!} - \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} \right] = \\
&= \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} + \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} \\
&- \mu \left[\sum_{m=1}^{(d+1)/2} \mu^{m-1} \frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} + \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial x^2 \partial y^{2m}} \frac{t^m}{m!} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial y^2 \partial x^{2m}} \frac{t^m}{m!} + \sum_{m=1}^{(d+1)/2} \mu^{m-1} \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \frac{t^{m-1}}{(m-1)!} \right] = \\
&= - \left[\mu^{(d+1)/2} \frac{\partial^{d+1} g}{\partial x^{d+1}} \frac{t^{(d-1)/2}}{\left(\frac{d-1}{2}\right)!} + \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^{m+1} \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial x^2 \partial y^{2m}} \frac{t^m}{m!} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^{m+1} \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial y^2 \partial x^{2m}} \frac{t^m}{m!} + \mu^{(d+1)/2} \frac{\partial^{d+1} g}{\partial y^{d+1}} \frac{t^{(d-1)/2}}{\left(\frac{d-1}{2}\right)!} \right] \Big|_{(x,y) \in \partial D_I}.
\end{aligned} \tag{2.107}$$

Denotemos $c_1 = \max_{(x,y) \in \partial D_I} \left\{ \left| \frac{\partial^{d+1} g}{\partial x^{d+1}} \right|, \left| \frac{\partial^{d+1} g}{\partial y^{d+1}} \right| \right\}$, $c_2 = \max_{\substack{(x,y) \in \partial D_I \\ 1 \leq m \leq (d-1)/2}} \left\{ \left| \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial x^2 \partial y^{2m}} \right|, \left| \frac{\partial^{2(m+1)} g}{\partial y^2 \partial x^{2m}} \right| \right\}$.

Entonces

$$|\varepsilon_d| \leq 2\mu \left[c_1 \frac{(\mu t)^{(d-1)/2}}{\left(\frac{d-1}{2}\right)!} + c_2 \sum_{m=1}^{(d-1)/2} \frac{(\mu t)^m}{m!} \right]. \quad (2.108)$$

Si existen dos constantes $K_1 < \infty$, $K_2 < \infty$ tales que $c_1 \leq K_1$, $c_2 \leq K_2$ para cualquier $d \geq 3$ impar, entonces, debido a $n! \approx n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$ (la fórmula de Stirling, véase, por ejemplo, [11]), el primer sumando en (2.108) tiende a cero cuando d tiende al infinito. Notando también que $\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\mu t)^m}{m!} = e^{\mu t} - 1$, obtenemos la estimación

$$|\varepsilon_{\infty}| \leq 2\mu K_2 (e^{\mu t} - 1). \quad (2.109)$$

Observación 2.5. Como se sigue de la fórmula (2.95), cuando t tiende al infinito, la función $\varphi_I(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_I} \rightarrow \infty$, que contradice la asintótica temporal del proceso difusivo. Sin embargo, para un $t = \tau$ fijo $\varphi_I(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_I, t=\tau}$ puede ser reconocida como una solución de la ecuación difusiva discretizada en tiempo, que fue obtenida por el método de Runge-Kutta de orden $(d-1)/2$ (véase, por ejemplo, [95, 122]). Realmente, para $d = 3$ la fórmula (2.95) es simplemente el método de Euler (o el Runge-Kutta de orden uno):

$$\varphi_I^{n+1} = \varphi_I^n + \mu\tau \Delta \varphi_I^n, \quad n \in \{0\} \cup \mathbb{N}, \quad \varphi_I^0 = g; \quad (2.110)$$

para $d = 5$ tenemos el método de punto medio (o el Runge-Kutta de orden dos):

$$p_{1,\alpha} = \mu\tau \frac{\partial^2 \varphi_I^n}{\partial \alpha^2}, \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (2.111)$$

$$p_{2,\alpha} = \mu\tau \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \left(\varphi_I^n + \frac{1}{2} p_{1,\alpha} \right), \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (2.112)$$

$$\varphi_I^{n+1} = \varphi_I^n + \sum_{\alpha=\{x,y\}} p_{2,\alpha} = \varphi_I^n + \mu\tau \Delta \varphi_I^n + \mu^2 \frac{\tau^2}{2} \sum_{\alpha=\{x,y\}} \frac{\partial^4 \varphi_I^n}{\partial \alpha^4}; \quad (2.113)$$

el caso $d = 9$ corresponde al método de Runge-Kutta de orden cuatro

$$p_{1,\alpha} = \mu\tau \frac{\partial^2 \varphi_I^n}{\partial \alpha^2}, \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (2.114)$$

$$p_{2,\alpha} = \mu\tau \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \left(\varphi_I^n + \frac{1}{2} p_{1,\alpha} \right), \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (2.115)$$

$$p_{3,\alpha} = \mu\tau \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \left(\varphi_I^n + \frac{1}{2} p_{2,\alpha} \right), \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (2.116)$$

$$p_{4,\alpha} = \mu\tau \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \left(\varphi_I^n + p_{3,\alpha} \right), \quad \alpha = \{x, y\}, \quad (2.117)$$

$$\begin{aligned} \varphi_I^{n+1} &= \varphi_I^n + \sum_{\alpha=\{x,y\}} \left(\frac{p_{1,\alpha}}{6} + \frac{p_{2,\alpha}}{3} + \frac{p_{3,\alpha}}{3} + \frac{p_{4,\alpha}}{6} \right) = \\ &= \varphi_I^n + \mu\tau \Delta \varphi_I^n + \mu^2 \frac{\tau^2}{2} \sum_{\alpha=\{x,y\}} \frac{\partial^4 \varphi_I^n}{\partial \alpha^4} + \mu^3 \frac{\tau^3}{6} \sum_{\alpha=\{x,y\}} \frac{\partial^6 \varphi_I^n}{\partial \alpha^6} + \mu^4 \frac{\tau^4}{24} \sum_{\alpha=\{x,y\}} \frac{\partial^8 \varphi_I^n}{\partial \alpha^8}, \end{aligned} \quad (2.118)$$

etc. Por lo tanto, para cada $d \geq 3$ impar el uso de las condiciones de frontera (2.95) es admisible con cualquier paso temporal $\tau < \infty$ (desde luego, el esquema computacional debe ser estable).

Observación 2.6. Basándonos en los hechos que las CFAs (2.35) y (2.95) son *exactas* (esto es cierto para la advección en los casos continuo y discreto, y es cierto para la difusión en el caso discreto –véase la observación 2.5), podemos hacer la siguiente importante conclusión, a saber: la solución del problema escindido converge a la solución del problema no escindido.

Realmente, en la sección 2.2 se demuestra la convergencia de la técnica de escisión para los problemas de Cauchy, es decir, sin tener en cuenta las CFAs. Con esto, ya que las CFAs construidas son exactas, los problemas de Cauchy se reformulan *exactamente* a los problemas de frontera sin introducir errores en las soluciones. Por lo tanto, debido a lo que 1) los problemas de Cauchy son equivalentes a los de frontera, y 2) la solución de los problemas de Cauchy escindidos converge a la solución del problema de Cauchy no escindido, concluimos que la solución de los problemas de frontera escindidos converge a la solución del problema de frontera no escindido.

Observación 2.7. La realización numérica de las condiciones de frontera (2.95) conduce a la necesidad de usar diferencias finitas izquierdas o derechas para calcular las derivadas espaciales sobre la frontera artificial. Es conocido que los esquemas de diferencias finitas apropiados son incondicionalmente inestables, ya que para ellos no se cumple la condición necesaria de von Neumann (véase, por ejemplo, [6, 95]). Para superar esta dificultad, se sugiere extrapolar la función g más allá de la frontera. Debido a esto, las diferencias finitas centrales pueden ser utilizadas, y por lo tanto el esquema de diferencias finitas puede llegar a ser estable.

Sea $y = y^*$ una línea coordinada, mientras $x_0, x_1 \in \mathbf{R}_x$ tales que

$$(x_0, y^*) \in \partial D_I, \quad (x_1, y^*) \in D_I. \quad (2.119)$$

Continuemos g exponencialmente, es decir,

$$g = g_0 \exp(\lambda x). \quad (2.120)$$

Aquí $g_0 = g(x_0, y^*)$, $\lambda \geq 0$. De (2.119) y (2.120) encontramos

$$g = g_0 \exp\left(\frac{x}{\Delta x} \ln\left(\frac{g_1}{g_0}\right)\right), \quad (2.121)$$

donde $g_1 = g(x_1, y^*) \geq g_0$, $\Delta x = |x_1 - x_0|$, y, por consiguiente, para $p \in \mathbf{N}$ y $x = -p\Delta x$ tenemos

$$g_{-p} = \frac{g_0^{p+1}}{g_1^p}. \quad (2.122)$$

Una ventaja de la extrapolación exponencial es que para el esquema de diferencias finitas apropiado se cumple la condición de von Neumann, y por eso se puede esperar que el esquema será estable.

Hay que enfatizar que la aproximación exponencial no es la única posibilidad. Así, por ejemplo, se puede buscar la función g más allá de la frontera en la forma

$$g = g_0 \exp(\lambda_1 x + \lambda_2 x^2 + \dots + \lambda_q x^q), \quad (2.123)$$

donde $q \in \mathbb{N}$. Sin embargo, esto requiere más puntos x_i en la extrapolación. Otro método puede consistir en el empleo del aparato de continuación analítica de la función g más allá de ∂D_I [124]; no obstante, esa técnica es mucho más complicada en comparación con la extrapolación (2.122).

Observación 2.8. En el marco del enfoque de descomposición de dominio se puede usar otro método para construir las condiciones de frontera artificiales al solucionar el problema (2.49)-(2.51). Sean dadas dos funciones de frontera, $\theta^{(0)}(x, y, t)$ y $\chi^{(0)}(x, y, t)$, para los problemas (2.54)-(2.57) y (2.90)-(2.92), respectivamente. Entonces para una $d \geq 3$ impar dada, en un momento fijo de tiempo $t_n \in T$ las funciones $\varphi_{E,d}$ y φ_I pueden ser encontradas iterativamente por la solución de los problemas exterior e interior (2.54)-(2.57) y (2.90)-(2.92), respectivamente, con la corrección de las funciones de frontera en cada paso de iteración por las fórmulas

$$\begin{aligned} \chi^{(i)}(x, y, t) &= \varphi_{E,d}^{(i-1)}(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \partial D_I, t=t_n}, \\ \theta^{(i)}(x, y, t) &= \varphi_I^{(i-1)}(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \Gamma, t=t_n}. \end{aligned} \quad (2.124)$$

Aquí $i \in \mathbb{N}$ es el número de iteración. El procedimiento iterativo se requiere para ensamblar las soluciones en el traslape $D_I \cap D_E$. El enfoque señalado es una modificación del método alternado de Schwarz (véase [102], también [22]); esa técnica fue aplicada para construir las CFAs en los trabajos [1, 23-28, 41, 45]. Sin embargo, el método dado posee algunas desventajas, a saber: según el tamaño del traslape $D_I \cap D_E$ y el parámetro μ en $\bar{\Omega}$, para obtener una precisión tolerable a veces el número de iteraciones debe ser bastante grande. Además, junto con el problema interior aparece la necesidad de considerar el problema exterior, cuya solución, generalmente hablando, no es de interés práctico.

2.5 Conclusión del segundo capítulo

En el capítulo fue presentado un método de construcción de condiciones de frontera artificiales locales para la solución numérica de la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción en un dominio convexo. Se mostró que las CFAs obtenidas conducen a problemas bien planteados, se investigaron los asuntos de precisión, se presentaron las estimaciones de los errores. En comparación con las condiciones de frontera artificiales, presentadas en los trabajos de otros autores, éstas poseen las siguientes ventajas:

- la expresión para la condición de frontera en el problema de advección es la CFA exacta local, que admite la posibilidad de solución exacta de la ecuación de transporte sin crecer la complejidad del algoritmo numérico;
- la realización numérica de las condiciones de frontera para solucionar el problema general de advección-difusión-absorción sobre la base de la técnica de escisión por procesos físicos conduce a la solución exacta de la ecuación en el marco del esquema de diferencias finitas apropiado (véase la observación 2.5);
- el uso de las condiciones de frontera artificiales obtenidas es aceptable al solucionar la ecuación de advección-difusión-absorción en un conjunto bidimensional arbitrario convexo con una frontera artificial suave a trozos.

Capítulo 3

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

En este capítulo se analizan resultados de los experimentos numéricos para la solución de la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción con el uso del método de construcción de las CFAs, presentado en el capítulo anterior. El objetivo de los experimentos fue confirmar las estimaciones teóricas de los errores de las soluciones y demostrar la eficacia del enfoque de las condiciones de frontera artificiales desde el punto de vista del ahorro de recursos de la máquina.

3.1 Comentarios generales

En todos los experimentos los conjuntos Ω y D_I fueron

$$\begin{aligned}\Omega &= \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 < x < 1, 0 < y < 1\}, \\ D_I &= \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid -0.5 < x < 1.5, -0.5 < y < 1.5\}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Los experimentos fueron hechos para tres pasos temporales $\tau^{(num)} = 0.005, 0.004, 0.003$, el tiempo de modelación fue $T = 12$. Todas las soluciones numéricas se compararon con las “exactas”, calculadas en el dominio $\bar{S} = [-2, 3] \times [-2, 3]$. Tal práctica de comparación es típica en la literatura (véase, por ejemplo, [59, 66]). Los espaciamientos de las mallas fueron $\Delta x = \Delta y = 0.05$, la condición inicial fue cero, las fuentes se calcularon por la fórmula

$$f(x, y, t) = 0.6t^2 e^{-0.273\sqrt{t^3}} (\cos t + 1)^{\frac{1}{4}} [1 - \cos 4\pi(x - 0.35)][1 - \cos 4\pi(y - 0.1)], \quad (3.2)$$

$$(x, y) \in [0.35, 0.85] \times [0.1, 0.6].$$

Tal función refleja el comportamiento de las fuentes usadas en la modelación [66].

Los experimentos se hicieron para los siguientes tres problemas:

1. el problema puro de advección;
2. el problema puro de difusión;
3. el problema general de advección-difusión-absorción.

Al solucionar los primeros dos problemas, el paso temporal para la solución “exacta” fue $\tau^{(exact)} = 0.001$; al solucionar el problema general, el paso temporal $\tau^{(exact)}$ fue igual a $\tau^{(num)}$. Para cada uno de los problemas los experimentos se pueden clasificar en tres grupos:

- I. el primer grupo correspondió a los valores constantes de los parámetros;
- II. en el segundo grupo los parámetros dependieron de las coordenadas espaciales;
- III. en el tercer grupo los problemas se solucionaron con valores fijos de los parámetros en los dominios con tamaños crecientes $D_{glb,0} = [-2, 3] \times [-2, 3]$, $D_{glb,1} = [-5, 6] \times [-5, 6]$, $D_{glb,2} = [-8, 9] \times [-8, 9]$, $D_{glb,3} = [-11, 12] \times [-11, 12]$ y $D_{glb,4} = [-14, 15] \times [-14, 15]$ sin CFAs.

El objetivo de los experimentos de los primeros dos grupos fue confirmar la funcionalidad de las CFAs, obtenidas en el capítulo anterior. Los experimentos del tercer grupo fueron hechos para justificar la importancia práctica del enfoque de las CFAs desde el punto de vista del ahorro de recursos de la máquina.

3.2 Advección

Al solucionar el problema de advección

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial(u\varphi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi)}{\partial y} = f, \quad (3.3)$$

$$\varphi|_{t=0} = g(x, y), \quad (3.4)$$

$$\varphi(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \partial D_1^-} = g(x - ut, y - vt) \Big|_{(x,y) \in \partial D_1^-} \quad (3.5)$$

la discretización del operador diferencial de la ecuación (3.3) fue implementada sobre la base del esquema explícito “contraviento” (inglés: *upwind differencing*) de la forma [95]

$$\frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\tau} = -|u_{i,j}| \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i-p,j}^n}{\Delta x} - |v_{i,j}| \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j-q}^n}{\Delta y}, \quad (3.6)$$

$$\varphi_{i,j}^{n+1} = \varphi_{i,j}^{n+1} + \mathcal{F}_{i,j}^n.$$

Aquí $p = \text{sign}(u_{i,j})$, $q = \text{sign}(v_{i,j})$, $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$, $v_{i,j} = v(x_i, y_j)$, $\varphi_{i,j}^n = \varphi(x_i, y_j, t_n)$, $f_{i,j}^n = f(x_i, y_j, t_n)$, τ es el paso temporal, mientras Δx y Δy son los pasos espaciales. Sobre la frontera del dominio D_1 la función $\varphi_{i,j}^{n+1}$ se calculó por la fórmula (3.5). Para el campo de velocidades se cumplió la condición de continuidad

$$\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y} = 0. \quad (3.7)$$

Transformemos la ecuación (3.3) a una forma adimensional, basándonos en el π -teorema (véase [3], también la Pág. 43 de la tesis). De acuerdo con lo último, la ecuación (3.3), expresada como una función ξ de $p = 4$ cantidades dimensionales –

$$\xi(\varphi, \mathbf{U}, l, t) = 0, \quad (3.8)$$

– es representable en forma de relación entre $p - q$ combinaciones adimensionales (o bien, π -grupos) de estas cantidades, es decir,

$$\xi(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_{p-q}) = 0. \quad (3.9)$$

Aquí $[\varphi] = M/L^2$, $[\mathbf{U}] = L/T$, $[l] = L$ y $[t] = T$, donde M , L y T denotan masa, longitud y tiempo, respectivamente. En calidad de cantidades fundamentales elijamos, por

ejemplo, φ , l y t . Entonces $q = 3$, y por lo tanto, existe el único ($p - q = 4 - 3 = 1$) grupo adimensional $\pi_1 = \mathbf{U} \frac{t}{l}$. Por consiguiente, podemos reescribir (3.3) en la forma

$$\xi \left(\mathbf{U} \frac{t}{l} \right) = 0. \quad (3.10)$$

Definamos

$$\mathbf{U} = \max \{ |u|, |v| \}, \quad t = \max \{ \tau \}, \quad l = \min \{ l_x, l_y \}, \quad (3.11)$$

donde l_x y l_y denotan tamaños lineales del dominio $\bar{\Omega}$ en las direcciones x y y , respectivamente. El esquema (3.6) es condicionalmente estable cuando $\pi_1 \leq 0.003$ y aproxima el problema (3.3)-(3.5) con 1^{er} orden por tiempo y por espacio.

En cada momento de tiempo las soluciones numérica y “exacta” se compararon en la norma $L_2(\bar{\Omega})$:

$$\varepsilon_{\bar{\Omega}} = \left\| \varphi^{(num)} - \varphi^{(exact)} \right\|_{L_2(\bar{\Omega})} = \sqrt{\Delta x \Delta y \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left| \varphi_{i,j}^{n(num)} - \varphi_{i,j}^{n(exact)} \right|^2}. \quad (3.12)$$

Además, se calcularon los valores promedios de los errores en la norma $L_2(\bar{\Omega} \times (0, T])$:

$$\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]} = \left\| \varphi^{(num)} - \varphi^{(exact)} \right\|_{L_2(\bar{\Omega} \times (0, T])} = \sqrt{\tau^{(num)} \Delta x \Delta y \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left| \varphi_{i,j}^{n(num)} - \varphi_{i,j}^{n(exact)} \right|^2}. \quad (3.13)$$

Aquí $\varphi_{i,j}^{n(num)}$ y $\varphi_{i,j}^{n(exact)}$ son los valores de las soluciones numérica y “exacta”, respectivamente, en un punto (x_i, y_j) en un momento de tiempo $t = t_k$, $I = J = 21$, $N = T/\tau^{(num)}$.

3.2.1 Grupo I. Valores constantes del campo de velocidades

En este grupo de experimentos la ecuación (3.3) se solucionó con valores constantes del campo de velocidades $\mathbf{U} = (u, v)$. El parámetro \mathbf{U} fue $(0.6, 0.48)$, $(0.5, 0.4)$, $(0.4, 0.32)$,

$(0.3, 0.24)$, $(0.2, 0.16)$, $(0.1, 0.08)$, $(0.01, 0.008)$, $(0.001, 0.0008)$ y $(0.0001, 0.00008)$. Tales valores del campo de velocidades corresponden a los prácticos [104]; con esto se cumple $\pi_1 \leq 0.003$.

Como un ejemplo, en la Fig. 3-1 se muestran gráficos de la variación del error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ en tiempo para el campo de velocidades $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$ con $\tau^{(num)} = 0.005$.

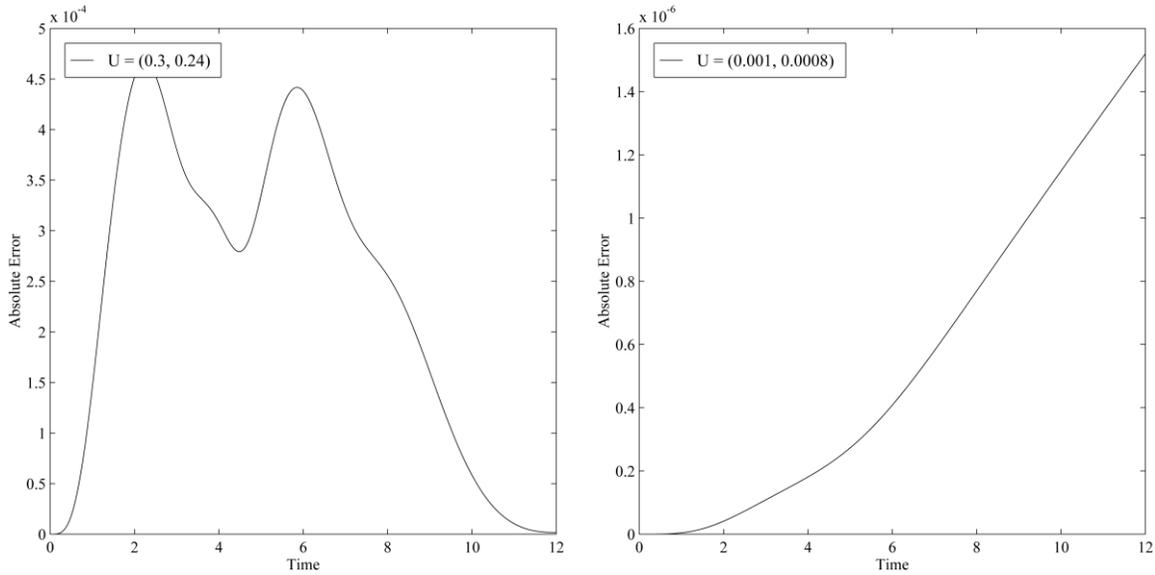


Fig. 3-1. Gráficos de la variación del error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ en tiempo.
 $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

Es fácil verificar que cuando $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ (o bien, cuando la advección es grande), el error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ repite en general el comportamiento de la función $f(x, y, t)$ en tiempo. Cuando $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$ (es decir, cuando la advección es muy pequeña), el error crece durante todo el tiempo de modelación, ya que debido a la (cuasi-)ausencia del transporte la cantidad $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ se acumula en el dominio de interés y no se mueve a la frontera y después fuera de Ω .

En la tabla 3.1 se presentan los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ para cada uno de los experimentos¹. Los mismos datos para $\tau^{(num)} = 0.005$ se presentan en la Fig. 3-2. Se ve que cuando \mathbf{U} es menor que algún crítico \mathbf{U}^* , la función $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ crece monótonamente al crecer el módulo del campo de velocidades debido a la discretización temporal del problema, pero cuando $\mathbf{U} > \mathbf{U}^*$, el error se transporta (o bien, “se empuja”) fuera del dominio de interés debido al proceso de advección mismo tan rápido que descere al crecer el módulo del campo \mathbf{U} .

Tabla 3.1. Advección, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$.

| $\mathbf{U} = (u, v)$ | $\tau^{(num)} = 0.005$ | $\tau^{(num)} = 0.004$ | $\tau^{(num)} = 0.003$ |
|-----------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| (0.6, 0.48) | $7.315 \cdot 10^{-4}$ | | |
| (0.5, 0.4) | $7.791 \cdot 10^{-4}$ | | |
| (0.4, 0.32) | $8.557 \cdot 10^{-4}$ | | |
| (0.3, 0.24) | $9.844 \cdot 10^{-4}$ | $7.377 \cdot 10^{-4}$ | $4.914 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.2, 0.16) | $1.188 \cdot 10^{-3}$ | | |
| (0.1, 0.08) | $1.204 \cdot 10^{-3}$ | | |
| (0.01, 0.008) | $1.737 \cdot 10^{-4}$ | | |
| (0.001, 0.0008) | $2.521 \cdot 10^{-6}$ | $1.890 \cdot 10^{-6}$ | $1.260 \cdot 10^{-6}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $2.618 \cdot 10^{-8}$ | | |

¹ Para claridad los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$, que corresponden a los pasos temporales $\tau^{(num)} = 0.004$ y $\tau^{(num)} = 0.003$, se presentan sólo para algunos valores del campo \mathbf{U} .

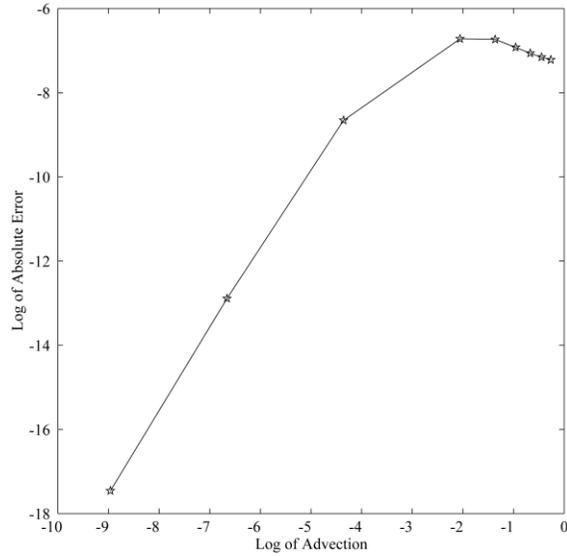


Fig. 3-2. Gráfico de la dependencia del error promedio $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ con respecto al módulo del campo de velocidades \mathbf{U} . $\tau^{(num)} = 0.005$.

En la Fig. 3-3 se muestran gráficos de la dependencia del error $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ con respecto al paso temporal $\tau^{(num)}$ para $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$.

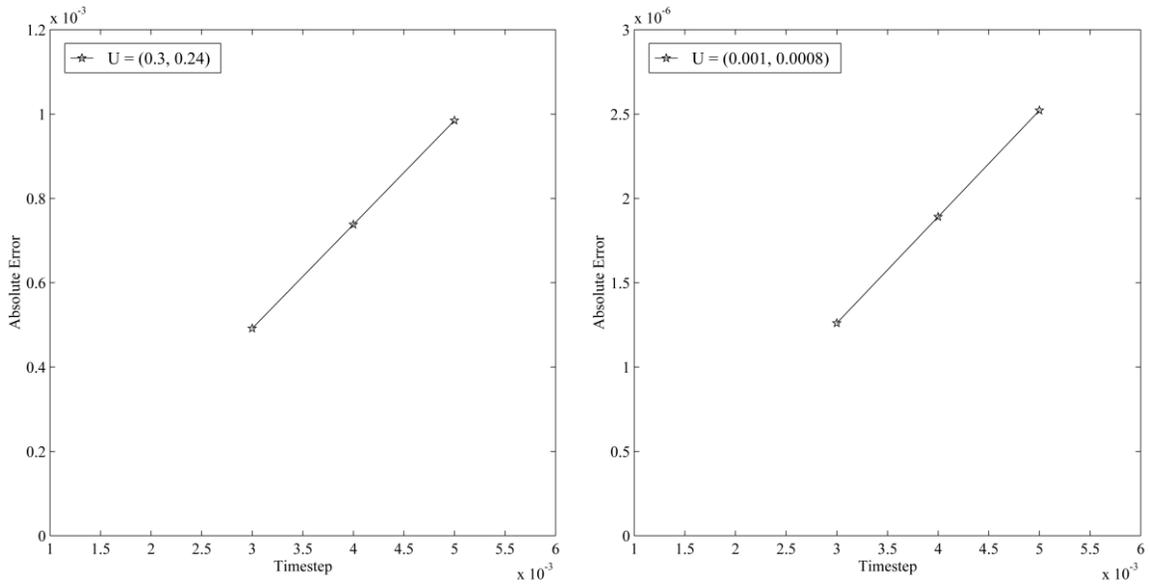


Fig. 3-3. Gráficos de la dependencia del error promedio $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ con respecto al paso temporal $\tau^{(num)}$. $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$.

Como se sigue de la figura, la extrapolación de las curvas al punto $\tau^{(num)} = \tau^{(exact)}$ resulta el valor cero del error $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T]}$, que confirma que la fórmula (3.5) produce la condición de frontera artificial *exacta*.

3.2.2 Grupo II. Valores variables del campo de velocidades

Este grupo de experimentos repite el anterior, con tal diferencia que en lugar del campo constante de velocidades se consideraron las funciones de la forma

$$\mathbf{U}(x, y) = \begin{cases} \mathbf{V} + \mathbf{U}^{\text{var}}, & \text{si } (x, y) \in \overline{\Omega}, \\ \mathbf{V}, & \text{si } (x, y) \notin \overline{\Omega}. \end{cases} \quad (3.14)$$

Aquí el campo \mathbf{V} tenía los mismos valores que \mathbf{U} en el grupo I, mientras el retrato del campo $\mathbf{U}^{\text{var}} = \mathbf{U}^{\text{var}}(x, y)$ se presenta en la Fig. 3-4.

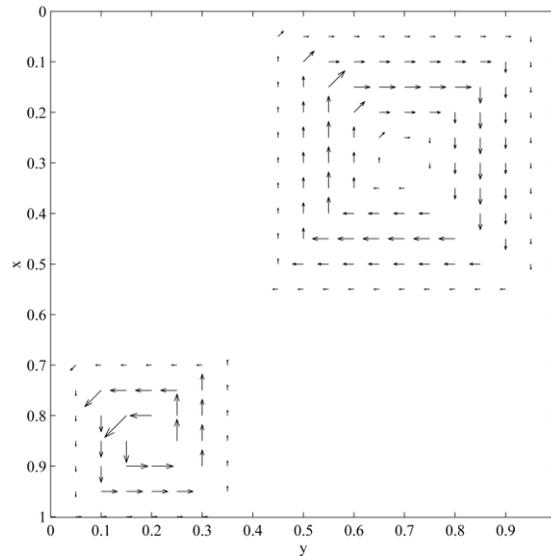


Fig. 3-4. Retrato del campo de velocidades \mathbf{U}^{var} en el dominio $\overline{\Omega}$.

En la tabla 3.2 se resumen los errores promedios, calculados por la fórmula (3.13), para $\tau^{(num)} = 0.005$. Se puede ver que los resultados son casi idénticos a los que fueron obtenidos en el primer grupo de experimentos (véase la tabla 3.1). Esto significa que la condición de frontera (3.5) toma bien variaciones del campo de velocidades \mathbf{U} en el

dominio $\overline{\Omega}$. En otras palabras, los errores de las soluciones no son sensibles a variaciones del parámetro U .

Tabla 3.2. Advección, grupo II.

Los errores promedios $\mathcal{E}_{\overline{\Omega} \times (0, T]}$.

| $\mathbf{V} = (u, v)$ | |
|-----------------------|-----------------------|
| (0.6, 0.48) | $7.300 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.5, 0.4) | $7.769 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.4, 0.32) | $8.523 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.3, 0.24) | $9.786 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.2, 0.16) | $1.176 \cdot 10^{-3}$ |
| (0.1, 0.08) | $1.181 \cdot 10^{-3}$ |
| (0.01, 0.008) | $1.684 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.001, 0.0008) | $2.441 \cdot 10^{-6}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $2.541 \cdot 10^{-8}$ |

3.2.3 Grupo III. Ahorro de los recursos

Este grupo de experimentos fue hecho para el campo de velocidades $\mathbf{U} = (0.01, 0.008) + \mathbf{U}^{\text{var}}$, donde \mathbf{U}^{var} está definido en la sección anterior, con el paso temporal $\tau = 0.005$. El problema (3.3)-(3.5) se solucionó en el dominio $D_I = [-0.5, 1.5] \times [-0.5, 1.5]$ con CFAs y en los dominios con tamaños crecientes $D_{glb,i} = [-2 - 3i, 3 + 3i] \times [-2 - 3i, 3 + 3i]$, $i = 0, 1, \dots, 4$, sin CFAs. En la tabla 3.3 se resumen las relaciones entre los tiempos $T_{glb,i}$ y T_I , requisitos para hacer un paso temporal para solucionar el problema de advección en los dominios $D_{glb,i}$ y D_I , respectivamente. Los mismos datos se muestran en la Fig. 3-5 (la primera columna de la tabla y el primer punto del gráfico corresponden a la relación T_I/T_I para D_I/D_I).

Tabla 3.3. Advección, grupo III. Las relaciones $T_{glb,i}/T_I$.

| $D_{glb,i} / D_I$ | 1.0 | 2.5 | 5.5 | 8.5 | 11.5 | 14.5 |
|-------------------|--------|--------|--------|---------|---------|---------|
| $T_{glb,i} / T_I$ | 1.0000 | 2.3030 | 6.4848 | 11.9696 | 19.6363 | 30.4545 |

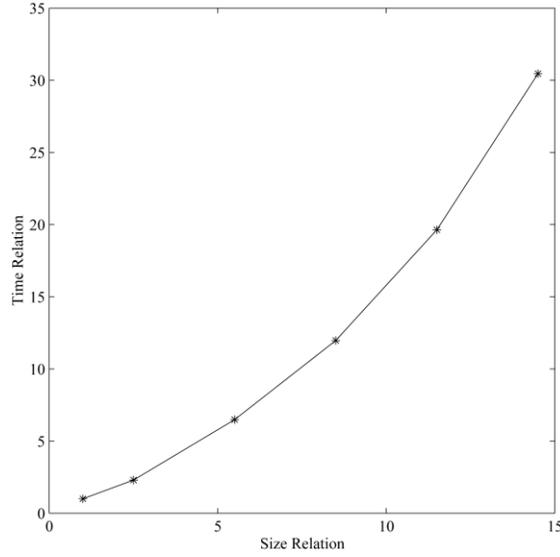


Fig. 3-5. Gráfico de la dependencia de la relación $T_{glb,i}/T_I$ con respecto a la relación $D_{glb,i}/D_I$.
 $U = (0.01, 0.008) + U^{var}$, $\tau = 0.005$.

Se ve que el comportamiento de la curva es de un carácter cuadrático con respecto al tamaño lineal del dominio $D_{glb,i}$. Obviamente, si en lugar de D_I se considera un dominio, por ejemplo, cien veces más grande que D_I , entonces esto conducirá a un tiempo de cómputo no aceptable. Por lo tanto, el uso del enfoque de las CFAs en el marco del problema de advección es absolutamente justificado.

3.3 Difusión

Al solucionar el problema de difusión

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = f, \quad (3.15)$$

$$\varphi|_{t=0} = g(x, y), \quad (3.16)$$

$$\varphi(x, y, t)|_{(x,y) \in \partial D_t} = \left[\sum_{m=1}^{(d-1)/2} \mu^m \frac{t^m}{m!} \left(\frac{\partial^{2m} g}{\partial x^{2m}} + \frac{\partial^{2m} g}{\partial y^{2m}} \right) + g(x, y) \right] |_{(x,y) \in \partial D_t} \quad (3.17)$$

la discretización del operador diferencial de la ecuación (3.15) fue implementada sobre la base del esquema explícito Delantero Tiempo Centrado Espacio, DTCE (inglés: *Forward Time Centred Space, FTCS*) de la forma [95]

$$\begin{aligned} \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\tau} = & \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{\mu_{i+1,j} + \mu_{i,j}}{2} \frac{\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i,j}^n}{\Delta x} - \frac{\mu_{i,j} + \mu_{i-1,j}}{2} \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right] + \\ & + \frac{1}{\Delta y} \left[\frac{\mu_{i,j+1} + \mu_{i,j}}{2} \frac{\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j}^n}{\Delta y} - \frac{\mu_{i,j} + \mu_{i,j-1}}{2} \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right], \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\varphi_{i,j}^{n+1} = \varphi_{i,j}^n + \mathcal{F}_{i,j}^n.$$

Aquí Δx y Δy son los pasos espaciales, τ es el paso temporal, $\mu_{i,j} = \mu(x_i, y_j)$, $\varphi_{i,j}^n = \varphi(x_i, y_j, t_n)$ y $f_{i,j}^n = f(x_i, y_j, t_n)$. Los experimentos se hicieron para tres condiciones de frontera, que corresponden a los valores $d = 3, 5, 7$. Para calcular las derivadas espaciales de los órdenes 2, 4 y 6 en las condiciones (3.17), se aplicó la extrapolación exponencial discreta (véase la fórmula (2.122))

$$g_{-p} = \frac{g_0^{p+1}}{g_1^p} \quad (3.19)$$

y se usaron las diferencias finitas centrales $\{+1; -2; +1\}$, $\{+1; -4; +6; -4; +1\}$ y $\{+1; -6; +15; -20; +15; -6; +1\}$ en x y y , respectivamente (véase, por ejemplo, [11]). Para la solución “exacta” sobre la frontera ∂S del dominio S se utilizó la CFA, que corresponde a $d = 7$.

Transformemos la ecuación (3.15) a una forma adimensional. Por el π -teorema, para la ecuación (3.15), implícitamente expresada en la forma

$$\xi(\varphi, \mu, l, t) = 0, \quad (3.20)$$

existe el único grupo adimensional $\pi_1 = \sqrt{\mu^* t}/l$, y por lo tanto, tenemos

$$\zeta\left(\frac{\sqrt{\mu^* t}}{l}\right) = 0. \quad (3.21)$$

Sean

$$\mu^* = \max\{\mu\}, \quad t = \max\{\tau\}, \quad l = \min\{l_x, l_y\}, \quad (3.22)$$

donde l_x y l_y denotan tamaños lineales del dominio $\bar{\Omega}$ en las direcciones x y y , respectivamente. Los esquemas computacionales son condicionalmente estables cuando $\pi_1 \leq \sqrt{2.5 \cdot 10^{-4}} \approx 0.01581$ y aproximan el problema con segundo orden por espacio y primer por tiempo.

En cada momento de tiempo las soluciones numérica y “exacta” se compararon en la norma del espacio $L_2(\partial D_I)$, es decir,

$$\mathcal{E}_{\partial D_I, d} = \left\| \varphi_d^{(num)} - \varphi^{(exact)} \right\|_{L_2(\partial D_I)} = \sqrt{\Delta x \sum_{\partial Z} \left| \varphi_{d, \partial Z}^{n(num)} - \varphi_{\partial Z}^{n(exact)} \right|^2}. \quad (3.23)$$

Además, se calcularon los errores promedios en la norma $L_2(\partial D_I \times (0, T])$:

$$\mathcal{E}_{\partial D_I \times (0, T], d} = \left\| \varphi_d^{(num)} - \varphi^{(exact)} \right\|_{L_2(\partial D_I \times (0, T])} = \sqrt{\tau^{(num)} \Delta x \sum_{n=1}^N \sum_{\partial Z} \left| \varphi_{\partial Z, d}^{n(num)} - \varphi_{\partial Z}^{n(exact)} \right|^2}. \quad (3.24)$$

Aquí $\varphi_{\partial Z, d}^{(num)}$ y $\varphi_{\partial Z}^{(exact)}$ son los valores de las soluciones numérica y “exacta”, respectivamente, en un punto $(x_{\partial Z_i}, y_{\partial Z_j})$ de la frontera ∂D_I en un momento de tiempo $t = t_k$, $\partial Z = \{\partial Z_i, \partial Z_j\}$ es el multiíndice que pasa por todos los puntos del conjunto ∂D_I , y $N = T/\tau^{(num)}$.

3.3.1 Grupo I. Valores constantes del coeficiente de difusión

En este grupo de experimentos la ecuación (3.15) se consideró con los siguientes valores constantes del parámetro de difusión μ : 0.05, 0.01, 0.005, 0.001, 0.0005 y 0.0001. Los valores señalados corresponden a los datos reales (véase, por ejemplo, [76]). Con esto se cumple $\pi_1 \leq \sqrt{2.5 \cdot 10^{-4}} \approx 0.01581$.

En la Fig. 3-6 se presentan los gráficos de la variación de los errores $\varepsilon_{\partial D_I, d}$ en tiempo con el coeficiente de difusión $\mu = 0.05$ para los tres valores señalados del parámetro d y $\tau^{(num)} = 0.005$. Se ve que para todos los d 's se tiene el crecimiento del error, causado por una inexactitud de la extrapolación (3.19). Por lo tanto, esta aproximación puede ser utilizada solamente para un tiempo de modelación pequeño, cuando el error se encuentra en los límites aceptables.

La tabla 3.4 resume los errores promedios $\varepsilon_{\partial D_I \times (0, T], d}$ para cada uno de los experimentos². La Fig. 3-7 presenta la dependencia de los errores con respecto al coeficiente de difusión cuando $\tau^{(num)} = 0.005$.

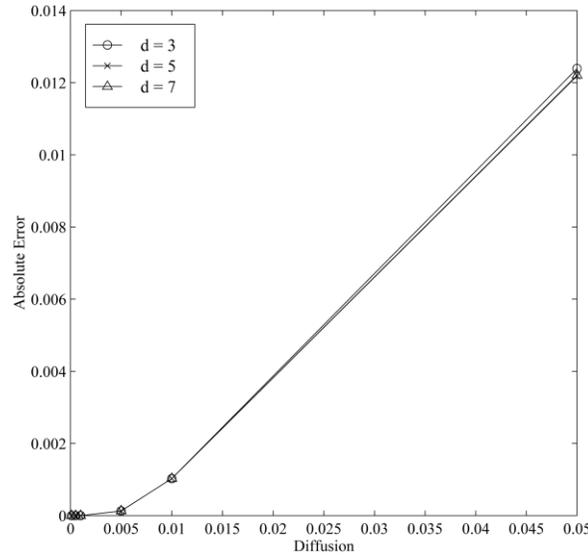


Fig. 3-7. Gráficos de la dependencia de los errores promedios $\varepsilon_{\partial D_I \times (0, T], d}$ con respecto al coeficiente de difusión μ para $d = 3, 5, 7$. $\tau^{(num)} = 0.005$.

² Para claridad los errores $\varepsilon_{\partial D_I \times (0, T], d}$, que corresponden a los pasos temporales $\tau^{(num)} = 0.004$ y $\tau^{(num)} = 0.003$, se presentan sólo para algunos valores del coeficiente μ .

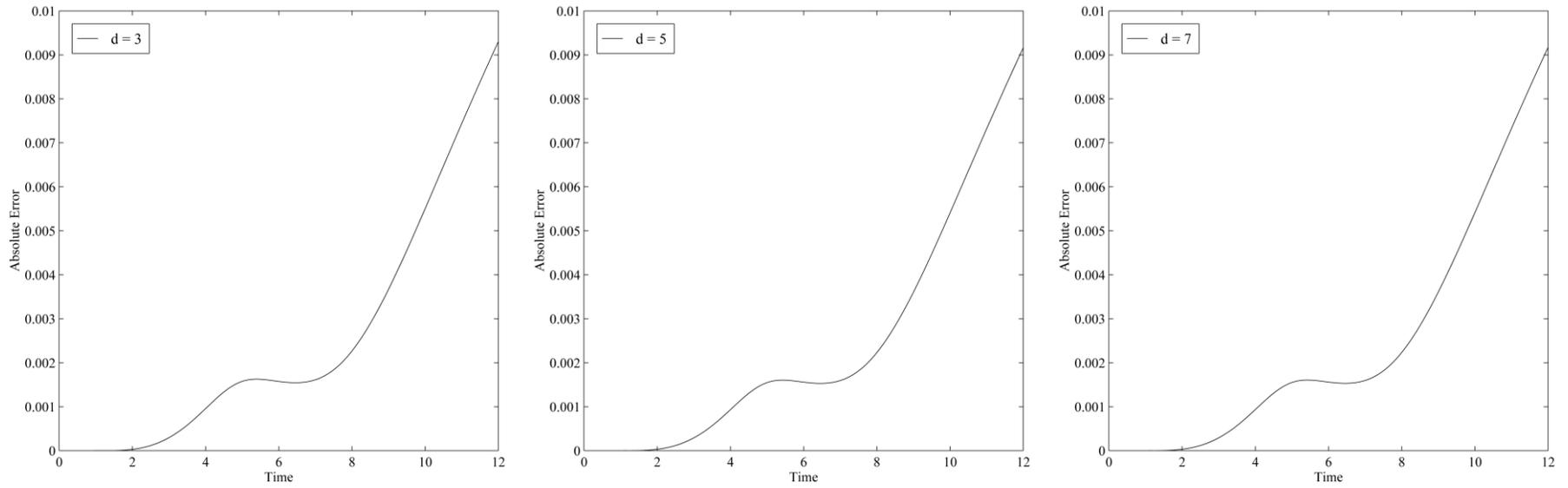


Fig. 3-6. Gráficos de la variación de los errores $\varepsilon_{\partial D_1, d}$ en tiempo para $d = 3, 5, 7$. $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

Tabla 3.4. Difusión, grupo I. Los errores promedios $\mathcal{E}_{\partial D_I \times (0, T], d}$.

| μ | 0.05 | 0.01 | 0.005 | 0.001 | 0.0005 | 0.0001 | |
|---------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|------------------------|--------|------------------------|
| $d = 3$ | $1.239 \cdot 10^{-2}$ | $1.027 \cdot 10^{-3}$ | $1.295 \cdot 10^{-4}$ | $1.115 \cdot 10^{-8}$ | $5.295 \cdot 10^{-11}$ | 0 | $\tau^{(num)} = 0.005$ |
| $d = 5$ | $1.218 \cdot 10^{-2}$ | $1.027 \cdot 10^{-3}$ | $1.313 \cdot 10^{-4}$ | $9.181 \cdot 10^{-9}$ | $4.672 \cdot 10^{-11}$ | 0 | |
| $d = 7$ | $1.220 \cdot 10^{-2}$ | $1.027 \cdot 10^{-3}$ | $1.313 \cdot 10^{-4}$ | $9.179 \cdot 10^{-9}$ | $4.671 \cdot 10^{-11}$ | 0 | |
| $d = 3$ | $1.237 \cdot 10^{-2}$ | | | | | | $\tau^{(num)} = 0.004$ |
| $d = 5$ | $1.221 \cdot 10^{-2}$ | | | | | | |
| $d = 7$ | $1.222 \cdot 10^{-2}$ | | | | | | |
| $d = 3$ | $1.235 \cdot 10^{-2}$ | | | | | | $\tau^{(num)} = 0.003$ |
| $d = 5$ | $1.223 \cdot 10^{-2}$ | | | | | | |
| $d = 7$ | $1.223 \cdot 10^{-2}$ | | | | | | |

Se puede ver que el beneficio en la precisión es insignificativo al crecer el orden de la condición de frontera. También, de la Fig. 3-7 se sigue que cuando $\mu < 0.01$ la dependencia es de un carácter polinomial, como se afirma por la estimación (2.108). Obviamente, una contribución adicional al error se introduce por la inexactitud de la aproximación (3.19). Para $\mu > 0.01$ esta inexactitud llega a ser esencial y la dependencia se cambia a una cuasi-lineal (Fig. 3-7). Esto significa que en el caso del problema puro difusivo con valores grandes del parámetro μ una extrapolación más precisa que (3.19) debe ser utilizada para calcular las derivadas en las condiciones de frontera (3.17).

Fig. 3-8 muestra los gráficos de la dependencia de los errores $\mathcal{E}_{\partial D_I \times (0, T], d}$ con respecto al paso temporal $\tau^{(num)}$ para $\mu = 0.05$.

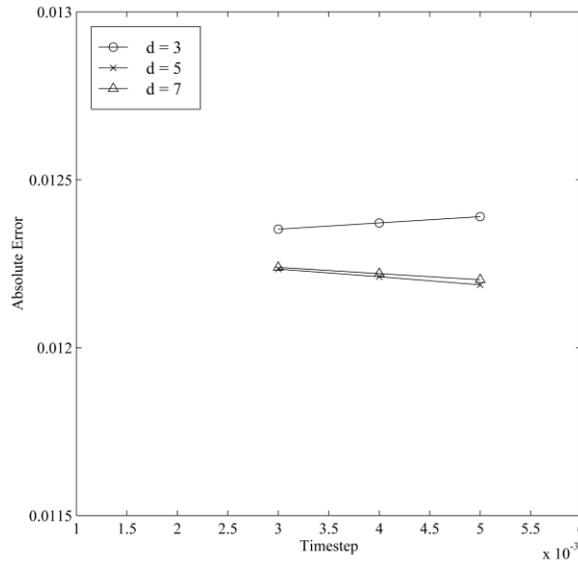


Fig. 3-8. Gráficos de la dependencia de los errores promedios $\mathcal{E}_{\partial D_I \times (0, T], d}$ con respecto al paso temporal $\tau^{(num)}$ para $d = 3, 5, 7$. $\mu = 0.05$.

Como se sigue de la figura, el error es prácticamente constante (o bien, cuasi-constante), que contradice la estimación (2.108). Esto también confirma que la influencia de la inexactitud de la aproximación (3.19) es esencial, y se requiere una extrapolación más cuidadosa para calcular las derivadas espaciales en las condiciones (3.17).

3.3.2 Grupo II. Valores variables del coeficiente de difusión

Este grupo de experimentos repite el anterior, con tal diferencia que como el coeficiente de difusión se consideraron las funciones de la forma

$$\mu(x, y) = \begin{cases} \kappa(1 + \mu^{\text{var}}), & \text{si } (x, y) \in \overline{\Omega}, \\ \kappa, & \text{si } (x, y) \notin \overline{\Omega}, \end{cases} \quad (3.25)$$

donde

$$\kappa = \{0.05, 0.01, 0.005, 0.001, 0.0005, 0.0001\}. \quad (3.26)$$

El retrato de la función $\mu^{\text{var}}(x, y) = [1 - \cos(4\pi x)][1 - \cos(6\pi y)]/2$ se muestra en la Fig. 3-9.

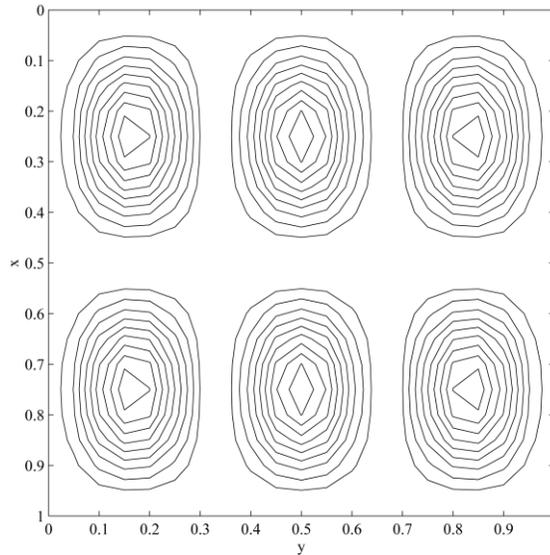


Fig. 3-9. Retrato de la función μ^{var} en el dominio $\overline{\Omega}$.

En la tabla 3.5 se resumen los datos sobre los errores promedios, calculados por la fórmula (3.24), para $\tau^{(num)} = 0.005$. Se puede ver que los resultados prácticamente no se diferencian de los que fueron obtenidos antes (véase la tabla 3.4). Esto permite concluir que las condiciones de frontera (3.17) toman bastante bien las variaciones del parámetro μ en el dominio $\overline{\Omega}$. Además, este hecho confirma la afirmación del teorema 2.2.

Tabla 3.5. Difusión, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\partial D_I \times (0, T], d}$.

| κ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ |
|----------|------------------------|------------------------|------------------------|
| 0.05 | $1.320 \cdot 10^{-2}$ | $1.299 \cdot 10^{-2}$ | $1.300 \cdot 10^{-2}$ |
| 0.01 | $1.230 \cdot 10^{-3}$ | $1.228 \cdot 10^{-3}$ | $1.229 \cdot 10^{-3}$ |
| 0.005 | $1.686 \cdot 10^{-4}$ | $1.706 \cdot 10^{-4}$ | $1.706 \cdot 10^{-4}$ |
| 0.001 | $1.619 \cdot 10^{-8}$ | $1.322 \cdot 10^{-8}$ | $1.321 \cdot 10^{-8}$ |
| 0.0005 | $8.531 \cdot 10^{-11}$ | $7.519 \cdot 10^{-11}$ | $7.517 \cdot 10^{-11}$ |
| 0.0001 | 0 | 0 | 0 |

3.3.3 Grupo III. Ahorro de los recursos

En este grupo de experimentos el coeficiente de difusión μ se definió por la fórmula (3.25) con $\kappa = 0.05$, el paso temporal fue $\tau = 0.005$. El problema (3.15)-(3.17) se solucionó en el dominio $D_I = [-0.5, 1.5] \times [-0.5, 1.5]$ con CFAs y en los dominios con tamaños crecientes $D_{glb, i} = [-2 - 3i, 3 + 3i] \times [-2 - 3i, 3 + 3i]$, $i = 0, 1, \dots, 4$, sin CFAs. La tabla 3.6 resume las relaciones entre los tiempos $T_{glb, i}$ y T_I , requisitos para hacer un paso temporal para solucionar el problema de difusión en los dominios $D_{glb, i}$ y D_I , respectivamente. También estos datos se presentan en la Fig. 3-10 (la primera columna de la tabla y el primer punto del gráfico corresponden a la relación T_I/T_I para D_I/D_I).

Tabla 3.6. Difusión, grupo III. Las relaciones $T_{glb, i}/T_I$.

| | | | | | | |
|--------------------|--------|--------|--------|--------|---------|---------|
| $D_{glb, i} / D_I$ | 1.0 | 2.5 | 5.5 | 8.5 | 11.5 | 14.5 |
| $T_{glb, i} / T_I$ | 1.0000 | 1.6052 | 4.3421 | 7.0789 | 11.6842 | 17.0789 |

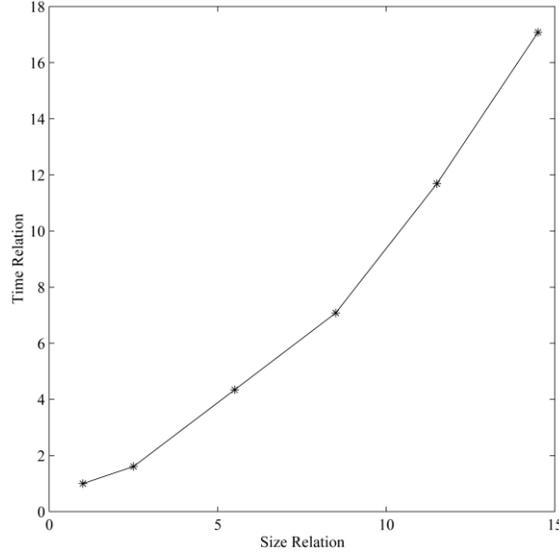


Fig. 3-10. Gráfico de la dependencia de la relación $T_{glb,i}/T_I$ con respecto a la relación $D_{glb,i}/D_I$. $\mu = 0.05 + 0.05\mu^{var}$, $\tau = 0.005$.

Se puede ver que la dependencia es de un carácter cuadrático con respecto al tamaño lineal del dominio $D_{glb,i}$. Es obvio que el uso de un dominio, por ejemplo, cien veces más grande que D_I , conducirá a un tiempo de cómputo no aceptable. Esto justifica la importancia del enfoque de las CFAs para el problema de difusión.

3.4 Advección-difusión-absorción

Al solucionar el problema general de advección-difusión-absorción la discretización de los términos advectivo y difusivo del operador diferencial de la ecuación

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial(u\varphi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \sigma \varphi = f \quad (3.27)$$

fue implementada sobre la base de los esquemas “contraviento” y Delantero Tiempo Centrado Espacio

$$\varphi_{i,j}^{n+1} = \varphi_{i,j}^n + \mathbf{L}_{adv} \varphi_{i,j}^n \equiv \varphi_{i,j}^n - \tau \left(|u_{i,j}| \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i-p,j}^n}{\Delta x} + |v_{i,j}| \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j-q}^n}{\Delta y} \right) \quad (3.28)$$

y

$$\begin{aligned}
\varphi_{i,j}^{n+1} &= \varphi_{i,j}^n + \mathbf{L}_{dif} \varphi_{i,j}^n \equiv \\
&\equiv \varphi_{i,j}^n + \frac{\tau}{\Delta x} \left[\frac{\mu_{i+1,j} + \mu_{i,j}}{2} \frac{\varphi_{i+1,j}^n - \varphi_{i,j}^n}{\Delta x} - \frac{\mu_{i,j} + \mu_{i-1,j}}{2} \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right] + \\
&+ \frac{\tau}{\Delta y} \left[\frac{\mu_{i,j+1} + \mu_{i,j}}{2} \frac{\varphi_{i,j+1}^n - \varphi_{i,j}^n}{\Delta y} - \frac{\mu_{i,j} + \mu_{i,j-1}}{2} \frac{\varphi_{i,j}^n - \varphi_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right], \quad (3.29)
\end{aligned}$$

respectivamente. Para la absorción se empleó $\mathbf{L}_{abs} \varphi_{i,j}^n \equiv -\tau \sigma \varphi_{i,j}^n$.

Se consideró el caso cuando la difusión es insignificante fuera del dominio \overline{D}_I en comparación con la advección, que es válido en muchas situaciones reales (véase, por ejemplo, [32, 76], también [69-71, 96]).

La solución “exacta” se calculó por el esquema no escindido

$$\varphi_{i,j}^{n+1(exact)} = \varphi_{i,j}^{n(exact)} + (\mathbf{L}_{adv} + \mathbf{L}_{dif} + \mathbf{L}_{abs}) \varphi_{i,j}^{n(exact)}, \quad (3.30)$$

$$\varphi_{i,j}^{n+1(exact)} = \varphi_{i,j}^{n+1(exact)} + \mathcal{I}_{i,j}^{n+1}; \quad (3.31)$$

sobre la frontera ∂D_I fue impuesta la CFA difusiva que corresponde a $d = 9$ (véase la fórmula (2.95))

$$\varphi_{i,j}^{n+1(exact)} = \sum_{m=1}^4 \mu^m \frac{t^m}{m!} \left(\frac{\partial^{2m} \varphi_{i,j}^{n(exact)}}{\partial x^{2m}} + \frac{\partial^{2m} \varphi_{i,j}^{n(exact)}}{\partial y^{2m}} \right) + \varphi_{i,j}^{n(exact)}. \quad (3.32)$$

Para las derivadas espaciales de órdenes 2, 4, 6 y 8 se usaron las diferencias finitas centrales $\{+1; -2; +1\}$, $\{+1; -4; +6; -4; +1\}$, $\{+1; -6; +15; -20; +15; -6; +1\}$ y $\{+1; -8; +28; -56; +70; -56; +28; -8; +1\}$, respectivamente [11]. Sobre la parte afluente de la frontera ∂S del dominio S fue impuesta la CFA advectiva (2.35) con absorción

$$\varphi_{i,j}^{n+1(exact)} = g(x_i - u(n+1)\tau, y_j - v(n+1)\tau) e^{-\sigma(n+1)\tau}. \quad (3.33)$$

La solución numérica se calculó como sigue. Sobre todo, para minimizar el error que ocurre debido a la escisión por procesos físicos, el término absorbente fue incluido en

una de las ecuaciones (3.28), (3.29). (Eso se podía hacer porque este término no contiene derivadas espaciales, y por lo tanto, no tuvimos que construir CFAs para el proceso de absorción.) Sin embargo, es importante en cuál ecuación, (3.28) o (3.29), incluimos la absorción.

Primero incluyamos $\mathbf{L}_{adv}\varphi_{i,j}^n$ en (3.28). Entonces obtendremos (empezamos de la difusión)

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j}^{n+1(num,dif)} &= \varphi_{i,j}^{n(num)} + \mathbf{L}_{dif}\varphi_{i,j}^{n(num)}, \\ \varphi_{i,j}^{n+1(num)} &= \varphi_{i,j}^{n+1(num,dif)} + \mathbf{L}_{adv}\varphi_{i,j}^{n+1(num,dif)} + \mathbf{L}_{abs}\varphi_{i,j}^{n+1(num,dif)} = \dots = \\ &= \varphi_{i,j}^{n(num)} + (\mathbf{L}_{adv} + \mathbf{L}_{dif} + \mathbf{L}_{abs})\varphi_{i,j}^{n(num)} + (\mathbf{L}_{adv} + \mathbf{L}_{abs})\mathbf{L}_{dif}\varphi_{i,j}^{n(num)}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

esquema "adv"

Comparando (3.34) y (3.30), se puede ver que debido a la escisión ocurre un error $E = (\mathbf{L}_{adv} + \mathbf{L}_{abs})\mathbf{L}_{dif}$. Si $\mathbf{L}_{dif} \approx \mathbf{O}$ y \mathbf{L}_{adv} es arbitrario (aquí \mathbf{O} es el operador cero), entonces $E \approx \mathbf{O}$; si $\mathbf{L}_{adv} \approx \mathbf{O}$ y \mathbf{L}_{dif} es arbitrario, entonces $E \approx \mathbf{L}_{abs}\mathbf{L}_{dif}$, que puede introducir un error significativo en la solución.

Similarmente, incluyamos ahora $\mathbf{L}_{adv}\varphi_{i,j}^n$ en (3.29) (aquí empezamos de la advección)

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j}^{n+1(num,adv)} &= \varphi_{i,j}^{n(num)} + \mathbf{L}_{adv}\varphi_{i,j}^{n(num)}, \\ \varphi_{i,j}^{n+1(num)} &= \varphi_{i,j}^{n+1(num,adv)} + \mathbf{L}_{dif}\varphi_{i,j}^{n+1(num,adv)} + \mathbf{L}_{abs}\varphi_{i,j}^{n+1(num,adv)} = \dots = \\ &= \varphi_{i,j}^{n(num)} + (\mathbf{L}_{adv} + \mathbf{L}_{dif} + \mathbf{L}_{abs})\varphi_{i,j}^{n(num)} + (\mathbf{L}_{dif} + \mathbf{L}_{abs})\mathbf{L}_{adv}\varphi_{i,j}^{n(num)}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

esquema "diff"

El error es $E = (\mathbf{L}_{dif} + \mathbf{L}_{abs})\mathbf{L}_{adv}$. Si $\mathbf{L}_{dif} \approx \mathbf{O}$ y \mathbf{L}_{adv} es arbitrario, entonces $E \approx \mathbf{L}_{abs}\mathbf{L}_{adv}$; si $\mathbf{L}_{adv} \approx \mathbf{O}$ y \mathbf{L}_{dif} es arbitrario, entonces $E \approx \mathbf{O}$.

Por lo tanto, la solución numérica fue calculada dos veces, por el esquema (3.34) y por el esquema (3.35), y después se eligió el menor error. Las fuentes fueron calculadas simplemente por la fórmula

$$\varphi_{i,j}^{n+1(num)} = \varphi_{i,j}^{n+1(num)} + \mathcal{F}_{i,j}^{n+1}. \quad (3.36)$$

En los experimentos se verificaron las primeras tres CFA's difusivas que corresponden a $d = 3, 5, 7$. Para poder emplear diferencias centrales, para cada $d = 3, 5, 7$ el dominio D_I fue extendido para $(d-1)/2$ nodos y el problema de advección se solucionó en el dominio $D_I^{(d-1)/2}$ (Fig. 3-11). Sobre la parte afluyente de la frontera $\partial D_I^{(d-1)/2}$ (los puntos negros en la Fig. 3-11) fue impuesta la CFA (2.35) con absorción.

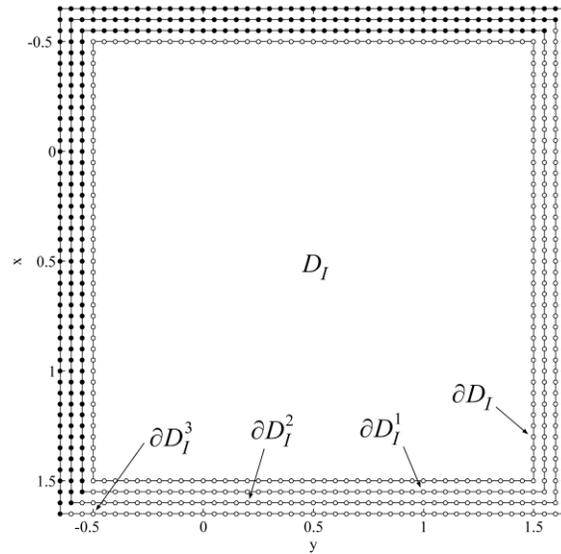


Fig. 3-11. Extensiones del dominio D_I para varios nodos de la malla.

Siempre tuvimos $\sigma = 0.17$.

Las soluciones numérica y “exacta” se compararon en las normas de los espacios $L_2(\overline{\Omega})$ y $L_2(\overline{\Omega} \times (0, T])$.

3.4.1 Grupo I. Valores constantes de los parámetros

Los experimentos fueron hechos en dos series. En la primera serie se fijó el campo de velocidades \mathbf{U} y se varió el coeficiente μ ; en la segunda, al contrario, se fijó μ y se varió \mathbf{U} .

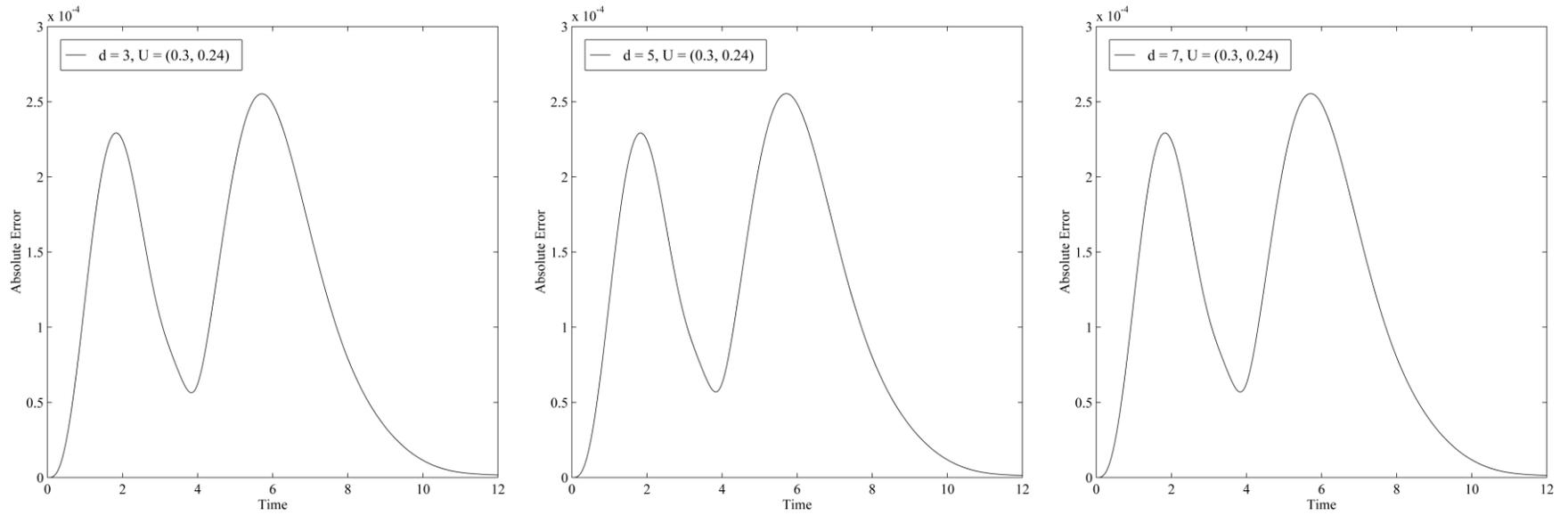


Fig. 3-12^a. Gráficos de la variación de los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega},d}$ en tiempo para $d = 3, 5, 7$. $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$, $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

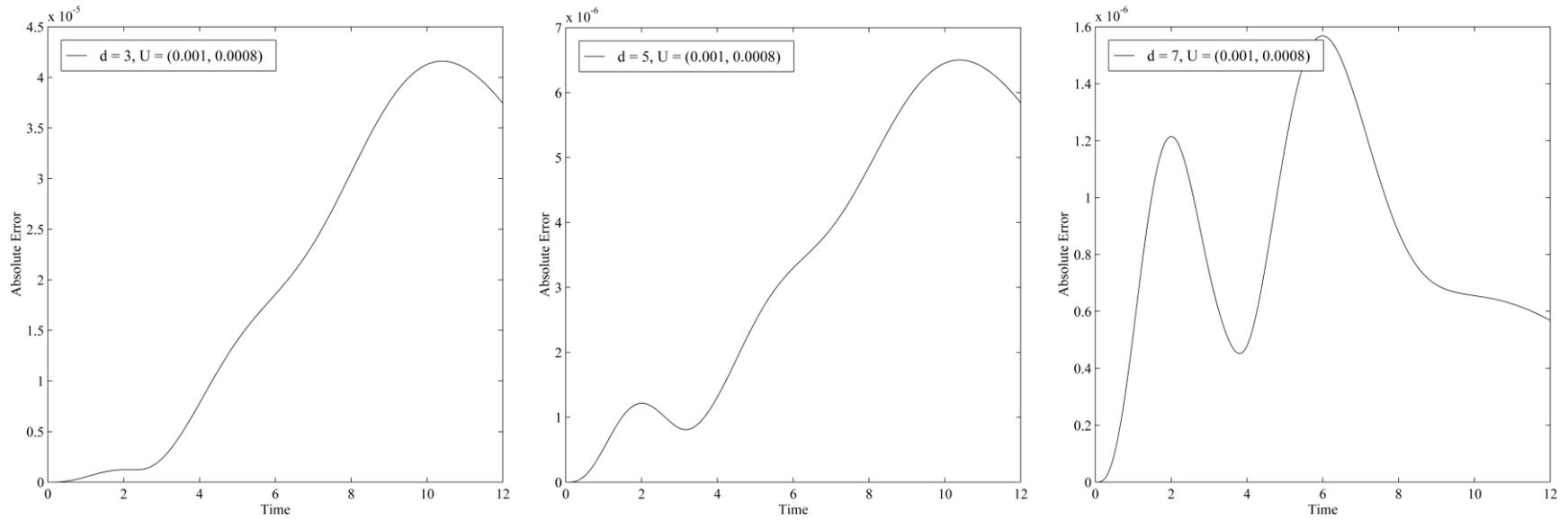


Fig. 3-12^b. Gráficos de la variación de los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega},d}$ en tiempo para $d = 3, 5, 7$. $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$, $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

En la Fig. 3-12^{a,b} se muestran gráficos de la variación de los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega},d}$ en tiempo para $d = 3, 5, 7$, con $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$, $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$, respectivamente. Se ve que cuando $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ (es decir, cuando la advección es bastante grande), los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega},d}$ repiten el comportamiento de la función $f(x, y, t)$ en tiempo. Sin embargo, cuando $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$ (o bien, cuando domina la difusión), los errores, que corresponden a los menores CFAs ($d = 3, 5$), logran el estado estable después de un tiempo bastante largo de modelación. Pero con la CFA más cuidadosa ($d = 7$) se obtiene la solución más precisa, y por lo tanto el gráfico del error $\varepsilon_{\bar{\Omega},7}$ es casi idéntico al comportamiento de las fuentes $f(x, y, t)$. Estos resultados indican la importancia de usar las CFAs difusivas de órdenes altos al solucionar el problema general de advección-difusión-absorción en el caso de velocidades pequeñas.

La tabla 3.7 resume los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0,T],d}$ para la primera serie de los experimentos. Para el campo de velocidades se fijó $\mathbf{U} = (0.01, 0.008)$, el paso temporal fue $\tau^{(num)} = 0.005^3$. Los mismos datos se presentan en la Fig. 3-13. Como se sigue de la figura, cuando la advección es dominante (a saber, cuando $\mu \leq 0.001$), el esquema (3.34) (o bien, el esquema “adv”) produce mejores resultados que el esquema (3.35) (el “diff”); pero cuando la difusión llega a ser dominante ($\mu \geq 0.005$), entonces el esquema (3.35) es preferible que (3.34). Este hecho confirma las observaciones, dadas en la Sección 3.4 al describir los cálculos de la solución numérica.

La Fig. 3-14 muestra la dependencia de los errores mínimos con respecto al coeficiente de difusión. Se puede ver que el beneficio en la precisión al crecer el orden d de la CFA difusiva se tiene cuando μ es bastante grande; cuando la difusión es pequeña, no importa cuál condición de frontera se utiliza.

³ Para que no complicar la tabla, omitimos los errores que corresponden a los pasos $\tau^{(num)} = 0.004$ y $\tau^{(num)} = 0.003$.

Tabla 3.7. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie.

| μ | 0.05 | 0.01 | 0.005 | 0.001 | 0.0005 | 0.0001 | |
|---------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------|
| $d = 3$ | $9.036 \cdot 10^{-5}$ | $1.837 \cdot 10^{-4}$ | $2.110 \cdot 10^{-4}$ | $1.791 \cdot 10^{-4}$ | $1.288 \cdot 10^{-4}$ | $3.798 \cdot 10^{-5}$ | esquema “adv” |
| $d = 5$ | $1.138 \cdot 10^{-4}$ | $1.837 \cdot 10^{-4}$ | $2.110 \cdot 10^{-4}$ | $1.791 \cdot 10^{-4}$ | $1.288 \cdot 10^{-4}$ | $3.798 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 7$ | $1.058 \cdot 10^{-4}$ | $1.837 \cdot 10^{-4}$ | $2.110 \cdot 10^{-4}$ | $1.791 \cdot 10^{-4}$ | $1.288 \cdot 10^{-4}$ | $3.798 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 3$ | $8.501 \cdot 10^{-5}$ | $8.788 \cdot 10^{-5}$ | $1.248 \cdot 10^{-4}$ | $1.962 \cdot 10^{-4}$ | $2.072 \cdot 10^{-4}$ | $2.092 \cdot 10^{-4}$ | esquema “diff” |
| $d = 5$ | $3.276 \cdot 10^{-5}$ | $8.788 \cdot 10^{-5}$ | $1.248 \cdot 10^{-4}$ | $1.962 \cdot 10^{-4}$ | $2.072 \cdot 10^{-4}$ | $2.092 \cdot 10^{-4}$ | |
| $d = 7$ | $2.932 \cdot 10^{-5}$ | $8.788 \cdot 10^{-5}$ | $1.248 \cdot 10^{-4}$ | $1.962 \cdot 10^{-4}$ | $2.072 \cdot 10^{-4}$ | $2.092 \cdot 10^{-4}$ | |

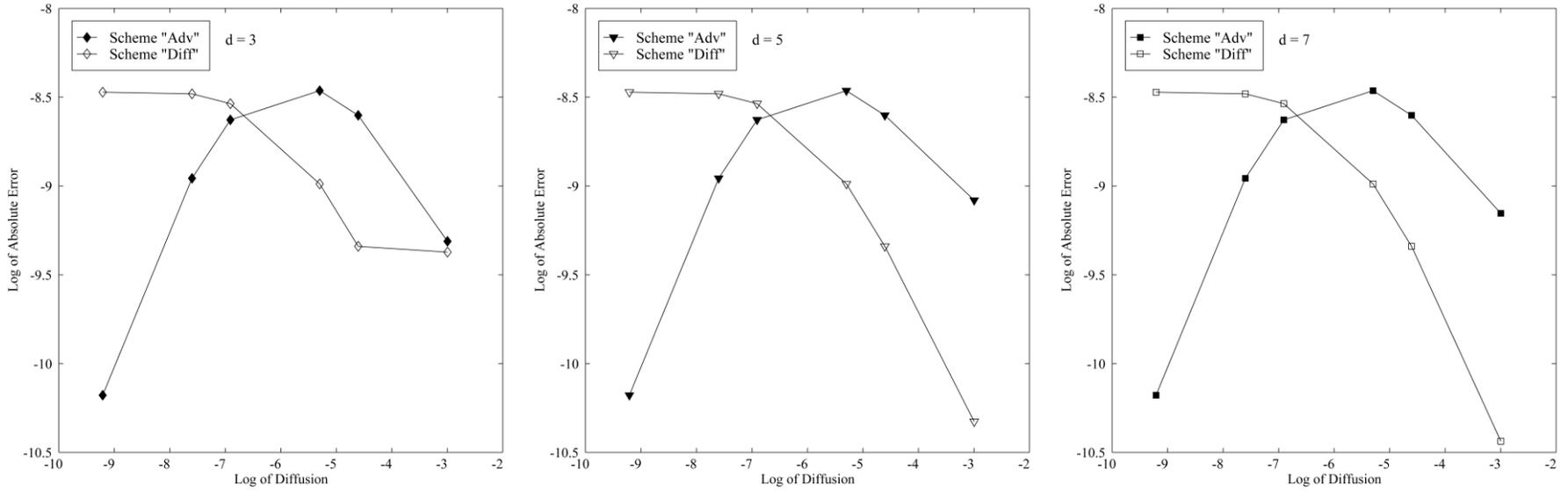


Fig. 3-13. Gráficos de la dependencia de los errores promedios $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al coeficiente de difusión μ para $d = 3, 5, 7$. $\mathbf{U} = (0.01, 0.008)$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

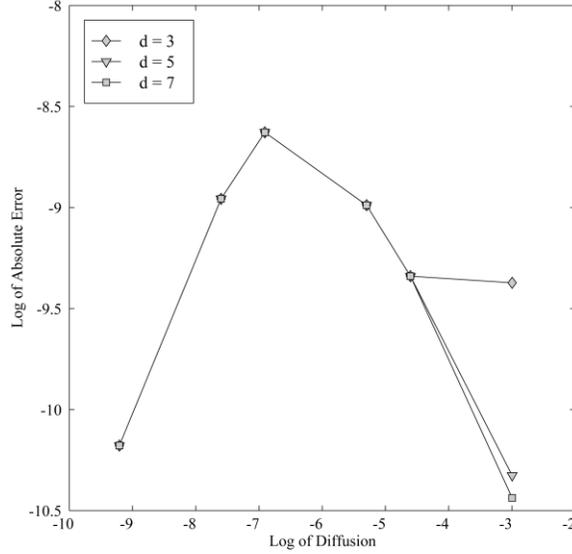


Fig. 3-14. Gráficos de la dependencia de los errores promedios mínimos $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al coeficiente de difusión μ para $d = 3, 5, 7$. $\mathbf{U} = (0.01, 0.008)$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

En la tabla 3.8 se presentan los errores promedios $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ para la segunda serie de los experimentos. Para la difusión se fijó $\mu = 0.05$, el paso temporal fue $\tau^{(num)} = 0.005^4$. Los mismos datos se muestran en la Fig. 3-15. Es fácil ver que cuando la advección es dominante ($(u, v) > (0.1, 0.08)$), los menores errores se producen por el esquema (3.34) (el “adv”); cuando la advección es dominada ($(u, v) \leq (0.1, 0.08)$), entonces el esquema (3.35) produce mejores resultados que (3.34). Esto confirma las observaciones de la Sección 3.4 sobre los cálculos de la solución numérica.

En la Fig. 3-16 se muestra la dependencia de los errores mínimos con respecto al módulo del campo \mathbf{U} . Se ve que el beneficio en la precisión se logra cuando \mathbf{U} es bastante pequeño; cuando la advección es grande, no importa cuál CFA difusiva se utiliza.

⁴ Para que no complicar la tabla, omitimos los errores que corresponden a los pasos $\tau^{(num)} = 0.004$ y $\tau^{(num)} = 0.003$.

Tabla 3.8. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0,T],d}$, segunda serie.

| $\mathbf{U} = (u, v)$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| (0.6, 0.48) | $4.993 \cdot 10^{-4}$ | $4.993 \cdot 10^{-4}$ | $4.993 \cdot 10^{-4}$ | $5.278 \cdot 10^{-4}$ | $5.278 \cdot 10^{-4}$ | $5.278 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.5, 0.4) | $5.056 \cdot 10^{-4}$ | $5.056 \cdot 10^{-4}$ | $5.056 \cdot 10^{-4}$ | $5.359 \cdot 10^{-4}$ | $5.360 \cdot 10^{-4}$ | $5.360 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.4, 0.32) | $4.993 \cdot 10^{-4}$ | $4.994 \cdot 10^{-4}$ | $4.994 \cdot 10^{-4}$ | $5.306 \cdot 10^{-4}$ | $5.308 \cdot 10^{-4}$ | $5.308 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.3, 0.24) | $4.685 \cdot 10^{-4}$ | $4.691 \cdot 10^{-4}$ | $4.691 \cdot 10^{-4}$ | $4.986 \cdot 10^{-4}$ | $4.995 \cdot 10^{-4}$ | $4.994 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.2, 0.16) | $3.952 \cdot 10^{-4}$ | $3.985 \cdot 10^{-4}$ | $3.980 \cdot 10^{-4}$ | $4.179 \cdot 10^{-4}$ | $4.218 \cdot 10^{-4}$ | $4.212 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.1, 0.08) | $2.526 \cdot 10^{-4}$ | $2.648 \cdot 10^{-4}$ | $2.627 \cdot 10^{-4}$ | $2.527 \cdot 10^{-4}$ | $2.626 \cdot 10^{-4}$ | $2.607 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.01, 0.008) | $9.036 \cdot 10^{-5}$ | $1.138 \cdot 10^{-4}$ | $1.058 \cdot 10^{-4}$ | $8.501 \cdot 10^{-5}$ | $3.276 \cdot 10^{-5}$ | $2.932 \cdot 10^{-5}$ |
| (0.001, 0.0008) | $8.615 \cdot 10^{-5}$ | $1.090 \cdot 10^{-4}$ | $9.981 \cdot 10^{-5}$ | $8.729 \cdot 10^{-5}$ | $1.396 \cdot 10^{-5}$ | $3.203 \cdot 10^{-6}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $8.608 \cdot 10^{-5}$ | $1.088 \cdot 10^{-4}$ | $9.950 \cdot 10^{-5}$ | $8.790 \cdot 10^{-5}$ | $1.369 \cdot 10^{-5}$ | $1.397 \cdot 10^{-6}$ |
| | esquema “adv” | | | esquema “diff” | | |

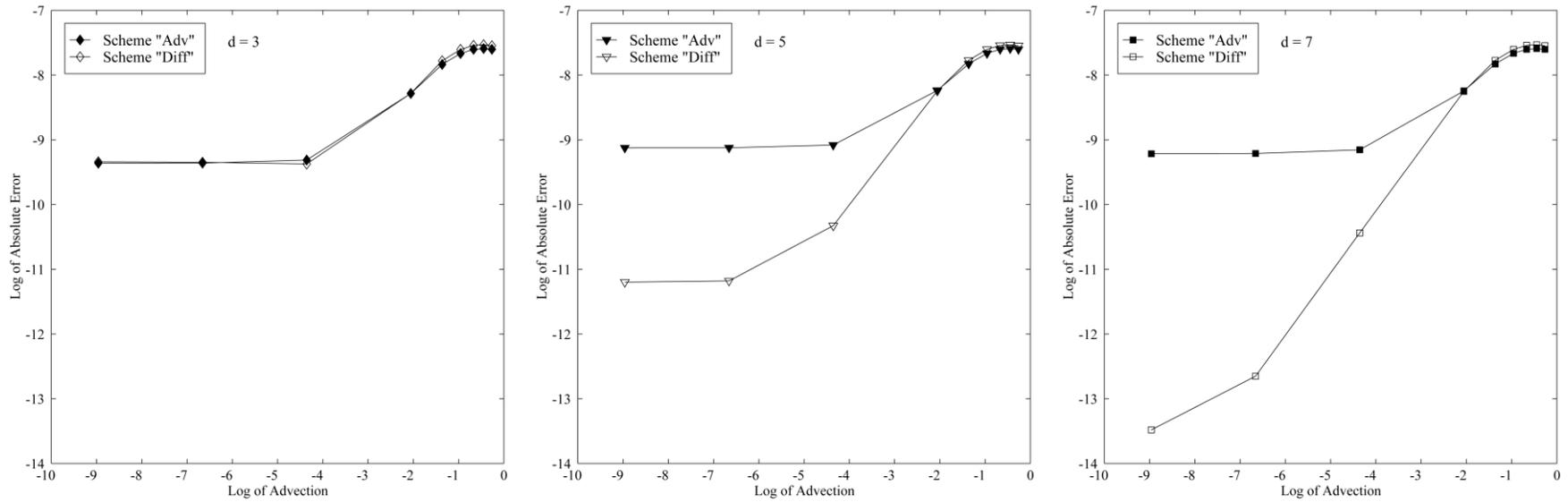


Fig. 3-15. Gráficos de la dependencia de los errores promedios $\mathcal{E}_{\overline{\Omega \times (0, T]}, d}$ con respecto al módulo del campo de velocidades \mathbf{U} para $d = 3, 5, 7$. $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

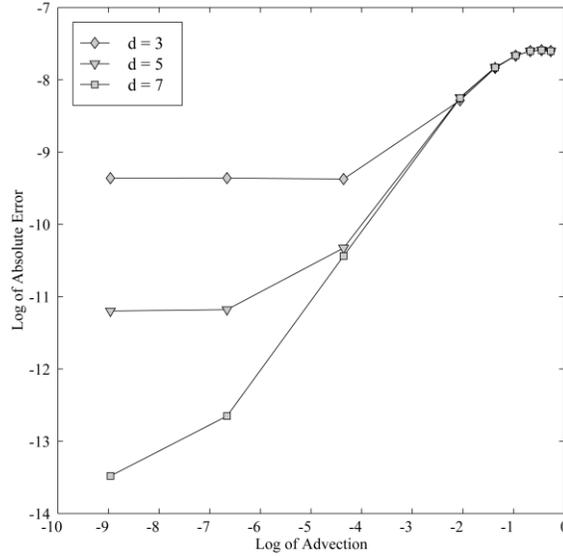


Fig. 3-16. Gráficos de la dependencia de los errores promedios mínimos $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al módulo del campo de velocidades \mathbf{U} para $d = 3, 5, 7$. $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

La Fig. 3-17 presenta gráficos de la dependencia de los errores $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al paso temporal $\tau^{(num)}$ para $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$, $\mu = 0.05$.

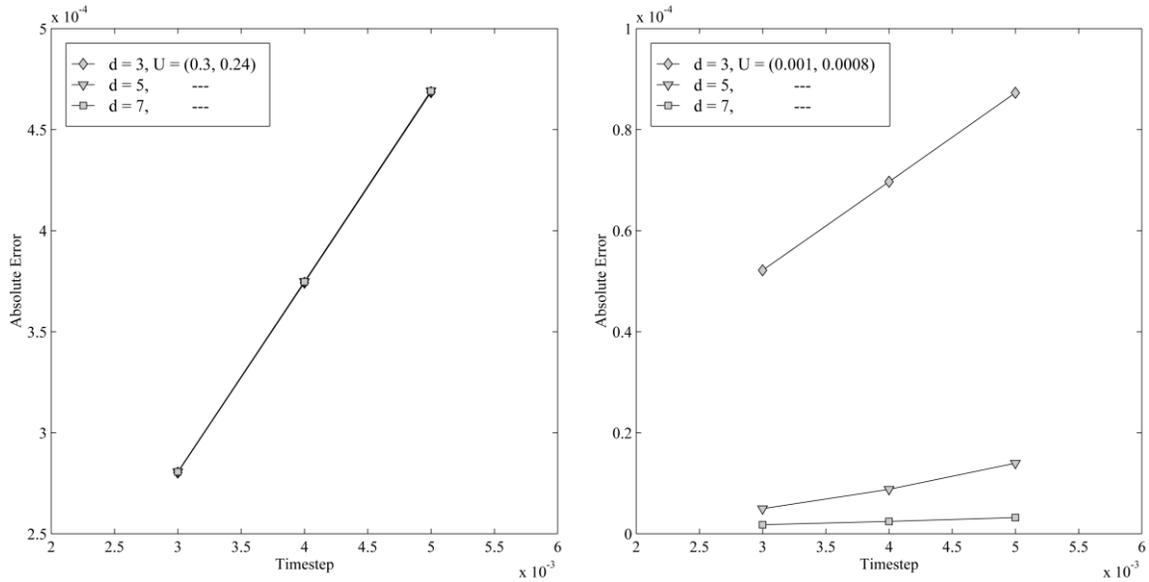


Fig. 3-17. Gráficos de la dependencia de los errores promedios $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al paso temporal $\tau^{(num)}$. $\mathbf{U} = (0.3, 0.24)$ y $\mathbf{U} = (0.001, 0.0008)$, $\mu = 0.05$.

Tabla 3.9. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie.

| μ | 0.05 | 0.01 | 0.005 | 0.001 | 0.0005 | 0.0001 |
|--------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| <i>CFA 1</i> | $3.766 \cdot 10^{-2}$ | $3.931 \cdot 10^{-2}$ | $1.765 \cdot 10^{-1}$ | $1.542 \cdot 10^{-1}$ | $1.015 \cdot 10^{-1}$ | $4.323 \cdot 10^{-2}$ |
| <i>CFA 2</i> | $1.534 \cdot 10^{-2}$ | $2.086 \cdot 10^{-2}$ | $1.001 \cdot 10^{-1}$ | $9.995 \cdot 10^{-2}$ | $9.687 \cdot 10^{-2}$ | $2.788 \cdot 10^{-2}$ |
| <i>CFA 3</i> | $1.036 \cdot 10^{-2}$ | $1.209 \cdot 10^{-2}$ | $9.992 \cdot 10^{-2}$ | $9.871 \cdot 10^{-2}$ | $7.509 \cdot 10^{-2}$ | $2.721 \cdot 10^{-2}$ |

Tabla 3.10. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie.

| $\mathbf{U} = (u, v)$ | <i>CFA 1</i> | <i>CFA 2</i> | <i>CFA 3</i> |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| (0.6, 0.48) | $9.982 \cdot 10^{-2}$ | $9.980 \cdot 10^{-2}$ | $9.980 \cdot 10^{-2}$ |
| (0.5, 0.4) | $1.002 \cdot 10^{-1}$ | $1.002 \cdot 10^{-1}$ | $1.001 \cdot 10^{-1}$ |
| (0.4, 0.32) | $8.523 \cdot 10^{-2}$ | $8.507 \cdot 10^{-2}$ | $8.507 \cdot 10^{-2}$ |
| (0.3, 0.24) | $7.098 \cdot 10^{-2}$ | $6.902 \cdot 10^{-2}$ | $6.893 \cdot 10^{-2}$ |
| (0.2, 0.16) | $5.012 \cdot 10^{-2}$ | $4.898 \cdot 10^{-2}$ | $4.842 \cdot 10^{-2}$ |
| (0.1, 0.08) | $4.754 \cdot 10^{-2}$ | $4.650 \cdot 10^{-2}$ | $4.601 \cdot 10^{-2}$ |
| (0.01, 0.008) | $3.766 \cdot 10^{-2}$ | $1.534 \cdot 10^{-2}$ | $1.036 \cdot 10^{-2}$ |
| (0.001, 0.0008) | $2.752 \cdot 10^{-2}$ | $5.064 \cdot 10^{-3}$ | $9.953 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $1.263 \cdot 10^{-2}$ | $3.876 \cdot 10^{-4}$ | $7.654 \cdot 10^{-5}$ |

Como se sigue de la figura, los errores decrecen al decrecer la cantidad $\tau^{(num)}$. Esto, junto con el hecho que los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega},d}$ repiten el comportamiento de las fuentes (o bien, que las soluciones numéricas no divergen de las “exactas”, véase la Fig. 3-12^{a,b}), confirma que las soluciones numéricas convergen a las “exactas” cuando el paso temporal tiende a cero (véase las observaciones 2.5 y 2.6).

En las tablas 3.9, 3.10 se muestran los errores que aparecen al usar el método, propuesto en [66]. Comparando estos datos con los de las tablas 3.7, 3.8, se ve que el método desarrollado en la tesis permite obtener la solución de una precisión más alta.

3.4.2 Grupo II. Valores variables de los parámetros

Este grupo de experimentos repite el anterior, y como los parámetros \mathbf{U} y μ se consideraron las funciones determinadas por las fórmulas (3.14), (3.25).

Las tablas 3.11, 3.12 resumen los resultados de estos experimentos ($\tau^{(num)} = 0.005$). Se ve que los errores son casi iguales a los que fueron obtenidos antes (véase las tablas 3.7, 3.8, respectivamente). Esto significa que las CFAs propuestas toman bien las variaciones de los parámetros \mathbf{U} y μ en el dominio de interés $\bar{\Omega}$.

Tabla 3.11. Problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie.

| κ | 0.05 | 0.01 | 0.005 | 0.001 | 0.0005 | 0.0001 | |
|----------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------|
| $d = 3$ | $8.212 \cdot 10^{-5}$ | $1.742 \cdot 10^{-4}$ | $2.075 \cdot 10^{-4}$ | $1.876 \cdot 10^{-4}$ | $1.463 \cdot 10^{-4}$ | $4.693 \cdot 10^{-5}$ | esquema “adv” |
| $d = 5$ | $1.061 \cdot 10^{-4}$ | $1.743 \cdot 10^{-4}$ | $2.075 \cdot 10^{-4}$ | $1.876 \cdot 10^{-4}$ | $1.463 \cdot 10^{-4}$ | $4.693 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 7$ | $9.701 \cdot 10^{-5}$ | $1.743 \cdot 10^{-4}$ | $2.075 \cdot 10^{-4}$ | $1.876 \cdot 10^{-4}$ | $1.463 \cdot 10^{-4}$ | $4.693 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 3$ | $8.795 \cdot 10^{-5}$ | $7.684 \cdot 10^{-5}$ | $1.122 \cdot 10^{-4}$ | $1.947 \cdot 10^{-4}$ | $2.018 \cdot 10^{-4}$ | $2.064 \cdot 10^{-4}$ | esquema “diff” |
| $d = 5$ | $2.880 \cdot 10^{-5}$ | $7.686 \cdot 10^{-5}$ | $1.122 \cdot 10^{-4}$ | $1.947 \cdot 10^{-4}$ | $2.018 \cdot 10^{-4}$ | $2.064 \cdot 10^{-4}$ | |
| $d = 7$ | $2.446 \cdot 10^{-5}$ | $7.686 \cdot 10^{-5}$ | $1.122 \cdot 10^{-4}$ | $1.947 \cdot 10^{-4}$ | $2.018 \cdot 10^{-4}$ | $2.064 \cdot 10^{-4}$ | |

Tabla 3.12. Problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie.

| $\mathbf{V} = (u, v)$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| (0.6, 0.48) | $5.034 \cdot 10^{-4}$ | $5.034 \cdot 10^{-4}$ | $5.034 \cdot 10^{-4}$ | $5.277 \cdot 10^{-4}$ | $5.278 \cdot 10^{-4}$ | $5.277 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.5, 0.4) | $5.005 \cdot 10^{-4}$ | $5.006 \cdot 10^{-4}$ | $5.006 \cdot 10^{-4}$ | $5.247 \cdot 10^{-4}$ | $5.248 \cdot 10^{-4}$ | $5.247 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.4, 0.32) | $4.835 \cdot 10^{-4}$ | $4.837 \cdot 10^{-4}$ | $4.837 \cdot 10^{-4}$ | $5.062 \cdot 10^{-4}$ | $5.065 \cdot 10^{-4}$ | $5.064 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.3, 0.24) | $4.425 \cdot 10^{-4}$ | $4.435 \cdot 10^{-4}$ | $4.434 \cdot 10^{-4}$ | $4.613 \cdot 10^{-4}$ | $4.625 \cdot 10^{-4}$ | $4.623 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.2, 0.16) | $3.636 \cdot 10^{-4}$ | $3.681 \cdot 10^{-4}$ | $3.674 \cdot 10^{-4}$ | $3.725 \cdot 10^{-4}$ | $3.775 \cdot 10^{-4}$ | $3.768 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.1, 0.08) | $2.258 \cdot 10^{-4}$ | $2.408 \cdot 10^{-4}$ | $2.382 \cdot 10^{-4}$ | $2.150 \cdot 10^{-4}$ | $2.263 \cdot 10^{-4}$ | $2.241 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.01, 0.008) | $8.212 \cdot 10^{-5}$ | $1.061 \cdot 10^{-4}$ | $9.701 \cdot 10^{-5}$ | $8.795 \cdot 10^{-5}$ | $2.880 \cdot 10^{-5}$ | $2.446 \cdot 10^{-5}$ |
| (0.001, 0.0008) | $7.957 \cdot 10^{-5}$ | $1.016 \cdot 10^{-4}$ | $9.115 \cdot 10^{-5}$ | $9.235 \cdot 10^{-5}$ | $1.464 \cdot 10^{-5}$ | $2.790 \cdot 10^{-6}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $7.962 \cdot 10^{-5}$ | $1.014 \cdot 10^{-4}$ | $9.080 \cdot 10^{-5}$ | $9.304 \cdot 10^{-5}$ | $1.449 \cdot 10^{-5}$ | $1.467 \cdot 10^{-6}$ |
| | esquema “adv” | | | esquema “diff” | | |

3.4.3 Grupo III. Ahorro de los recursos

Este grupo de experimentos fue hecho para el campo $\mathbf{U} = (0.01, 0.008) + \mathbf{U}^{\text{var}}$ y el coeficiente $\mu = 0.05 + 0.05\mu^{\text{var}}$, con el paso temporal $\tau = 0.005$. El problema se solucionó en el dominio $D_I = [-0.5, 1.5] \times [-0.5, 1.5]$ con CFAs y en los dominios con tamaños crecientes $D_{glb,i} = [-2 - 3i, 3 + 3i] \times [-2 - 3i, 3 + 3i]$, $i = 0, 1, \dots, 4$, sin CFAs. En la tabla 3.13 se presentan las relaciones entre los tiempos $T_{glb,i}$ y T_I , requisitos para hacer un paso temporal para solucionar el problema general en los dominios $D_{glb,i}$ y D_I , respectivamente. Estos datos se muestran también en la Fig. 3-18 (la primera columna de la tabla y el primer punto del gráfico corresponden a la relación T_I/T_I para D_I/D_I).

Tabla 3.13. Problema general, grupo III. Las relaciones $T_{glb,i}/T_I$.

| $D_{glb,i} / D_I$ | 1.0 | 2.5 | 5.5 | 8.5 | 11.5 | 14.5 |
|-------------------|--------|--------|--------|--------|---------|---------|
| $T_{glb,i} / T_I$ | 1.0000 | 2.3200 | 5.1600 | 9.2800 | 14.4000 | 24.9600 |

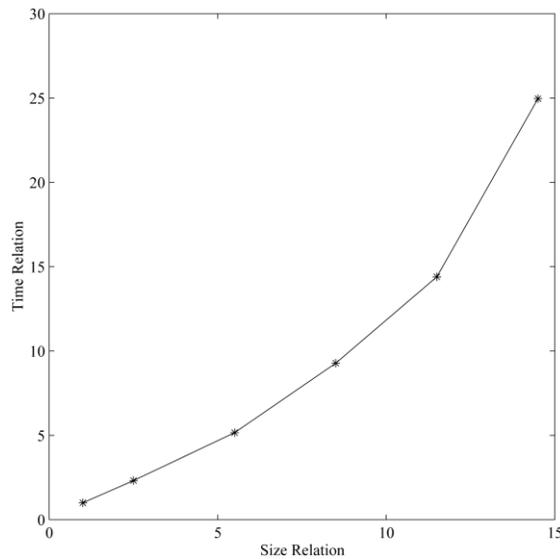


Fig. 3-18. Gráfico de la dependencia de la relación $T_{glb,i}/T_I$

con respecto a la relación $D_{glb,i}/D_I$. $\mathbf{U} = (0.01, 0.008) + \mathbf{U}^{\text{var}}$, $\mu = 0.05 + 0.05\mu^{\text{var}}$, $\tau = 0.005$.

Se puede ver que la dependencia es de un carácter cuadrático con respecto al tamaño lineal del dominio $D_{glb,i}$. Si en lugar de D_I consideramos un dominio, digamos, cien veces más

grande que D_l , esto conducirá a un tiempo de cómputo no aceptable. Este hecho justifica la importancia del enfoque de las CFAs para el problema general de advección-difusión-absorción.

3.5 Dominio convexo no cuadrado

Estos experimentos son similares a los anteriores, a excepción que como el dominio Ω se consideró el conjunto mostrado en la Fig. 3-19, y el soporte de las fuentes fue $[0.25, 0.75] \times [0.25, 0.75]$ en lugar de $[0.35, 0.85] \times [0.1, 0.6]$.

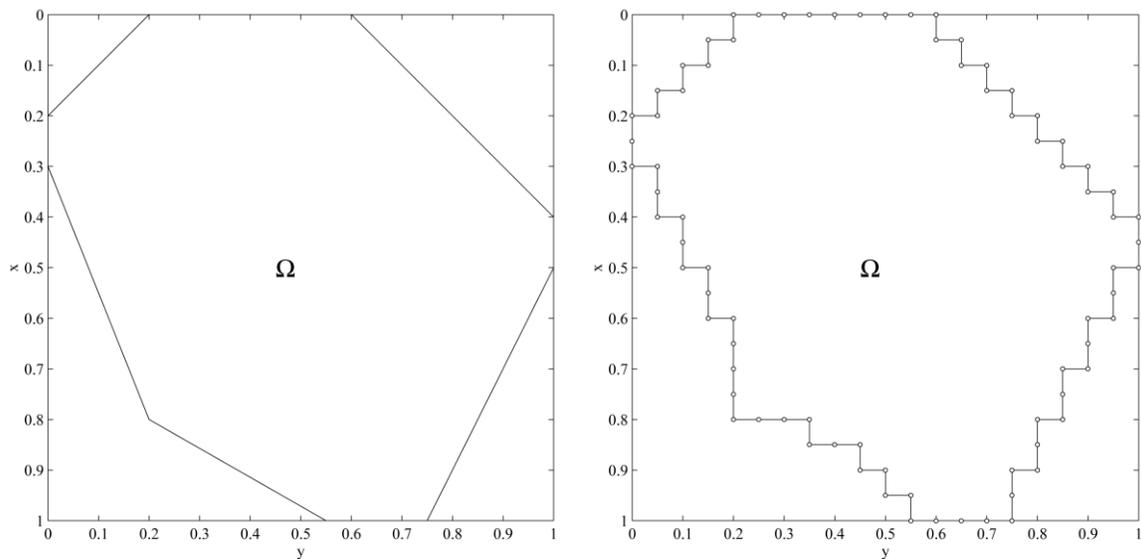


Fig. 3-19. El dominio no cuadrado Ω (las representaciones continua y discreta).

En las tablas 3.14-3.17 se presentan los resultados de estos experimentos ($\tau^{(num)} = 0.005$). De las Fig. 3-20, 3-21 se sigue que las dependencias son casi idénticas a las que se presentan en las Fig. 3-14, 3-16, respectivamente. (Cuando $d = 3$, los gráficos son un poco diferentes debido a la inexactitud de la CFA difusiva indicada.) Este hecho confirma la funcionalidad de las CFAs construidas al solucionar el problema general de advección-difusión-absorción en un dominio convexo no cuadrado.

Tabla 3.14. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie.

| μ | 0.05 | 0.01 | 0.005 | 0.001 | 0.0005 | 0.0001 | |
|---------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------|
| $d = 3$ | $4.761 \cdot 10^{-4}$ | $2.003 \cdot 10^{-4}$ | $2.126 \cdot 10^{-4}$ | $1.790 \cdot 10^{-4}$ | $1.288 \cdot 10^{-4}$ | $3.798 \cdot 10^{-5}$ | esquema “adv” |
| $d = 5$ | $1.575 \cdot 10^{-4}$ | $1.883 \cdot 10^{-4}$ | $2.103 \cdot 10^{-4}$ | $1.790 \cdot 10^{-4}$ | $1.288 \cdot 10^{-4}$ | $3.798 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 7$ | $1.115 \cdot 10^{-4}$ | $1.880 \cdot 10^{-4}$ | $2.103 \cdot 10^{-4}$ | $1.790 \cdot 10^{-4}$ | $1.288 \cdot 10^{-4}$ | $3.798 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 3$ | $5.492 \cdot 10^{-4}$ | $1.584 \cdot 10^{-4}$ | $1.310 \cdot 10^{-4}$ | $1.962 \cdot 10^{-4}$ | $2.073 \cdot 10^{-4}$ | $2.092 \cdot 10^{-4}$ | esquema “diff” |
| $d = 5$ | $6.522 \cdot 10^{-5}$ | $8.837 \cdot 10^{-5}$ | $1.248 \cdot 10^{-4}$ | $1.962 \cdot 10^{-4}$ | $2.073 \cdot 10^{-4}$ | $2.092 \cdot 10^{-4}$ | |
| $d = 7$ | $2.925 \cdot 10^{-5}$ | $8.833 \cdot 10^{-5}$ | $1.248 \cdot 10^{-4}$ | $1.962 \cdot 10^{-4}$ | $2.073 \cdot 10^{-4}$ | $2.092 \cdot 10^{-4}$ | |

Tabla 3.15. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie.

| $\mathbf{U} = (u, v)$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| (0.6, 0.48) | $5.269 \cdot 10^{-4}$ | $5.011 \cdot 10^{-4}$ | $5.027 \cdot 10^{-4}$ | $5.480 \cdot 10^{-4}$ | $5.309 \cdot 10^{-4}$ | $5.328 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.5, 0.4) | $5.849 \cdot 10^{-4}$ | $5.102 \cdot 10^{-4}$ | $5.128 \cdot 10^{-4}$ | $6.025 \cdot 10^{-4}$ | $5.421 \cdot 10^{-4}$ | $5.453 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.4, 0.32) | $7.089 \cdot 10^{-4}$ | $5.075 \cdot 10^{-4}$ | $5.116 \cdot 10^{-4}$ | $7.200 \cdot 10^{-4}$ | $5.406 \cdot 10^{-4}$ | $5.457 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.3, 0.24) | $9.773 \cdot 10^{-4}$ | $4.815 \cdot 10^{-4}$ | $4.862 \cdot 10^{-4}$ | $9.824 \cdot 10^{-4}$ | $5.128 \cdot 10^{-4}$ | $5.190 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.2, 0.16) | $1.465 \cdot 10^{-3}$ | $4.185 \cdot 10^{-4}$ | $4.153 \cdot 10^{-4}$ | $1.475 \cdot 10^{-3}$ | $4.414 \cdot 10^{-4}$ | $4.385 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.1, 0.08) | $1.858 \cdot 10^{-3}$ | $2.983 \cdot 10^{-4}$ | $2.733 \cdot 10^{-4}$ | $1.895 \cdot 10^{-3}$ | $3.032 \cdot 10^{-4}$ | $2.680 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.01, 0.008) | $4.761 \cdot 10^{-4}$ | $1.575 \cdot 10^{-4}$ | $1.115 \cdot 10^{-4}$ | $5.492 \cdot 10^{-4}$ | $6.522 \cdot 10^{-5}$ | $2.925 \cdot 10^{-5}$ |
| (0.001, 0.0008) | $4.052 \cdot 10^{-4}$ | $1.556 \cdot 10^{-4}$ | $1.015 \cdot 10^{-4}$ | $4.799 \cdot 10^{-4}$ | $6.004 \cdot 10^{-5}$ | $5.725 \cdot 10^{-6}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $4.097 \cdot 10^{-4}$ | $1.559 \cdot 10^{-4}$ | $1.007 \cdot 10^{-4}$ | $4.842 \cdot 10^{-4}$ | $6.069 \cdot 10^{-5}$ | $5.485 \cdot 10^{-6}$ |
| | esquema "adv" | | | esquema "diff" | | |

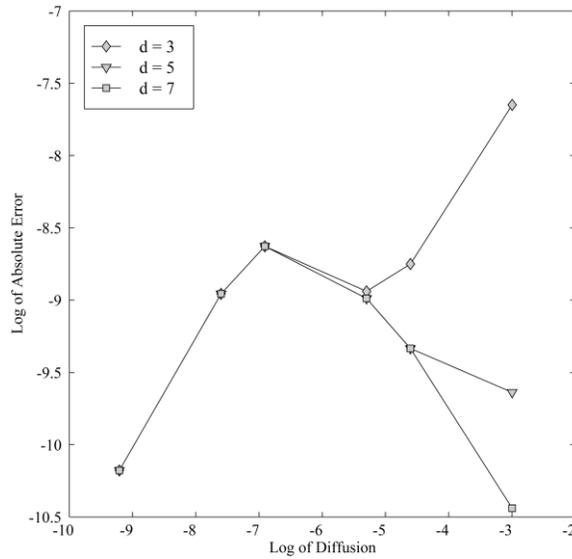


Fig. 3-20. Gráficos de la dependencia de los errores promedio mínimos $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al coeficiente de difusión μ para $d = 3, 5, 7$. $\mathbf{U} = (0.01, 0.008)$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

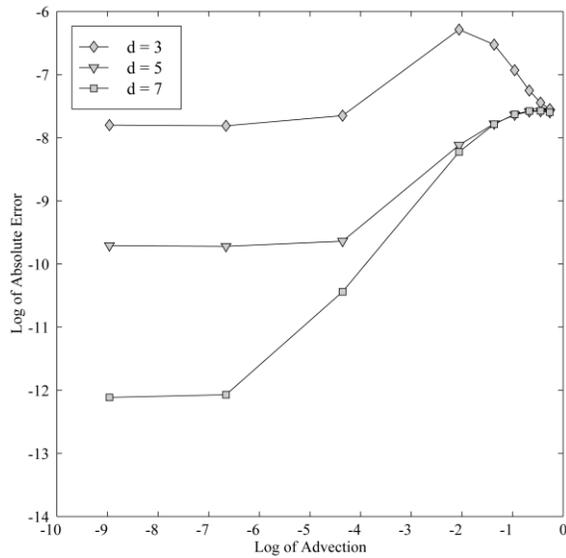


Fig. 3-21. Gráficos de la dependencia de los errores promedio mínimos $\mathcal{E}_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al módulo del campo de velocidades \mathbf{U} para $d = 3, 5, 7$. $\mu = 0.05$, $\tau^{(num)} = 0.005$.

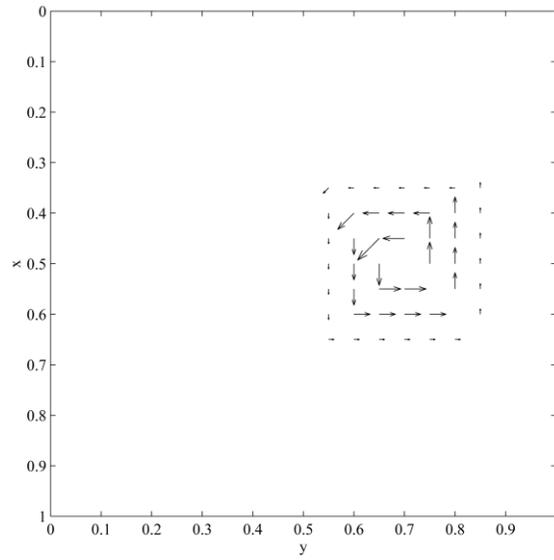


Fig. 3-22. Retrato del campo de velocidades \mathbf{U}^{var} en el dominio $\bar{\Omega}$.

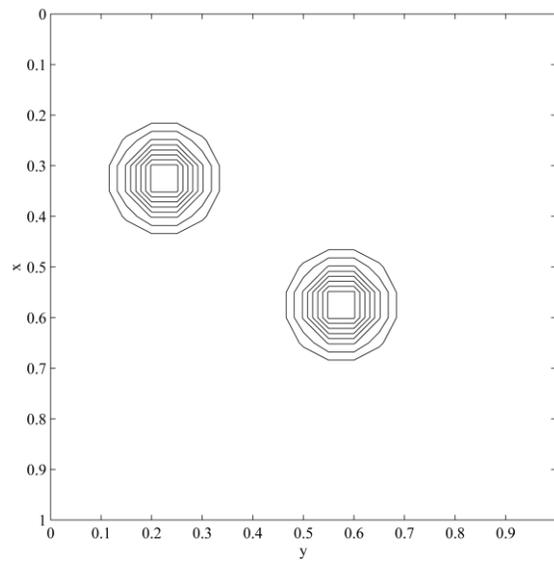


Fig. 3-23. Retrato de la función μ^{var} en el dominio $\bar{\Omega}$.

Tabla 3.16. Problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie.

| κ | 0.05 | 0.01 | 0.005 | 0.001 | 0.0005 | 0.0001 | |
|----------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------|
| $d = 3$ | $4.754 \cdot 10^{-4}$ | $1.953 \cdot 10^{-4}$ | $2.081 \cdot 10^{-4}$ | $1.835 \cdot 10^{-4}$ | $1.365 \cdot 10^{-4}$ | $4.326 \cdot 10^{-5}$ | esquema “adv” |
| $d = 5$ | $1.557 \cdot 10^{-4}$ | $1.834 \cdot 10^{-4}$ | $2.058 \cdot 10^{-4}$ | $1.835 \cdot 10^{-4}$ | $1.365 \cdot 10^{-4}$ | $4.326 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 7$ | $1.090 \cdot 10^{-4}$ | $1.831 \cdot 10^{-4}$ | $2.058 \cdot 10^{-4}$ | $1.835 \cdot 10^{-4}$ | $1.365 \cdot 10^{-4}$ | $4.326 \cdot 10^{-5}$ | |
| $d = 3$ | $5.485 \cdot 10^{-4}$ | $1.575 \cdot 10^{-4}$ | $1.289 \cdot 10^{-4}$ | $1.960 \cdot 10^{-4}$ | $2.087 \cdot 10^{-4}$ | $2.121 \cdot 10^{-4}$ | esquema “diff” |
| $d = 5$ | $6.490 \cdot 10^{-5}$ | $8.618 \cdot 10^{-5}$ | $1.225 \cdot 10^{-4}$ | $1.960 \cdot 10^{-4}$ | $2.087 \cdot 10^{-4}$ | $2.121 \cdot 10^{-4}$ | |
| $d = 7$ | $2.833 \cdot 10^{-5}$ | $8.613 \cdot 10^{-5}$ | $1.225 \cdot 10^{-4}$ | $1.960 \cdot 10^{-4}$ | $2.087 \cdot 10^{-4}$ | $2.121 \cdot 10^{-4}$ | |

Tabla 3.17. Problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie.

| $\mathbf{V} = (u, v)$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ | $d = 3$ | $d = 5$ | $d = 7$ |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| (0.6, 0.48) | $5.117 \cdot 10^{-4}$ | $4.862 \cdot 10^{-4}$ | $4.879 \cdot 10^{-4}$ | $5.620 \cdot 10^{-4}$ | $5.444 \cdot 10^{-4}$ | $5.462 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.5, 0.4) | $5.676 \cdot 10^{-4}$ | $4.929 \cdot 10^{-4}$ | $4.957 \cdot 10^{-4}$ | $6.125 \cdot 10^{-4}$ | $5.530 \cdot 10^{-4}$ | $5.560 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.4, 0.32) | $6.902 \cdot 10^{-4}$ | $4.878 \cdot 10^{-4}$ | $4.924 \cdot 10^{-4}$ | $7.232 \cdot 10^{-4}$ | $5.474 \cdot 10^{-4}$ | $5.524 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.3, 0.24) | $9.583 \cdot 10^{-4}$ | $4.603 \cdot 10^{-4}$ | $4.660 \cdot 10^{-4}$ | $9.769 \cdot 10^{-4}$ | $5.140 \cdot 10^{-4}$ | $5.204 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.2, 0.16) | $1.444 \cdot 10^{-3}$ | $3.987 \cdot 10^{-4}$ | $3.968 \cdot 10^{-4}$ | $1.460 \cdot 10^{-3}$ | $4.366 \cdot 10^{-4}$ | $4.345 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.1, 0.08) | $1.836 \cdot 10^{-3}$ | $2.863 \cdot 10^{-4}$ | $2.618 \cdot 10^{-4}$ | $1.874 \cdot 10^{-3}$ | $2.965 \cdot 10^{-4}$ | $2.620 \cdot 10^{-4}$ |
| (0.01, 0.008) | $4.754 \cdot 10^{-4}$ | $1.557 \cdot 10^{-4}$ | $1.090 \cdot 10^{-4}$ | $5.485 \cdot 10^{-4}$ | $6.490 \cdot 10^{-5}$ | $2.833 \cdot 10^{-5}$ |
| (0.001, 0.0008) | $4.068 \cdot 10^{-4}$ | $1.541 \cdot 10^{-4}$ | $9.949 \cdot 10^{-5}$ | $4.811 \cdot 10^{-4}$ | $6.022 \cdot 10^{-5}$ | $5.691 \cdot 10^{-6}$ |
| (0.0001, 0.00008) | $4.113 \cdot 10^{-4}$ | $1.544 \cdot 10^{-4}$ | $9.868 \cdot 10^{-5}$ | $4.855 \cdot 10^{-4}$ | $6.089 \cdot 10^{-5}$ | $5.502 \cdot 10^{-6}$ |
| | esquema "adv" | | | esquema "diff" | | |

3.6 Experimentos con datos reales

En esta sección se presentan resultados de los experimentos numéricos para el problema general de advección-difusión-absorción⁵, considerado con valores reales de los parámetros U , μ y σ . Se modeló el proceso de propagación de una sustancia contaminante en la atmósfera de la Ciudad de México (véase la Fig. 3-24).

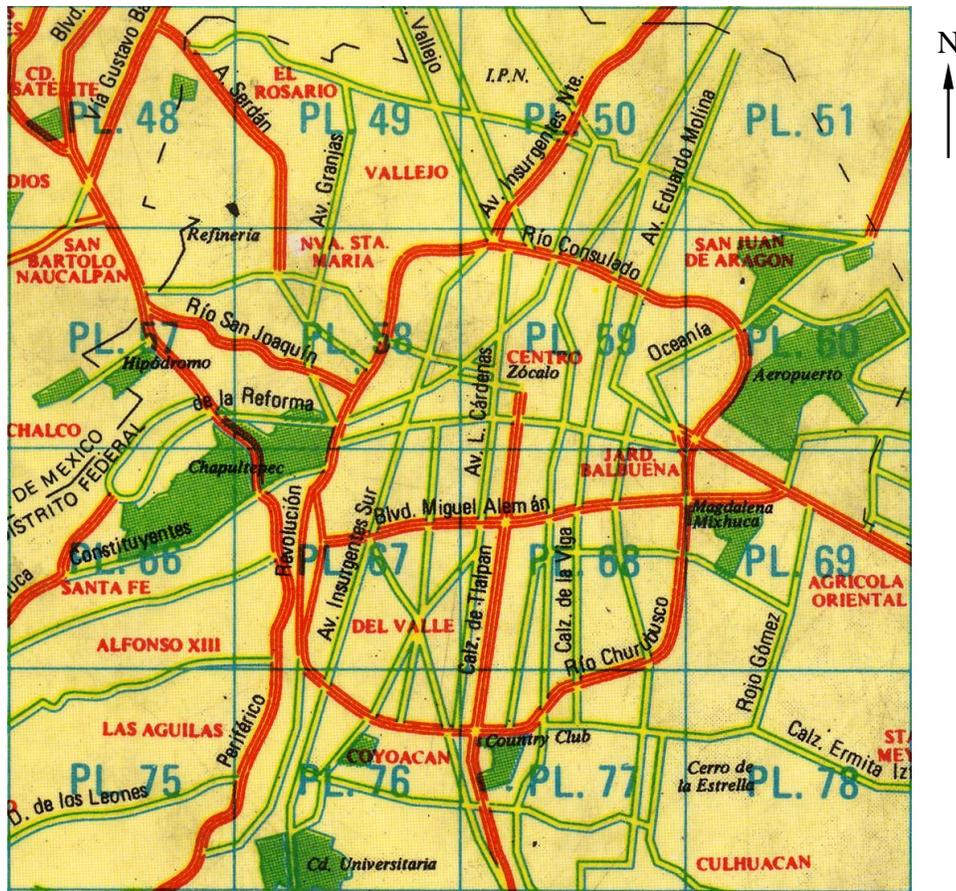


Fig. 3-24. El mapa de la Ciudad de México con calles principales.

Se conoce que las principales fuentes contaminantes del aire en ciudades grandes son el tráfico y las empresas industriales. Debido a la ausencia de los datos sobre las empresas contaminantes en la Ciudad de México, como fuentes se consideró el tráfico en las calles principales⁶.

⁵ Se verificó la menor condición de frontera difusiva $d = 3$.

⁶ Hay que notar que ya que la ecuación de advección-difusión-absorción es lineal, debido al principio de superposición las empresas se pueden tener en cuenta por separado del tráfico.

Para el campo de velocidades se emplearon los datos de observación, obtenidos de los archivos de la RAMA (Red Automática de Monitoreo Atmosférico) del Gobierno del D.F. Se modeló la situación del día 1 de Enero del 1996. De acuerdo con los datos de la RAMA, la velocidad promedio del viento fue entre 1.6 m/s (por la noche, entre las 0 y 8 horas, y entre las 20 y 24 horas) y 2.7 m/s (por la tarde, entre las 8 y 20 horas), con la dirección $\approx 170^\circ$. En el oeste de la ciudad se observó una circulación (véase la Fig. 3-25) (comp. con [16, 104, 105]).

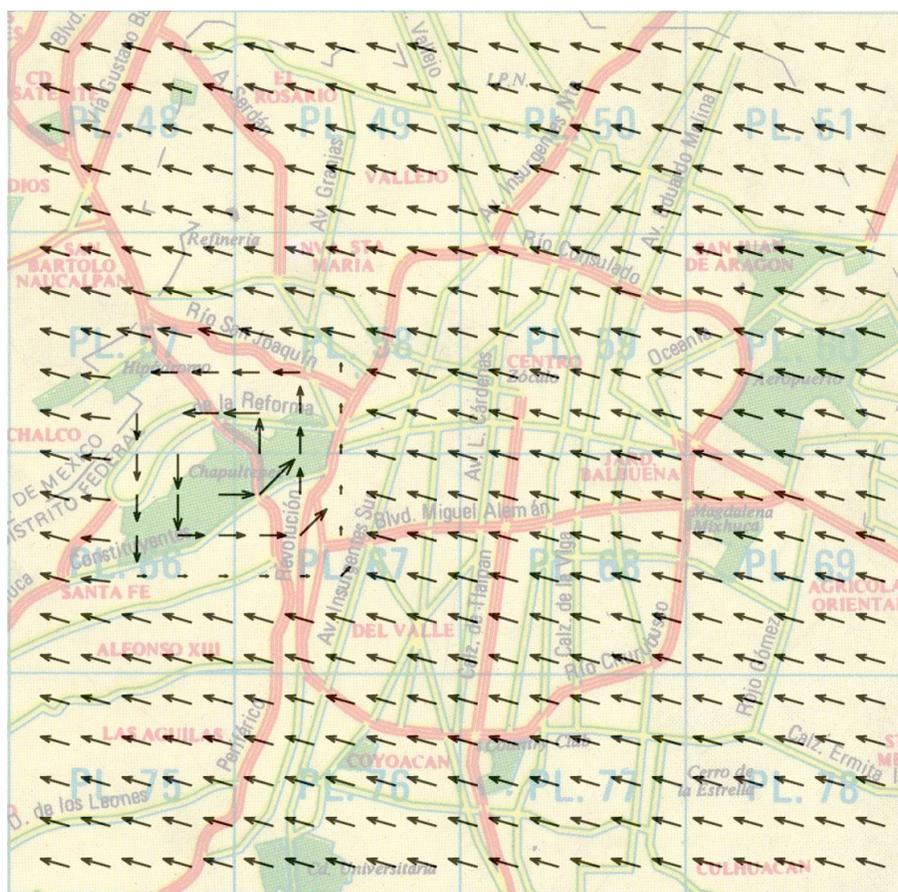


Fig. 3-25. El retrato del campo de velocidades sobre el mapa de la ciudad.

La difusión fue $0.1 \text{ m}^2/\text{s}$. La absorción en las zonas “verdes” (Chapultepec, Bosque de Aragón y la Cd. Universitaria, véase la Fig. 3-24) fue 0.9 s^{-1} , en las demás -0.3 s^{-1} . Como las fuentes de contaminación se consideró sólo el tráfico en las calles principales Av. Insurgentes, Paseo de la Reforma, Eje Central, Circuito Interior y Av. Aquiles Serdán – los datos promedios fueron obtenidos de los archivos de la RAMA; ellos se presentan en la tabla 3.18. Aparte del tráfico, se tuvo en cuenta el aeropuerto Juárez Internacional.

Tabla 3.18. La distribución de las fuentes (% con respecto al máximo).

| Tiempo (h) | Insurgentes | Reforma | Eje Central | C. Interior | Serdán |
|------------|-------------|---------|-------------|-------------|--------|
| 0-6 | 0.1198 | 0.0993 | 0.1214 | 0.1480 | 0.0281 |
| 6-10 | 0.7929 | 0.7259 | 0.6400 | 0.6737 | 0.3743 |
| 10-18 | 0.9266 | 1.0000 | 0.7379 | 0.7798 | 0.3715 |
| 18-22 | 0.7923 | 0.9168 | 0.6409 | 0.6027 | 0.3486 |
| 22-24 | 0.3443 | 0.4256 | 0.2865 | 0.3125 | 0.1574 |

En las Fig. 3-26^{a-d} se muestra el proceso de propagación de la sustancia para cuatro momentos de tiempo $t = 2, 8, 14$ y 20 horas. Las horas $t = 8$ y 20 corresponden a los saltos del tráfico en la ciudad, las horas $t = 2$ y 14 son tiempo del tráfico estable por la noche y por la tarde, respectivamente.

En la Fig. 3-27 se presentan los datos de observación promedios para la contaminación en el día 1 de Enero del año 1996.

Las Fig. 3-28^{a-d} corresponden al proceso de propagación de la sustancia cuando el proceso de difusión es dominante.

En las Fig. 3-29, 3-30 se presentan gráficos de variación de los errores entre las soluciones numérica y “exacta” en tiempo para los casos de predominio de advección y difusión, respectivamente. Es fácil verificar que el comportamiento de los errores repite el comportamiento de las fuentes en tiempo. Con esto, los saltos de los errores en los momentos de tiempo $t = 8$ y 20 horas corresponden al cambio del parámetro de advección.

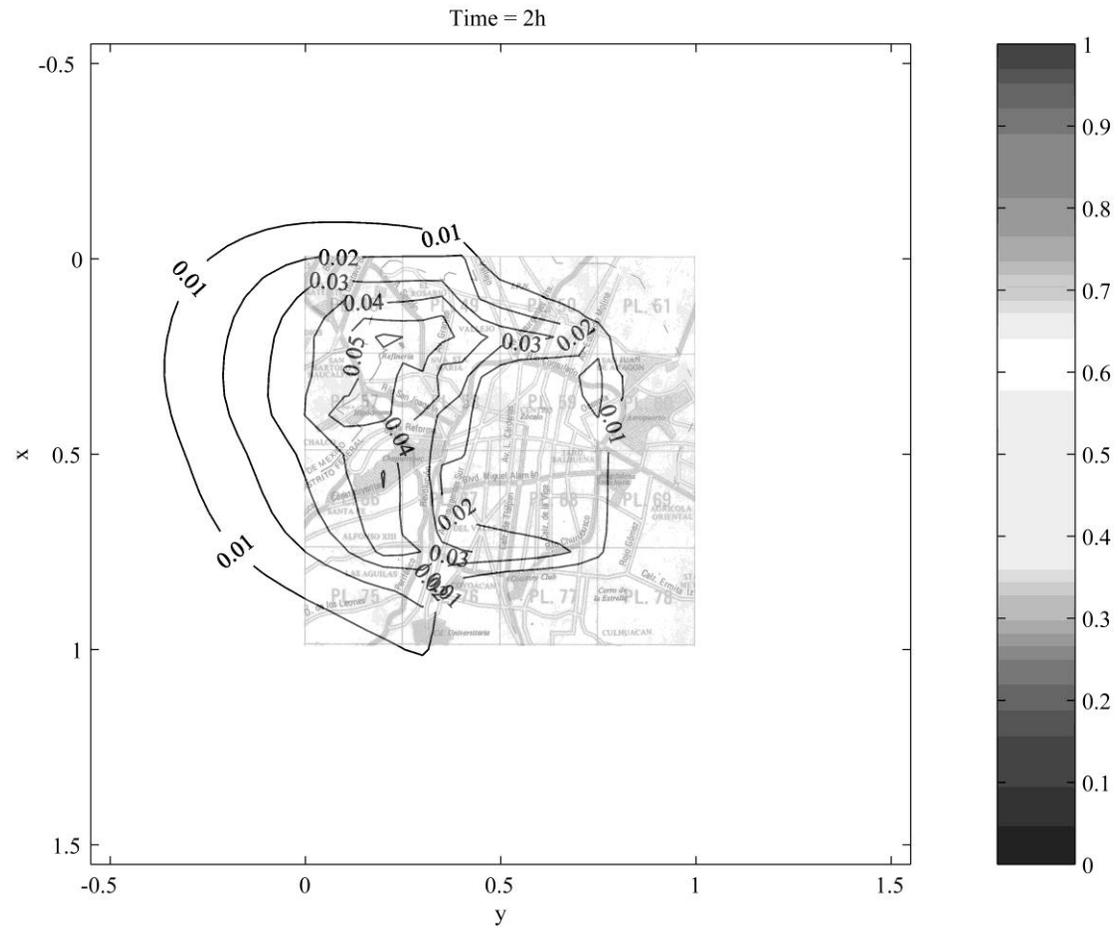


Fig. 3-26^a. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la advección, $t = 2$ horas.

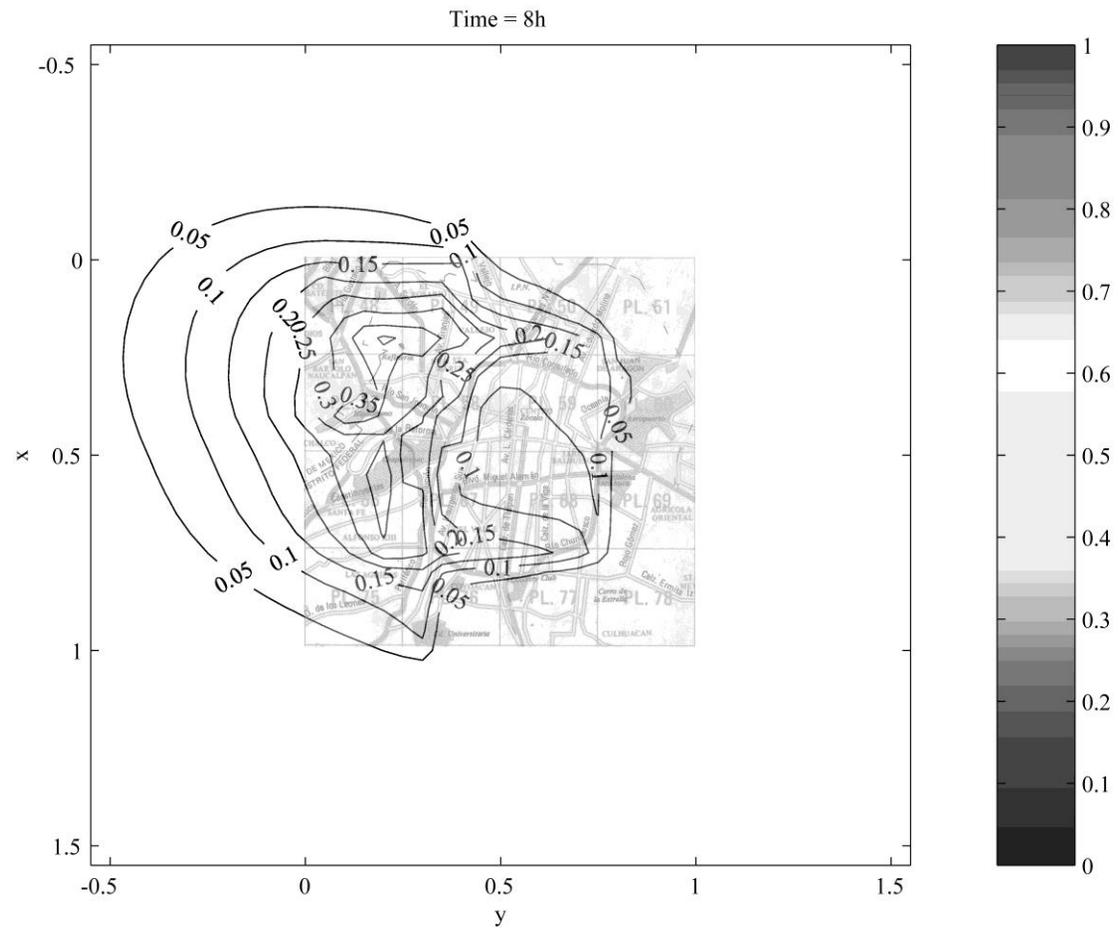


Fig. 3-26^b. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la advección, $t = 8$ horas.

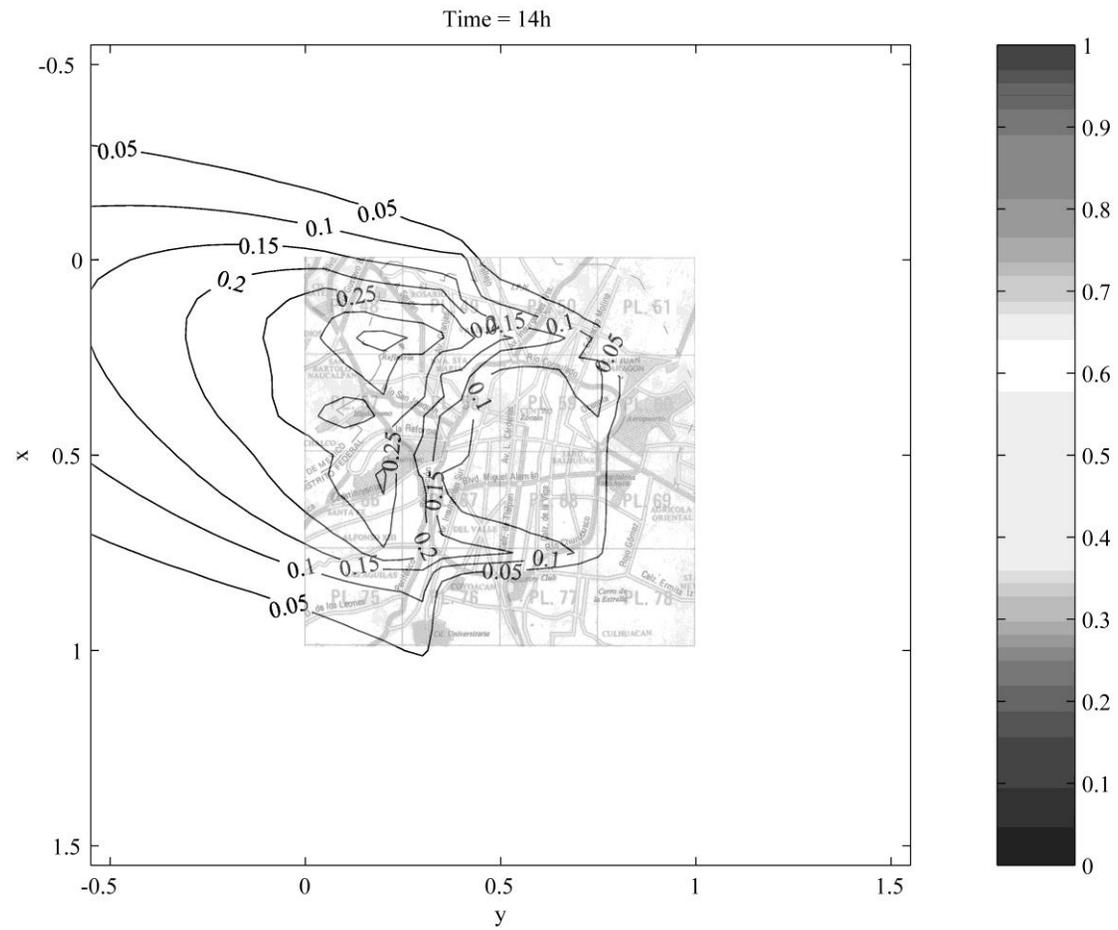


Fig. 3-26^c. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la advección, $t = 14$ horas.

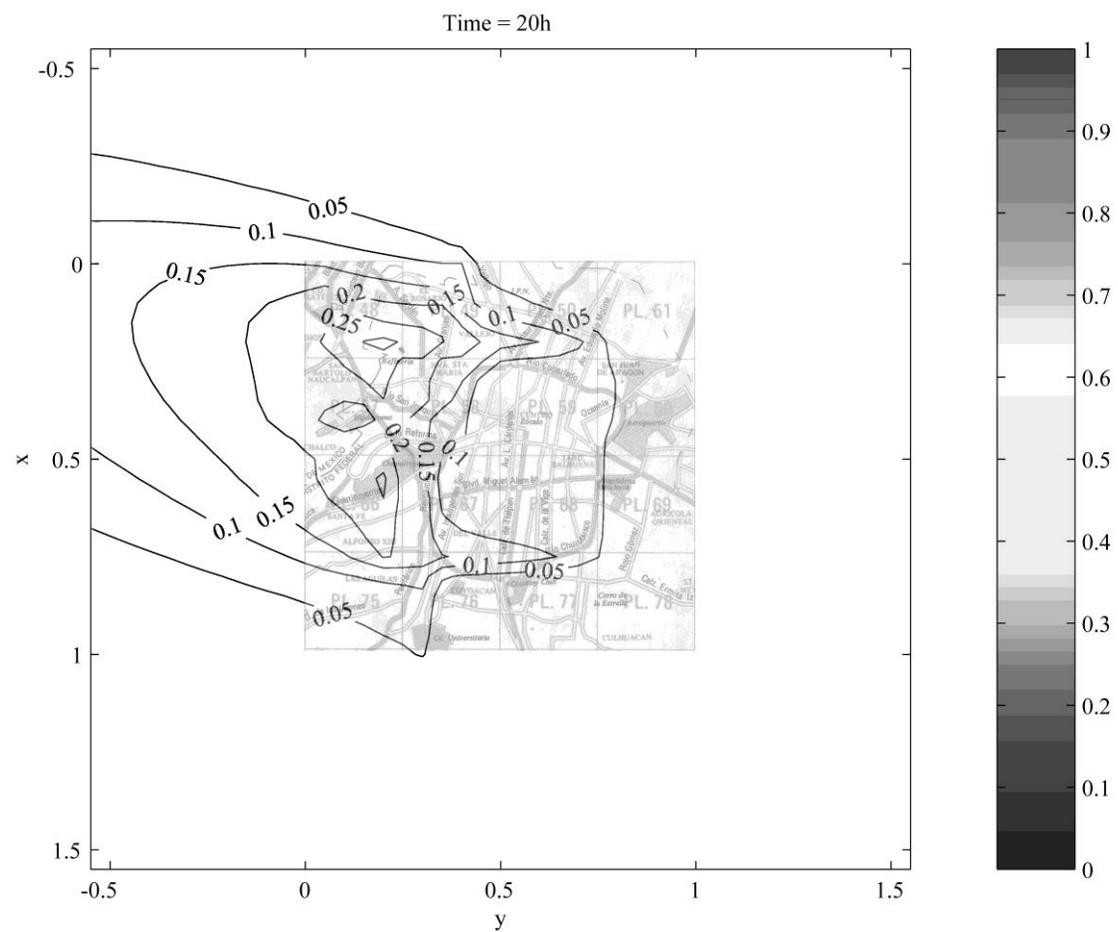


Fig. 3-26^d. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la advección, $t = 20$ horas.

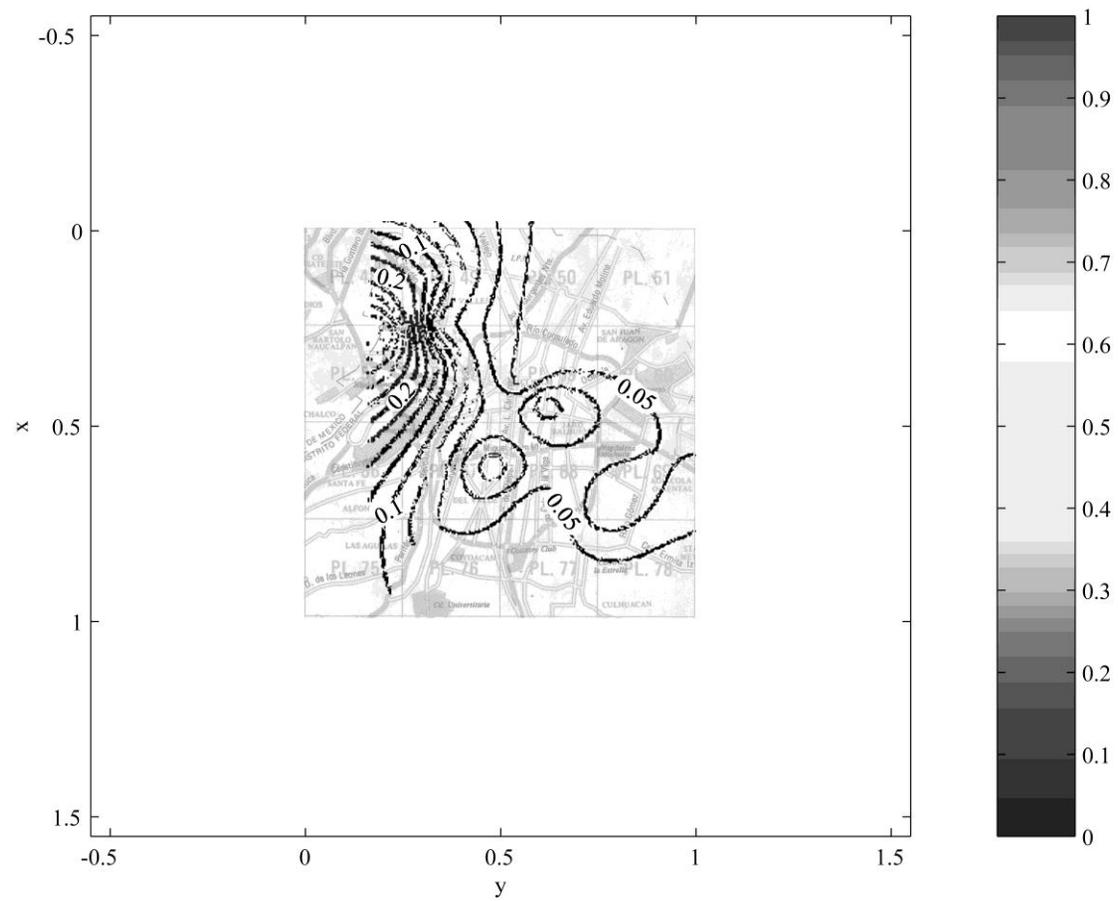


Fig. 3-27. El proceso de propagación de la sustancia. Los datos de observación.

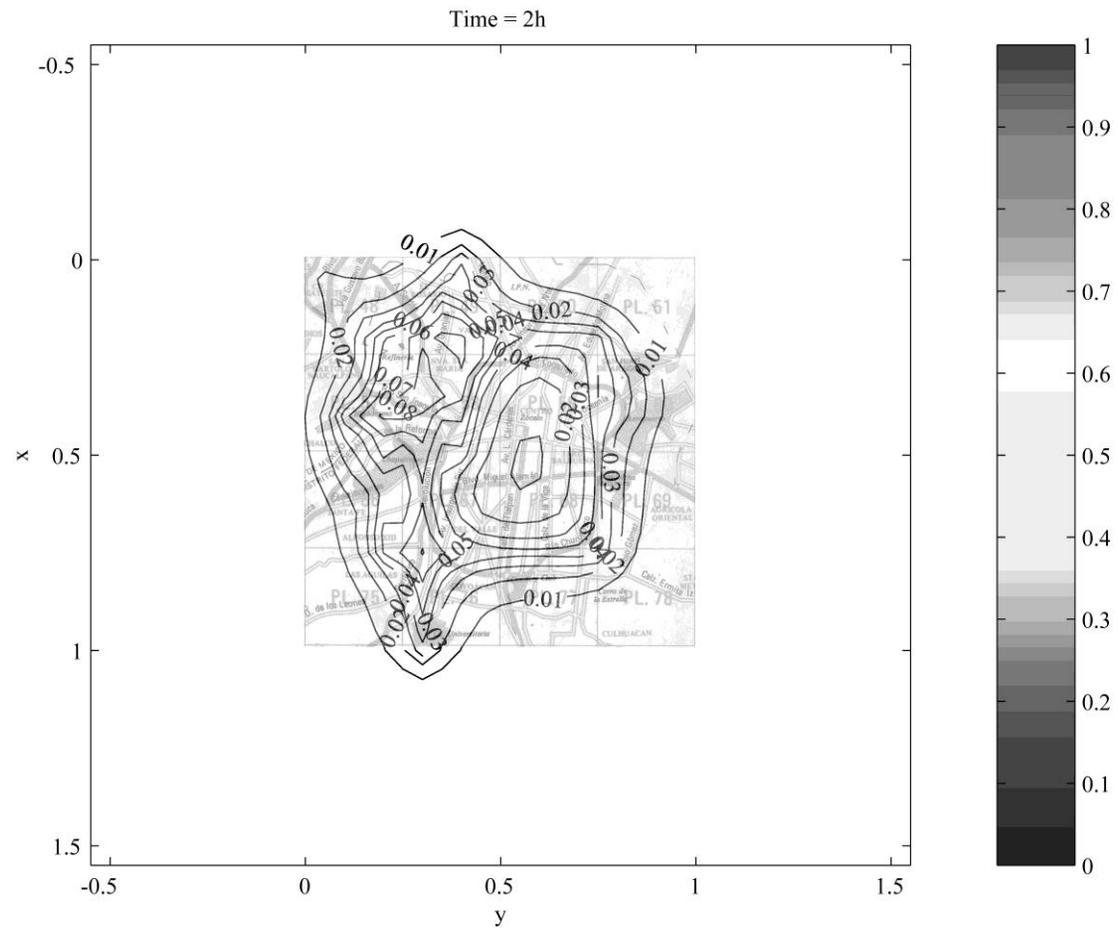


Fig. 3-28^a. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la difusión, $t = 2$ horas.

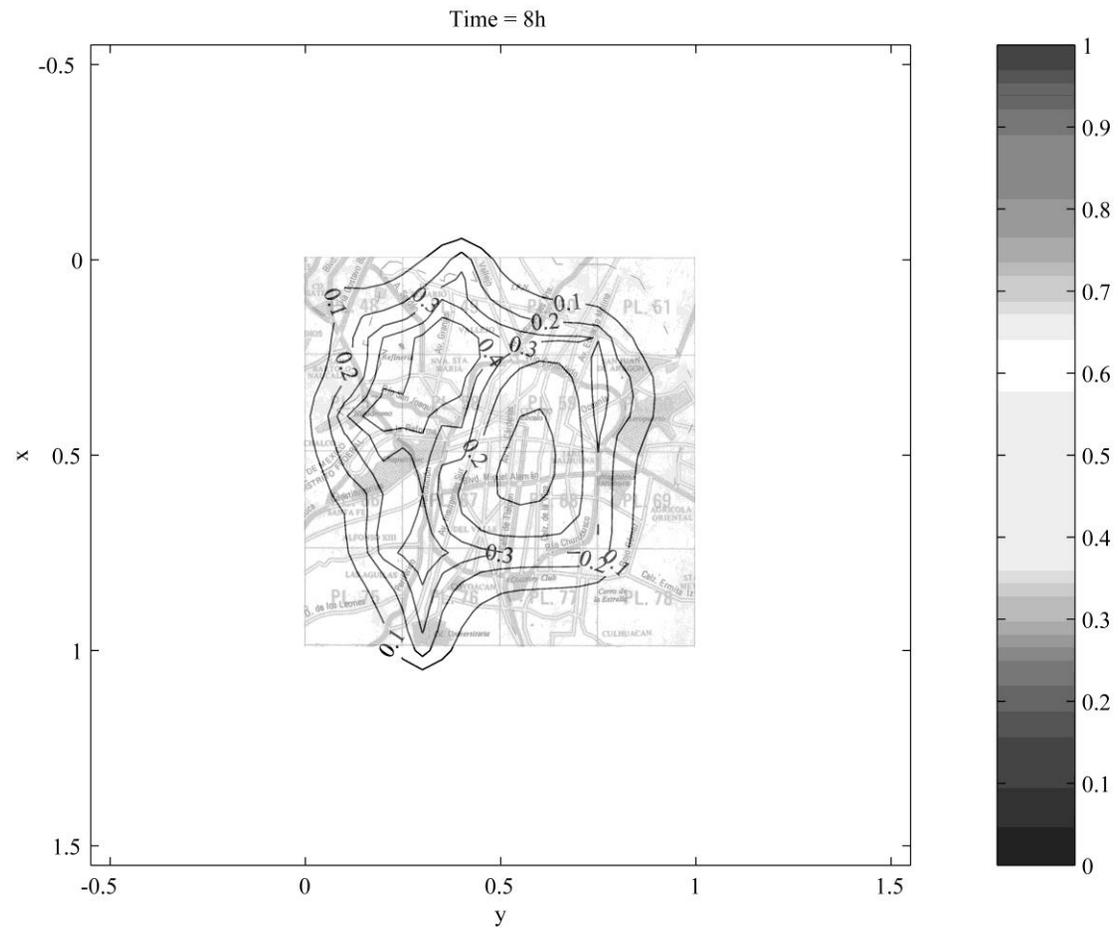


Fig. 3-28^b. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la difusión, $t = 8$ horas.

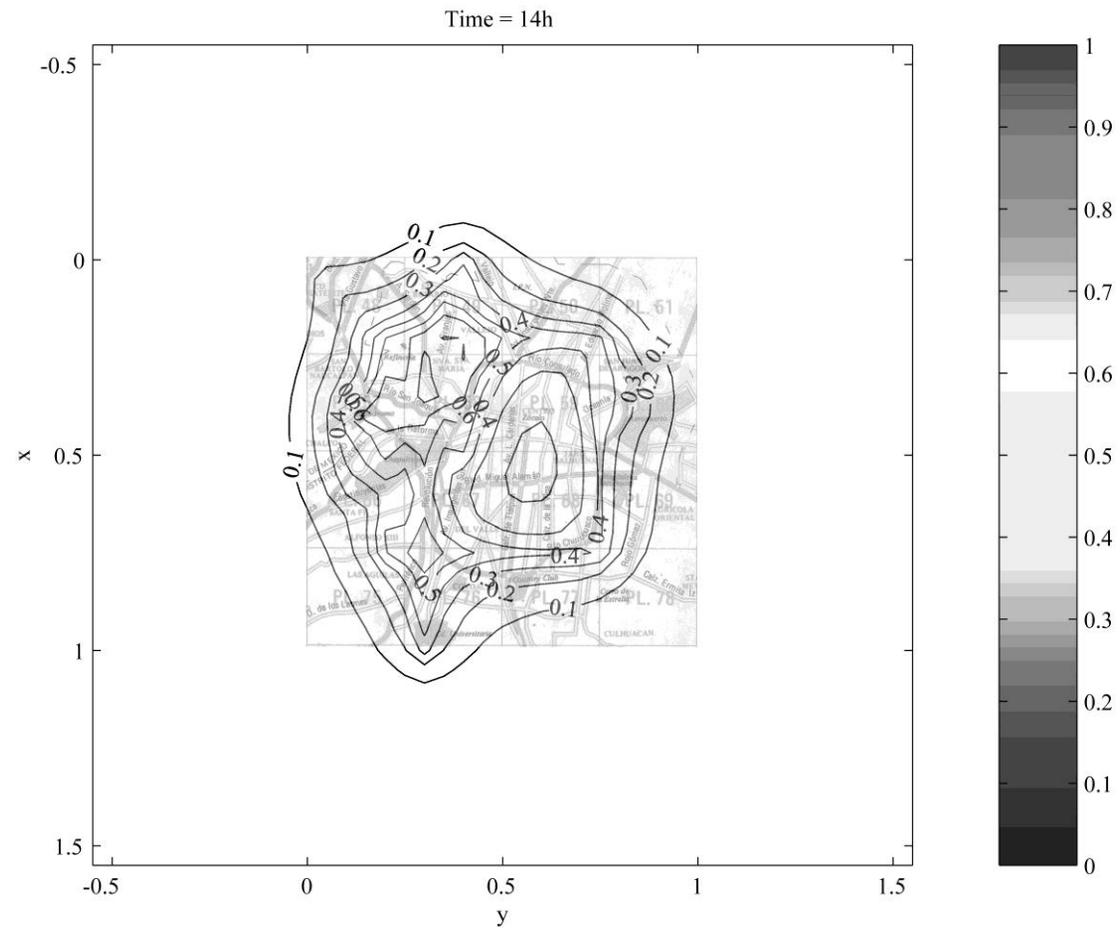


Fig. 3-28^c. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la difusión, $t = 14$ horas.

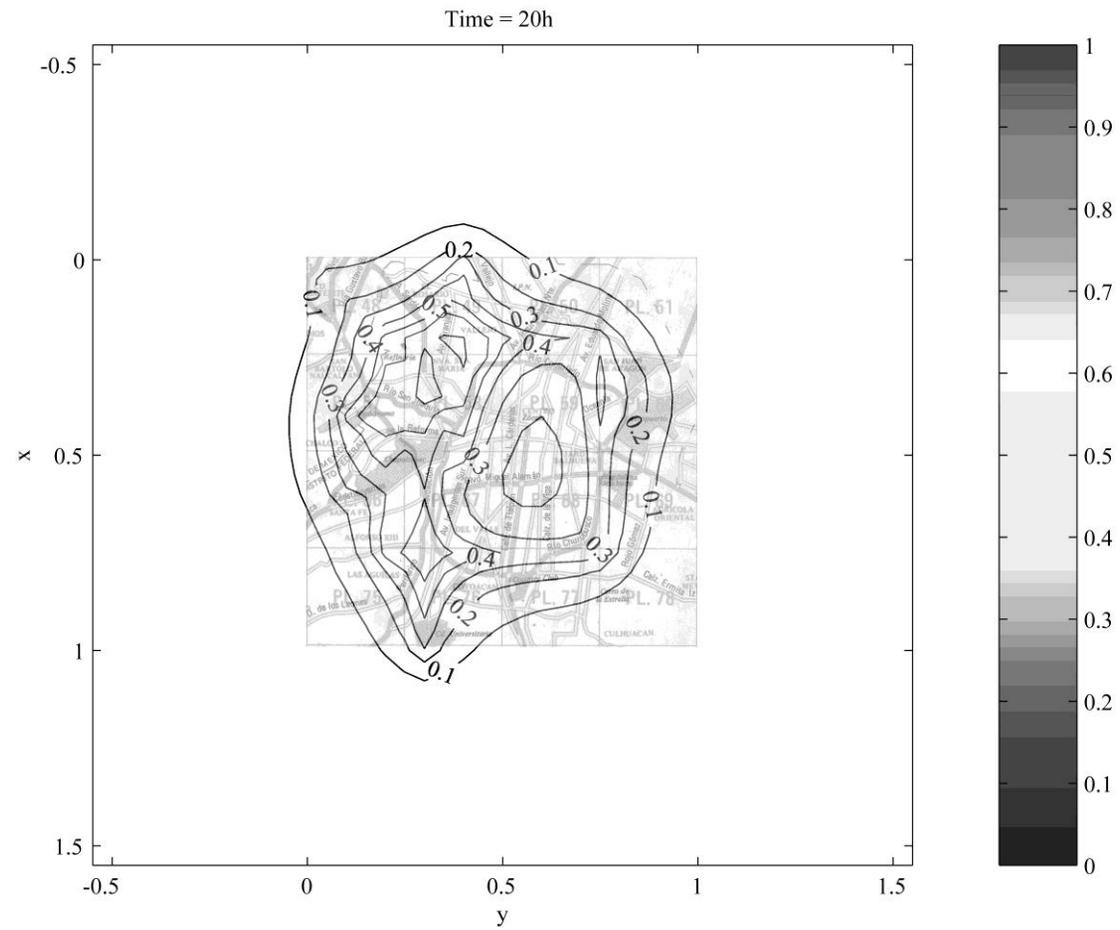


Fig. 3-28^d. El proceso de propagación de la sustancia. Predominio de la difusión, $t = 20$ horas.

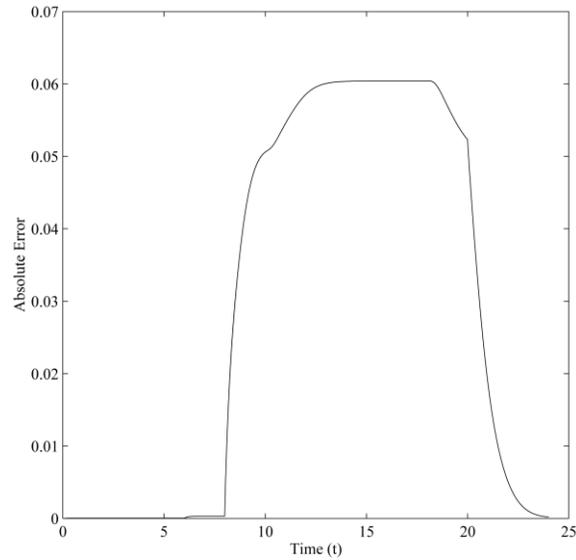


Fig. 3-29. Gráfico de la variación del error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ en tiempo. Predominio de la advección.

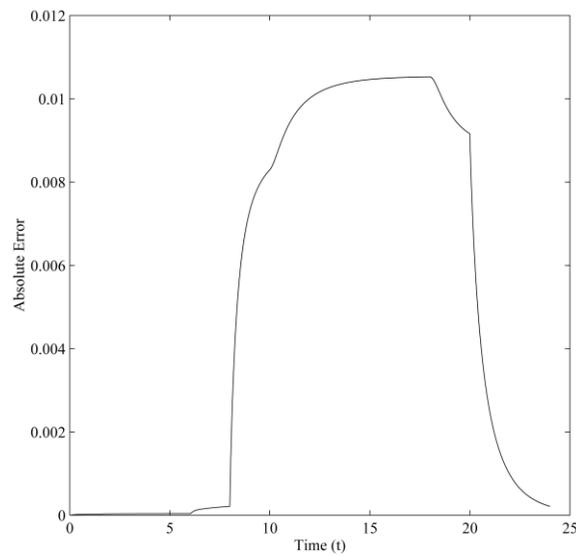


Fig. 3-30. Gráfico de la variación del error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ en tiempo. Predominio de la difusión.

Basándonos en los datos de modelación podemos hacer las siguientes conclusiones:

1. Se puede ver que en el caso de predominio de viento (la Fig. 3-26) la sustancia se propaga aproximadamente al oeste. Cualitativamente estos resultados coinciden con los datos de observación (la Fig. 3-27). Esto significa que la contribución del tráfico es dominante en comparación con las empresas industriales, que es en consonancia con la

situación en algunas otras megalópolis, en particular, en Santiago de Chili (la contribución del tráfico es 85-90 %) y Moscú (80-85 %).

2. Comparando los niveles de contaminación, presentados en las Fig. 3-26 y Fig. 3-28, se ve que debido al predominio de viento la sustancia contaminante se transporta de la ciudad. Sin embargo, si durante un periodo largo el proceso de difusión es dominante, entonces aparecen dos fuertes máximos: el primero está dentro del circuito interior, y el segundo está en el sector Nva. Sta. Maria (véase la Fig. 3-24, PL58). En este caso la situación ecológica puede llegar a ser dramática para la salud de la gente.
3. Usando el enfoque de condiciones de frontera artificiales, se puede esencialmente reducir el tiempo de cómputo, que permite:
 - modelar varias distribuciones del tráfico en la ciudad en modo de tiempo real (una herramienta para especialistas en la urbanística);
 - solucionar problemas inversos con respecto a los parámetros del modelo en modo de tiempo real (una herramienta para los físicos).

3.7 Conclusión del tercer capítulo

En el capítulo se presentaron los resultados de los experimentos numéricos para confirmar la funcionalidad del método de construcción de condiciones de frontera artificiales, propuesto en el trabajo. Todo lo antedicho permite hacer las siguientes conclusiones:

- 1) En el marco del problema puro de advección el uso de la condición de frontera (2.35)
 - conduce a la solución exacta;
 - toma bien las variaciones del campo de velocidades en el dominio de interés $\bar{\Omega}$.
- 2) En el marco del problema puro de difusión el uso de las condiciones de frontera (2.95)
 - requiere una extrapolación de la función más allá de la frontera artificial; la extrapolación exponencial permite obtener las soluciones con una precisión tolerable cuando el tiempo de modelación es pequeño;
 - toma bien las variaciones del coeficiente de difusión en el dominio de interés $\bar{\Omega}$.
- 3) En el marco del problema general de advección-difusión-absorción el uso de las condiciones de frontera (2.35), (2.95)

- conduce a la solución de una alta precisión;
- toma bien las variaciones de los parámetros de la ecuación en el dominio de interés $\bar{\Omega}$.

La solución consecutiva del problema escindido converge a la solución del problema original cuando el paso temporal tiende a cero.

- 4) En todos los problemas el uso del enfoque de las CFAs permite esencialmente reducir el tiempo de cómputo.

Conclusión

En la tesis ha sido presentado un método de construcción de condiciones de frontera artificiales locales para la solución numérica de la ecuación bidimensional de advección-difusión-absorción.

Novedad científica

- 1) El uso de la técnica de escisión por procesos físicos permite tener en cuenta las características específicas de los procesos de advección, difusión y absorción y considerar el problema de construcción de las CFAs para cada una de las ecuaciones separadamente.
- 2) El uso de la técnica de descomposición de dominio permite obtener las CFAs representables en una forma diferencial (o bien, local), tanto por tiempo como por espacio, es decir, aptas para los cálculos numéricos.
- 3) El uso del método de escisión por coordenadas permite obtener las CFAs aplicables para un dominio convexo con una frontera artificial suave a trozos.

Importancia práctica

- 1) El método presentado puede ser usado para dar solución a los problemas prácticos de transporte de masa, en particular, los problemas de la contaminación del aire en grandes ciudades industriales [16, 84, 86, 89, 93, 104, 105, 107, 122], especialmente la modelación del flujo de fluidos y gases en medios complejos [16, 21, 106], etc.
- 2) El uso del enfoque de las CFAs permite esencialmente reducir el tiempo de cómputo, que es necesario para resolver los problemas inversos en el modo de diálogo [4, 124].

Comentarios de conclusión

- 1) La propiedad de convexidad del dominio de interés es una ventaja del método propuesto en comparación con varios otros métodos, presentados en la literatura. Sin embargo, es conocido que al solucionar muchos problemas prácticos aparece la

necesidad de considerar dominios de una forma más complicada. En estos casos, para poder emplear el método propuesto, el dominio de interés se rodea por un dominio convexo, y por lo tanto, las CFAs construidas pueden aplicarse para la solución del problema en el dominio de interés. Claro que con esto se supone que fuera del dominio los parámetros de la ecuación son tales que el problema admite la solución analítica.

- 2) Aunque en el trabajo se consideró el caso bidimensional, el método puede ser investigado al solucionar el problema tridimensional. Para esto se requiere la integración de la función φ con respecto a la tercera coordenada. En otras palabras, se considera la ecuación verticalmente integrada [105, 107].
- 3) Al construir las CFAs para el problema de difusión se utilizan los trazadores de órdenes impares. Sin embargo, en lugar de éstos se pueden usar los trazadores de órdenes pares; con esto, la CFA de $d = 3$ será igual a la CFA de $d = 2$, la CFA de $d = 5$ será la misma que la CFA de $d = 4$, etc. En otras palabras, la propiedad “par/impar” no influye en la construcción de las CFAs.

Bibliografía

1. М. А. Александров, М. Н. Юдин, Человеко-машинные процедуры регуляризации для аналитического продолжения электромагнитных полей. *Труды первой всероссийской конференции по обработке изображений*, Россия, Владимир (1984) 109-111 (M. A. Alexandrov, M. N. Yudin, Procedimientos humano-máquina de regularización para la continuación analítica de los campos electromagnéticos. *Las memorias del primer congreso nacional sobre el procesamiento de imágenes*, Rusia, Vladimir. En Ruso.)
2. М. А. Александров, М. Н. Юдин, Г. Лозовой, Экспресс-анализ геофизических данных на полевых ЭВМ. *Тех. отчет Министерства геологии СССР, «Сахалин-геология»* (1991) 126 стр. (M. A. Alexandrov, M. N. Yudin, G. Lozovoy, Análisis expreso de datos geofísicos. *Reporte técnico del Ministerio de geología de la URSS, Sajalin-geología*, 126 páginas. En Ruso.)
3. Г. И. Баренблатт, Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика. – Л.: Гидрометеиздат, 1978. (Traducción: G. I. Barenblatt, Scaling, Self-Similarity, and Intermediate Asymptotics. *Cambridge University Press*, 1996.)
4. Ю. И. Блох, Количественная интерпретация гравитационных аномалий. – М.: Изд. МГРИ, 1982, 92 стр. (Yu. I. Bloj, La interpretación cuantitativa de anomalías gravitacionales. Moscú, MGRI, 92 páginas. En Ruso.)
5. В. С. Владимиров, Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1976. (Traducción de la segunda edición: V. S. Vladimirov, Equations of Mathematical Physics. *Dekker*, N.Y., 1971.)
6. С. К. Годунов, В. С. Рябенкий, Разностные схемы. – М.: Наука, 1977. (S. K. Godunov, V. S. Ryaben'kii, Esquemas de diferencias. En Ruso.)
7. В. А. Гущин, Метод расщепления для решения задач динамики неоднородной вязкой несжимаемой жидкости. *ЖВМ и МФ* 21 (1981). (V. A. Guschin, Un método de escisión para la solución de los problemas de dinámica de un fluido viscoso incompresible. En Ruso.)
8. М. С. Жданов, И. М. Варенцов, Н. Г. Голубев, Обобщенные асимптотические краевые условия в двумерных задачах геоэлектрики. АН СССР, ИЗМИРАН,

- Препринт № 35 (1980). (M. S. Zhdanov, I. M. Varentsov, N. G. Golubev, Condiciones de frontera generalizadas asintóticas para los problemas bidimensionales de geoelectricidad, *Acad. Cien. de la USRR, IZMIRAN*. En Ruso.)
9. В. М. Ковеня, Н. Н. Яненко, Методы расщепления в задачах газовой динамики. – Новосибирск: Наука, 1981. (V. M. Kovenya, N. N. Yanenko, Métodos de escisión en los problemas de gasodinámica. En Ruso.)
 10. А. Н. Колмогоров, С. В. Фомин, Элементы теории функций и функционального анализа. – М.: Наука, 1968. (A. N. Kolmogorov, S. V. Fomin, Elementos de la teoría de funciones y análisis funcional. En Ruso.)
 11. Г. Корн, Т. Корн, Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1974. (La edición original: G. Korn, T. Korn, *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers. McGraw-Hill Book Company*, 1968.)
 12. В. И. Лебедев, Функциональный анализ и вычислительная математика. – М.: ВИНТИ, 1994. (V. I. Lebedev, *Análisis funcional y matemática numérica*. En Ruso.)
 13. Г. И. Марчук, Численные методы в прогнозе погоды. – Л.: Гидрометеиздат, 1967. (G. I. Marchuk, Métodos numéricos en los pronósticos del tiempo. En Ruso.)
 14. Г. И. Марчук, Численное решение задач динамики атмосферы и океана. – Л.: Гидрометеиздат, 1974. (G. I. Marchuk, La solución numérica de los problemas de dinámica de la atmósfera y océano. En Ruso.)
 15. Г. И. Марчук, Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1980. (Traducción: G. I. Marchuk, *Methods of Numerical Mathematics. Springer-Verlag*, 1982.)
 16. Г. И. Марчук, Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. (Traducción: G. I. Marchuk, *Mathematical Models in Environmental Problems. Elsevier*, N.Y., 1986.)
 17. Г. И. Марчук, В. П. Дымников, В. В. Залесный и др., Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы и океана. – Л.: Гидрометеиздат, 1984. (G. I. Marchuk et al., *Modelación matemática de la circulación general de la atmósfera y océano*. En Ruso.)

18. Г. И. Марчук, Методы расщепления. – М.: Наука, 1988. (G. I. Marchuk, Métodos de escisión. En Ruso.)
19. О. А. Олейник, Е. В. Радкевич, Уравнения второго порядка с неотрицательной характеристической формой. – М.: Наука, 1971. (Traducción: O. A. Oleinik and E. V. Radkevich, Second Order Equations with Non-Negative Characteristic Form, AMS, Rhode Island and Plenum Press, N. Y., 1973.)
20. В. С. Рябенкий, Метод разностных потенциалов и его приложения. – М.: Физматлит, 2002. (Traducción: V. S. Ryaben'kii, Method of Difference Potentials and Its Applications, Springer-Verlag, 2002.)
21. Р. Темам, Уравнение Навье-Стокса и численный анализ. – М.: Мир, 1981. (La edición original: R. Temam, Navier-Stokes Equations. Theory and Numerical Analysis. North-Holland, Amsterdam, 1977.)
22. Труды пятнадцати международных конференций по методам декомпозиции (<http://www.ddm.org>). (Las memorias de los quince congresos internacionales sobre los métodos de descomposición de dominio.)
23. М. Н. Юдин, Алгоритм итерационного построения граничных условий при решении геолого-геофизических задач. *Математические методы в геологии* 6 (1981) 12-19. (M. N. Yudin, Un algoritmo de construcción iterativa de las condiciones de frontera al solucionar los problemas geológicos y geofísicos. En Ruso.)
24. М. Н. Юдин, Альтернирующий метод численного решения задач геоэлектрики. *Математические методы в геоэлектрике*, АН СССР, ИЗМИРАН (1982) 47-52. (M. N. Yudin, Un método alternado de la solución numérica de los problemas de geoelectricidad. En Ruso.)
25. М. Н. Юдин, Алгоритмы решения внешних краевых задач для основных моделей геоэлектрики. *Изв. ВУЗов, Геол. и разведка* (1984). Депонировано в ВИНТИ 11.09.84, 40 стр., № 6153-84 деп. (M. N. Yudin, Unos algoritmos de solución de problemas de frontera exteriores para los modelos básicos de geoelectricidad. En Ruso.)
26. М. Н. Юдин, Об интегро-дифференциальных асимптотических краевых условиях в прямых задачах геоэлектрики. *Изв. ВУЗов, Геология и разведка* 1

- (1984) 97-101. (M. N. Yudin, Condiciones de frontera integro-diferenciales asintóticas en los problemas de geoelectricidad. En Ruso.)
27. М. Н. Юдин, М. А. Александров, Графический диалог на мини-ЭВМ для интерпретации данных магнито-теллурического зондирования. *Проблемы исследования электромагнитных полей*, АН СССР (1983) 156-161. (M. N. Yudin, M. A. Alexandrov, El diálogo gráfico para la interpretación de datos de sondeo magnito-telúrico. En Ruso.)
 28. M. A. Alexandrov, D. M. Filatov, Yudin's Technique of Alternating Decomposition in Mass Transportation Problem. In: I. Herrera, ed., *Proceedings of the 14th Annual Conference on Domain Decomposition (DD14)*. National University of Mexico, Mexico, 7-11 January 2002, p. 65.
 29. A. Bayliss, E. Turkel, Radiation Boundary Conditions for Wave-like Equations. *Comm. Pure Appl. Math.* 33 (1980) 707-725.
 30. A. Bayliss, M. Gunzburger, E. Turkel, Boundary Conditions for Numerical Solution of Elliptic Equations in Exterior Domains. *SIAM J. Appl. Math.* 42 (1982) 430-451.
 31. A. Bayliss, E. Turkel, Far-field Boundary Conditions for Compressible Flows. *J. Comput. Phys.* 48 (1982) 182-199.
 32. A. Bayliss, E. Turkel, Outflow Boundary Conditions for Fluid Dynamics. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 3 (1982) 250-259.
 33. J. G. Blaschak, G. A. Kriegsmann, A Comparative Study of Absorbing Boundary Conditions. *J. Comput. Phys.* 77 (1988) 109-139.
 34. C. Chui, An Introduction to Wavelets, *Academic Press, San Diego*, 1992.
 35. J. de Moerloose, D. de Zutter, Surface Intergal Representation Radiation Boundary Conditions for the FDTD Method. *IEEE Ttans. Antennas Propag.* 41 (1993) 890-895.
 36. K. Dgaygui and P. Joly, Absorbing Boundary Conditions for Linear Gravity Waves, *SIAM J. Appl. Math.* 54 (1994) 93-131.
 37. B. Engquist, A. Majda, Absorbing Boundary Conditions for the Numerical Simulation of Waves. *Math. Comp.* 31 (1977) 629-651.
 38. B. Engquist, A. Majda, Radiation Boundary Conditions for Acoustic and Elastic Wave Calculations. *Comm. Pure Appl. Math.* 32 (1979) 313-357.

39. B. Engquist, A. Majda, Numerical Radiation Boundary Conditions for Unsteady Transonic Flow. *J. Comput. Phys.* 40 (1981) 91-103.
40. L. Ferm and B. Gustafsson, A Downstream Boundary Procedure for the Euler Equations, *Comput. & Fluids* 10 (1982) 261-276.
41. D. M. Filatov, Investigation of Alternating Decomposition Method for 1D Mass Transportation Problem. *Acta Academia* (2002) 303-309.
42. D. M. Filatov, On Two Computational Techniques of Constructing Boundary Conditions for the Diffusion Equation. In: H. Sossa, ed., *Proceedings of the 11th International Conference on Computing (CIC2002)*. Centre for Computing Research, National Polytechnic Institute, Mexico, 25-29 November 2002, pp. 399-404.
43. D. M. Filatov, On Local Artificial Boundary Conditions for the Diffusion Equation in Case of 2D Convex Computational Domain. *Appl. Numer. Math.*, submitted.
44. D. M. Filatov, Splitting as an Approach to Constructing Local Exact Artificial Boundary Conditions. *Appl. Math. Model.*, submitted.
45. D. M. Filatov, M. A. Alexandrov, M. N. Yudin, Alternating Decomposition Method and Its Applications to Solving Partial Differential Equations. In: D. F. Griffiths, G. A. Watson, eds., *Proceedings of the 19th Biennial Conference on Numerical Analysis (NA01)*. University of Dundee, Scotland, UK, 26-29 June 2001, p. 21.
46. D. M. Filatov, On Accurate Flexible Artificial Boundary Conditions for the Linear Advection-Diffusion-Reaction Equation. In: *Proceedings of the 15th Annual Conference on Domain Decomposition (DD15)*. Free University of Berlin, Germany, 21-25 July 2003, p. 45.
47. D. M. Filatov, Method of Splitting as an Approach to Constructing Artificial Boundary Conditions. In: G. I. Marchuk et al., *Proceedings of the International Conference on Mathematical Methods in Geophysics (MMG2003)*. Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia, 8-12 October 2003, to be published.
48. D. M. Filatov, Towards Improvement of Integration Accuracy of Linear PDEs of First Order in Time. *Appl. Math. Lett.*, submitted.
49. M. B. Giles, Non-Reflecting Boundary Conditions for Euler Equation Calculations. *AIAA J.* 28 (1990) 2050-2058.

50. D. Givoli, Numerical Methods for Problems in Infinite Domains, *Elsevier, Amsterdam*, 1992.
51. D. Givoli, A Spatially Exact Non-Reflecting Boundary Condition for Time-Dependent Problems, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 95 (1992) 97-113.
52. D. Givoli, D. Cohen, Non-Reflecting Boundary Conditions Based on Kirchhoff-type Formulae. *J. Comput. Phys.* 117 (1995) 102-113.
53. D. Givoli, J. B. Keller, A Finite Element Method for Large Domains. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 76 (1989) 41-66.
54. D. Givoli, J. B. Keller, Non-Reflecting Boundary Conditions for Elastic Waves. *Wave Motion* 12 (1990) 261-279.
55. D. Givoli, S. Vigdergauz, Artificial Boundary Conditions for 2D Problems in Geophysics. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 110 (1993) 87-101.
56. M. J. Grote, J. B. Keller, On Non-Reflecting Boundary Conditions. *J. Comput. Phys.* 122 (1995) 231-243.
57. M. J. Grote, J. B. Keller, Non-Reflecting Boundary Conditions for Time-Dependent Scattering. *J. Comput. Phys.* 127 (1996) 52-65.
58. B. Gustafsson, The Choice of Numerical Boundary Conditions for Hyperbolic Systems, *J. Comput. Phys.* 48 (1982) 270-283.
59. B. Gustafsson, Far-field Boundary Conditions for Time-Dependent Hyperbolic Systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* 9 (1988) 812-828.
60. B. Gustafsson and A. Sundstrom, Incompletely Parabolic Problems in Fluid Dynamics, *SIAM J. Appl. Math.* 35 (1978) 343-357.
61. G. R. Hadley, Transparent Boundary Condition for Beam Propagation. *Opt. Lett.* 16 (1991) 624-626.
62. T. M. Hagstrom, Asymptotic Expansions and Boundary Conditions for Time-Dependent Problems. *SIAM J. Numer. Anal.* 23 (1986) 948-958.
63. T. M. Hagstrom, Boundary Conditions at Outflow for a Problem with Transport and Diffusion. *J. Comput. Phys.* 69 (1987) 69-80.
64. T. M. Hagstrom, H. B. Keller, Exact Boundary Conditions at an Artificial Boundary for Partial Differential Equations in Cylinders. *SIAM J. Math. Anal.* 17 (1986) 322-341.

65. T. M. Hagstrom, H. B. Keller, Asymptotic Boundary Conditions and Numerical Methods for Nonlinear Elliptic Problems on Unbounded Domains. *Math. Comp.* 48 (1987) 449-470.
66. L. Halpern, Artificial Boundary Conditions for the Linear Advection Diffusion Equation. *Math. Comp.* 46 (1986) 425-438.
67. L. Halpern, Artificial Boundary Conditions for Incompletely Parabolic Perturbations of Hyperbolic Systems. *SIAM J. Math. Anal.* 22 (1991) 1256-1283.
68. I. Harari, T. J. R. Hughes, Analysis of Continuous Formulations Underlying the Computation of Time-Harmonic Acoustics in Exterior Domains. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 97 (1992) 103-124.
69. I. Herrera, New Approach to Advection-Dominated Flows and Comparison with Other Methods, in: *Computational Mechanics*, Vol. 2, Springer-Verlag, Heidelberg (1988).
70. I. Herrera, Localized Adjoint Methods: Application to Advection-Dominated Flows, *Ground-Water Management: Quantity & Quality, IAHS Publ.* 188 (1989) 349-357.
71. I. Herrera, M. A. Celia, and J. D. Martinez, Localized Adjoint Method as a New Approach to Advection-Dominated Flows, in: J. E. Moore et al., eds., *Recent Advances in Ground-Water Hydrology*. American Institute of Hydrology, (1989) 321-327.
72. R. L. Higdon, Absorbing Boundary Conditions for Difference Approximations to Multidimensional Wave Equation, *Math. Comp.* 47 (1986) 437-459.
73. R. L. Higdon, Absorbing Boundary Conditions for Acoustic and Elastic Waves in Stratified Media, *J. Comput. Phys.* 101 (1992) 386-418.
74. R. L. Higdon, Radiation Boundary Conditions for Dispersive Waves, *SIAM J. Numer. Anal.* 31 (1994) 64-100.
75. R. L. Higdon, Absorbing Boundary Conditions for Dispersive Waves, in: T. L. Geers, ed., *Proc. of the IUTAM Symposium on Computational Methods for Unbounded Domains, Univ. of Colorado at Boulder, the USA, July 27-31, 1997*.
76. F. P. Incropera, D. P. de Witt, Fundamentals of Heat and Mass Transfer. *John Wiley & Sons*, 1996.

77. H. Jiang, Y. S. Wong, Absorbing Boundary Conditions for Second-Order Hyperbolic Equations. *J. Comput. Phys.* 88 (1990) 205-231.
78. G. Jin and M. Braza, A Non-Reflecting Outlet Boundary Condition for Incompressible Unsteady Navier-Stokes Calculations, *J. Comput. Phys.* 107 (1993) 239-253.
79. M. Johnsen and D. R. Lynch, A Second-Order Radiation Boundary Condition for the Shallow Water Wave Equations on Two-Dimensional Unstructured Finite Element Grids, *Intern. J. Numer. Meth. Fluids* 18 (1994) 575-604.
80. J. B. Keller, D. Givoli, Exact Non-Reflecting Boundary Conditions. *J. Comput. Phys.* 82 (1989) 172-192.
81. D. Kröner, Absorbing Boundary Conditions for the Linearized Euler Equations. *Math. Comp.* 57 (1991) 153-167.
82. D. Lanser, J. G. Verwer, Analysis of Operator Splitting for Advection-Diffusion-Reaction Problems. *J. Comp. Appl. Math.* 111 (1999) 201-216.
83. J. D. Logan, An Introduction to Nonlinear Partial Differential Equations. *John Wiley & Sons*, 1994.
84. G. I. Marchuk, Mathematical Issues of Industrial Effluent Optimization. *J. Meteor. Soc. Japan* 60 (1982) 481-485.
85. I. C. Mathews, S. Newhouse, A Comparison Between Time and Frequency Domain Approaches for Rigid Body Scattering Problems. In: T. L. Geers, ed., *Collection of Abstracts of IUTAM Symposium on Computational Methods for Unbounded Domains*. University of Colorado at Boulder, 27-31 July 1997 (Kluwer Academic, to appear).
86. G. J. McRae, W. R. Goodin, J. H. Seinfeld, Development of a Second-Generation Mathematical Model for Urban Air Pollution. Part 1. Model Formulation. *Atmosph. Environ.* 16 (1982) 679-696.
87. R. Mittra, O. Ramahi, A. Khebir, R. Gordon, A. Kouki, A Review of Absorbing Boundary Conditions for Two- and Three-dimensional Electromagnetic Scattering Problems. *IEEE Trans. Magnetics* 25 (1989) 3034-3039.
88. D. Moreno et al., Modelación de los procesos atmosféricos en el Distrito Federal. *Reporte Técnico 2001*, México D.F.

89. N. Moussiopoulos, E. Berge, T. Bøhler, F. de Leeuw, K.-E. Grønskei, S. Mylona, M. Tombrou, Ambient Air Quality, Pollutant Dispersion and Transport Models. *Europ. Environ. Agency*, Copenhagen, 1996.
90. G. Mur, Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time-Domain Electromagnetic-Field Equations. *IEEE Trans. Electromagn. Compatibility* 23 (1981) 377-382.
91. J.-C. Nedelec, On the Use of Retarded Potentials in Different Wave Equations. Presented at IUTAM Symposium on Computational Methods for Unbounded Domains. University of Colorado at Boulder, 27-31 July 1997.
92. J. Olinger and A. Sundstrom, Theoretical and Practical Aspects of Some Initial Boundary Value Problems in Fluid Dynamics, *SIAM J. Appl. Math.* 35 (1978) 419-446.
93. D. Parra-Guevara, Yu. N. Skiba, Industrial Pollution Transport. Part 2. Control of Industrial Emissions. *Environ. Model. Assess.* 5 (2000) 177-184.
94. A. F. Peterson, Absorbing Boundary Conditions for the Vector Wave Equation. *Microwave Opt. Tech. Lett.* 1 (1988) 62-64.
95. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing. *Cambridge University Press*, 1992.
96. T. F. Russel, Eulerian-Lagrangian Localized Adjoint Methods for Advection-Dominated Problems, in: G. A. Watson and D. F. Griffiths, eds., *Numerical Analysis 1989*, Pitman Research Notes in Mathematics, Vol. 228, Longman Scientific and Technical, Harlow, the UK (1990) 206-228.
97. V. S. Ryaben'kii, Exact Transfer of Difference Boundary Conditions, *Func. Anal. Appl.* 24 (1990) 251-253.
98. V. S. Ryaben'kii, Exact Transfer of Boundary Conditions, *Comput. Mech. Solids* 1 (1990) 129-145 (In Russian).
99. V. S. Ryaben'kii and I. L. Sofronov, Difference Spherical Functions, Keldysh Inst. Appl. Math., *USSR Acad. Sci.*, Preprint No. 75 (1983) (In Russian).
100. V. S. Ryaben'kii and S. V. Tsynkov, An Application of the Difference Potentials Method to Solving External Problems in CFD, in: M. Hafez and K. Oshima, eds.,

- Computational Fluid Dynamics Review*, Vol. 1, World Scientific, Singapore (1998) 169-205.
101. F. Schmidt, P. Deuflhard, Discrete Transparent Boundary Conditions for Fresnel's Equations. In: *Proceeding of the Intergrated Photonic Research Conference (IPR)*, Vol. 3, 1994.
 102. H. A. Schwarz, *Gesammelte Mathematische Abhandlungen* 2 (1890) 133-143 (*Springer*, Berlin).
 103. Yu. N. Skiba, Air Pollution Estimates. *World Res. Rev.* 9 (1997) 542-556.
 104. Yu. N. Skiba, V. Davydova-Belitskaya, Climate of Guadalajara City (Mexico), Its Variation and Change Within Latest 120 Years. *World Res. Rev.* 11 (1999) 258-270.
 105. Yu. N. Skiba, V. Davydova-Belitskaya, Air Pollution Estimates in Guadalajara City. *Environ. Model. Assess.* 7 (2002) 153-162.
 106. Yu. N. Skiba, D. Parra-Guevara, Mathematics of Oil Spills: Existence, Uniqueness and Stability of Solutions. *Geofis. Intern.* 38 (1999) 117-124.
 107. Yu. N. Skiba, D. Parra-Guevara, Industrial Pollution Transport. Part 1. Formulation of the Problem and Air Pollution Estimates. *Environ. Model. Assess.* 5 (2000) 169-175.
 108. I. L. Sofronov, Artificial Boundary Conditions Adequate to the Wave Equation Outside the Sphere, *Keldysh Inst. Appl. Math., Russ. Acad. Sci.*, Preprint No. 42 (1992) (In Russian).
 109. I. L. Sofronov, Conditions of Complete Transparency on Sphere for the Three-Dimensional Wave Equation, *Russ. Acad. Sci., Dokl. Math.* 46 (1993) 397-401.
 110. I. L. Sofronov, Condition of Absolute Transparency of Sphere for Wave Equation. In: K. Morgan, E. Oñate, J. Périaux, J. Peraire, O. C. Zienkiewicz, eds., *Finite Elements in Fluids: New Trends and Applications*. CIMNE, Barcelona, 1993 (Pineridge Press, 1993).
 111. I. L. Sofronov, Transparent Boundary Conditions for Unsteady Transonic Flow Problems in Wind Tunnel. *Math. Inst. A, Stuttgart University*, Preprint No. 95-21, 1995.
 112. I. L. Sofronov, Generation of 2D and 3D Artificial Boundary Conditions Transparent to Waves Outgoing to Infinity. *Math. Inst. A, Stuttgart University*, Preprint No. 96-09, 1996.

113. I. L. Sofronov, Non-Reflecting Inflow and Outflow in Wind Tunnel for Transonic Time-Accurate Simulation. *J. Math. Anal. Appl.*, to appear.
114. L. L. Thompson and R. H. C. Ianculescu, Finite Element Formulation of Exact Dirichlet-to-Neumann Radiation Conditions on Elliptic and Spheroidal Boundaries, in: *Proc. of International Mechanical Engineering Congress and Exposition (IMECE'99)*, Nashville, Tennessee, the USA, November 14-19, 1999.
115. L. Ting, M. J. Miksis, Exact Boundary Conditions for Scattering Problems. *J. Acoust. Soc. Amer.* 80 (1986) 1825-1827.
116. L. Turrette, Artificial Boundary Conditions for the Linearized Compressible Navier-Stokes Equations. *J. Comput. Phys.* 137 (1997) 1-37.
117. L. N. Trefethen, L. Halpern, Well-posedness of One-way Wave Equations and Absorbing Boundary Conditions. *Math. Comp.* 47 (1986) 421-435.
118. S. V. Tsynkov, An Application of Non-Local External Conditions for Viscous Flow Computations, *J. Comput. Phys.* 116 (1995) 212-225.
119. S. V. Tsynkov, Artificial Boundary Conditions for Computation of Oscillating External Flows, *NASA Langley Research Center*, Tech. Memor. No. 4714 (1996).
120. S. V. Tsynkov, Numerical Solution of Problems on Unbounded Domains. A Review. *Appl. Numer. Math.* 27 (1998) 465-532.
121. S. V. Tsynkov, External Boundary Conditions for Three-Dimensional Problems of Computational Aerodynamics, *SIAM J. Sci. Comput.* 21 (1999) 166-206.
122. J. G. Verwer, W. Hundsdorfer, J. G. Blom, Numerical Time Integration for Air Pollution Models. *Surv. Math. Industry* 10 (2002) 107-174.
123. J. T. Weaver and C. R. Brewitt-Taylor, Improved Boundary Conditions for the Numerical Solution of E-Polarization Problems in Geomagnetic Induction, *Geophys. J. Royal Astr. Soc.* 54 (1978) 309-317.
124. M. S. Zhdanov, Geophysical Inverse Theory and Regularization Problems, *Elsevier*, 2002.

Lista de figuras

| | |
|---|-------|
| Fig. 2-1. Advección. Hacia la definición del dominio $D_{E,\tau}$ | 26 |
| Fig. 2-2. Difusión. Una línea coordinada cruza el conjunto $\bar{\Omega}$ | 36 |
| Fig. 2-3. Difusión. Hacia la solución del problema exterior | 42 |
| Fig. 2-4. Difusión. Hacia la construcción de la parte singular de la frontera ∂D_I | 45 |
| Fig. 3-1. Advección. Gráficos de variación del error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ en tiempo | 63 |
| Fig. 3-2. Advección. Gráfico de dependencia del error $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0,T]}$ con respecto al módulo del campo de velocidades..... | 65 |
| Fig. 3-3. Advección. Gráfico de dependencia del error $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0,T]}$ con respecto al paso temporal..... | 65 |
| Fig. 3-4. Advección. Retrato del campo de velocidades \mathbf{U}^{var} en el dominio $\bar{\Omega}$ | 66 |
| Fig. 3-5. Advección. Gráfico de dependencia del tiempo de cómputo con respecto al tamaño del dominio computacional..... | 68 |
| Fig. 3-6. Difusión. Gráficos de variación de los errores $\varepsilon_{\partial D_I, d}$ en tiempo..... | 72 |
| Fig. 3-7. Difusión. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\partial D_I \times (0,T], d}$ con respecto al coeficiente de difusión..... | 71 |
| Fig. 3-8. Difusión. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\partial D_I \times (0,T], d}$ con respecto al paso temporal..... | 74 |
| Fig. 3-9. Difusión. Retrato de la función μ^{var} en el dominio $\bar{\Omega}$ | 75 |
| Fig. 3-10. Difusión. Gráfico de dependencia del tiempo de cómputo con respecto al tamaño del dominio computacional..... | 77 |
| Fig. 3-11. Problema general. Extensiones del dominio interior \bar{D}_I | 80 |
| Fig. 3-12. Problema general. Gráficos de variación de los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega}, d}$ en tiempo..... | 81,82 |
| Fig. 3-13. Problema general. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0,T], d}$ con respecto al coeficiente de difusión..... | 85 |

| | |
|---|---------|
| Fig. 3-14. Problema general. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T], d}$ mínimos con respecto al coeficiente de difusión..... | 86 |
| Fig. 3-15. Problema general. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al módulo del campo de velocidades..... | 88 |
| Fig. 3-16. Problema general. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T], d}$ mínimos con respecto al módulo del campo de velocidades..... | 89 |
| Fig. 3-17. Problema general. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T], d}$ con respecto al paso temporal..... | 89 |
| Fig. 3-18. Problema general. Gráfico de dependencia del tiempo de cómputo con respecto al tamaño del dominio computacional..... | 94 |
| Fig. 3-19. Hacia los experimentos en el dominio convexo no cuadrado $\overline{\Omega}$ | 95 |
| Fig. 3-20. Dominio no cuadrado. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T], d}$ mínimos con respecto al coeficiente de difusión..... | 98 |
| Fig. 3-21. Dominio no cuadrado. Gráficos de dependencia de los errores $\varepsilon_{\overline{\Omega} \times (0, T], d}$ mínimos con respecto al módulo del campo de velocidades..... | 98 |
| Fig. 3-22. Dominio no cuadrado. Retrato del campo de velocidades \mathbf{U}^{var} en el dominio $\overline{\Omega}$ | 99 |
| Fig. 3-23. Dominio no cuadrado. Retrato de la función μ^{var} en el dominio $\overline{\Omega}$ | 99 |
| Fig. 3-24. Experimentos con datos reales. El mapa de la Ciudad de México | 102 |
| Fig. 3-25. Experimentos con datos reales. El campo de velocidades..... | 103 |
| Fig. 3-26. Experimentos con datos reales. El proceso de propagación de la sustancia en tiempo, predominio de la advección..... | 105-108 |
| Fig. 3-27. Experimentos con datos reales. El proceso de propagación de la sustancia en tiempo, los datos de observación | 109 |
| Fig. 3-28. Experimentos con datos reales. El proceso de propagación de la sustancia en tiempo, predominio de la difusión | 110-113 |
| Fig. 3-29. Experimentos con datos reales. Gráficos de variación del error $\varepsilon_{\overline{\Omega}}$ en tiempo, predominio de la advección..... | 114 |

Fig. 3-30. Experimentos con datos reales. Gráficos de variación del error $\varepsilon_{\bar{\Omega}}$ en tiempo,
predominio de la difusión 114

Lista de tablas

| | |
|--|-----|
| Tabla 3.1. Advección, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ | 64 |
| Tabla 3.2. Advección, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T]}$ | 67 |
| Tabla 3.3. Advección, grupo III. Las relaciones temporales $T_{glb, i} / T_I$ | 68 |
| Tabla 3.4. Difusión, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\partial D, \times (0, T], d}$ | 73 |
| Tabla 3.5. Difusión, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\partial D, \times (0, T], d}$ | 76 |
| Tabla 3.6. Difusión, grupo III. Las relaciones temporales $T_{glb, i} / T_I$ | 76 |
| Tabla 3.7. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie | 84 |
| Tabla 3.8. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie | 87 |
| Tabla 3.9. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie (comparación con las CFAs de otros autores) | 90 |
| Tabla 3.10. Problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie (comparación con las CFAs de otros autores) | 90 |
| Tabla 3.11. Problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie ... | 92 |
| Tabla 3.12. Problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie .. | 93 |
| Tabla 3.13. Problema general, grupo III. Las relaciones temporales $T_{glb, i} / T_I$ | 94 |
| Tabla 3.14. Dominio no cuadrado, problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie | 96 |
| Tabla 3.15. Dominio no cuadrado, problema general, grupo I. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie | 97 |
| Tabla 3.16. Dominio no cuadrado, problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, primera serie | 100 |
| Tabla 3.17. Dominio no cuadrado, problema general, grupo II. Los errores promedios $\varepsilon_{\bar{\Omega} \times (0, T], d}$, segunda serie | 101 |
| Tabla 3.18. Experimentos con datos reales. La distribución de las fuentes | 104 |

Glosario

Aplicación biyectiva. Una aplicación $P : D_1 \rightarrow D_2$ inyectiva y suryectiva.

Aplicación inyectiva. Una aplicación $P : D_1 \rightarrow D_2$ de un conjunto D_1 en un conjunto D_2 tal que $\forall x_1, x_2 \in D_1, x_1 \neq x_2$ se cumple $P(x_1) \neq P(x_2)$.

Aplicación suryectiva. Una aplicación $P : D_1 \rightarrow D_2$ de un conjunto D_1 sobre un conjunto D_2 tal que $\forall y \in D_2 \exists x \in D_1$ tal que $y = P(x)$.

Aproximación de Padé. Para una función $f(t)$ de variable real t una aproximación de la forma $R_{mn}(t) \equiv (a_0 + a_1t + \dots + a_mt^m)/(1 + b_1t + \dots + b_nt^n)$. Aquí $m, n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $a_i, b_i \in \mathbb{R}$.

Condición de von Neumann. Una condición necesaria para estabilidad de un esquema de diferencias finitas (véase esquema de diferencias estable): $|\lambda(\mathbf{T})| \leq 1$. Aquí $\lambda(\cdot)$ denota el espectro del operador \mathbf{T} . El último se llama operador de transición.

Convolución de funciones. En el caso unidimensional es una función

$$\psi(y) = \int_a^b f(x)g(y-x)dx.$$

Espacio completo. Un espacio métrico M se llama *espacio completo*, si cada secuencia fundamental $\{x_n\}$ de M converge y el límite pertenece al espacio M .

Espacio de Banach. Un espacio completo normado (generalmente, se denota por la letra B).

Espacio de Hilbert. Un espacio completo euclidiano o unitario (generalmente, se denota por la letra H).

Espacio euclidiano. Un espacio lineal L se llama *espacio euclidiano*, si sobre el conjunto de sus elementos está introducida una función real (\cdot, \cdot) , que satisface los axiomas:

1) $(x, x) \geq 0$, $(x, x) = 0 \Leftrightarrow x = 0$; 2) $(x, y) = (y, x)$; 3) $(\alpha x, y) = \alpha(y, x)$, $\alpha \in \mathbf{R}$;
 4) $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)$. La función (\cdot, \cdot) se llama *producto escalar*. En caso de $\alpha \in \mathbf{C}$ el axioma 2) se define en la forma $(x, y) = \overline{(y, x)}$ y el espacio L se llama *espacio unitario*.

Espacio lineal. Un conjunto de elementos L se llama *espacio lineal*, si para sus elementos están introducidas las operaciones de adición (“+”) y multiplicación (“*”) tales que se cumplen los siguientes axiomas: 1) $x + y = y + x$; 2) $(x + y) + z = x + (y + z)$; 3) $\exists 0 \in L$ tal que $x + 0 = x \quad \forall x \in L$; 4) $\forall x \in L \quad \exists!(-x) \in L$ tal que $x + (-x) = 0$; 5) $(\lambda)\mu x = (\lambda\mu)x$; 6) $1 * x = x$; 7) $(\lambda + \mu)(x + y) = \lambda x + \lambda y + \mu x + \mu y$. Los escalares λ y μ son números reales o complejos.

Espacio métrico. Un conjunto de elementos M se llama *espacio métrico*, si sobre M está introducida una función real $\rho(\cdot, \cdot)$, que satisface los axiomas: 1) $\rho(x, y) \geq 0$, $\rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$; 2) $\rho(x, y) = \rho(y, x)$; 3) $\rho(x, y) \leq \rho(x, z) + \rho(z, y)$. La función $\rho(\cdot, \cdot)$ se llama *métrica*.

Espacio normado. Un espacio lineal L se llama *espacio normado*, si sobre el conjunto de sus elementos está introducida una función real $\|\cdot\|$, que satisface los axiomas: 1) $\|x\| \geq 0$, $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$; 2) $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, $\alpha \in \mathbf{R} \text{ o } \mathbf{C}$; 3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$. La función $\|\cdot\|$ se llama *norma*.

Espacio unitario. Véase espacio euclidiano.

Espectro de operador. Para un problema $L\varphi = \lambda\varphi$ (1), donde L es un operador, el conjunto de todos los valores $\lambda \in \mathbf{C}$ tales que se cumple (1) y $\varphi \neq 0$.

Esquema de diferencias estable. Sea $L^h \varphi^h = f^h$ un problema en diferencias. El esquema se llama *estable*, si el problema tiene la única solución φ_f^h y se cumple la desigualdad $\|\varphi_f^h\| \leq M \|f^h\|$. Aquí M es una constante. Si la desigualdad se cumple para cualquier $h > 0$, entonces el esquema se llama *absolutamente estable*; si no –*condicionalmente*

estable. En el caso no estacionario el problema $L^h \varphi^h = f^h$ es representable en la forma $\varphi_{n+1} = T \varphi_n + h f_n$, donde el operador T se llama *operador de transición*.

Esquema de diferencias, orden de aproximación. Sean $L \varphi = f$ (1) un problema diferencial y $L^h \varphi^h = f^h$ (2) un problema en diferencias. El esquema (2) *aproxima* el problema (1) *con orden k* , si existen $M > 0$ y $h^* > 0$ tales que $\forall h < h^*$ se cumple la desigualdad $\|L^h(\varphi)_h - f^h\| \leq M h^k$. Aquí $(\cdot)_h$ denota un operador, que para cada elemento φ pone en correspondencia un elemento φ^h .

Funcional. Véase operador.

Función de Dirac. La función (generalizada) δ tal que $\delta(x) = 0$ ($x \neq 0$), $\int_{\mathbb{R}^n} \delta(x) dx = 1$.

Integral de Fourier. Para una función $f(t)$ de variable real t la representación de la forma $f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(\lambda) e^{i\lambda t} d\lambda$, donde $c(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\lambda t} dt$, $i^2 = -1$. La función $c(\lambda)$ es la transformada de Fourier de la función $f(t)$.

Integral de Kirchhoff. Para un problema de onda $L \varphi = f$ la solución $\varphi = f * \varphi^*$. Aquí φ^* es la solución fundamental, mientras el signo “*” denota la convolución.

Métrica. Véase espacio métrico.

Norma. Véase espacio normado.

Núcleo de operador. Para un operador $P : X \rightarrow Y$ el *núcleo* es un conjunto A de elementos del espacio lineal X tal que $P(A) = 0$. Aquí Y también es un espacio lineal. Núcleo se denota por medio de $\ker P$.

Operador. Una aplicación P de un conjunto D de un espacio métrico X en un espacio métrico Y (se escribe $P : D \rightarrow Y$), tal que para cada elemento $x \in D$ por una cierta regla

se pone en correspondencia el único elemento $y \in Y$. Si $Y = \mathbb{R}$ o $Y = \mathbb{C}$, entonces el operador P se llama *funcional*.

Operador adjunto. Para un operador P el *operador adjunto* P^* se determina de la igualdad $(Px, y) = (x, P^*y)$.

Operador continuo. Un operador $P : D \rightarrow Y$ se llama *continuo sobre el conjunto* D , si él es continuo en cada punto $x \in D$. El operador P se llama *continuo en un punto* $x_0 \in D$, si $\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0$ tal que $\rho_Y(P(x), P(x_0)) < \varepsilon \quad \forall x \in D, \rho_X(x, x_0) < \delta$. Aquí $\rho_Y(\cdot, \cdot)$ y $\rho_X(\cdot, \cdot)$ son las métricas de los espacios Y y X , respectivamente.

Operador de d'Alembert. El operador lineal diferencial \square . Se determina por medio del operador de Laplace como $\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$.

Operador de Hamilton. El operador lineal diferencial ∇ (nabla). En el caso bidimensional se determina en la forma $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial}{\partial y} \bar{j}$.

Operador de Laplace. El operador lineal diferencial Δ (delta). Se determina por medio del operador de Hamilton como $\Delta = \nabla \cdot \nabla$, donde “ \cdot ” denota el producto escalar.

Operador de transición. Véase esquema de diferencias estable.

Operador acotado. Un operador $P : X \rightarrow Y$ tal que la cantidad $\|P\| = \sup_{x \in X} \frac{\|Px\|}{\|x\|}$ es finita.

La cantidad señalada se llama norma del operador P .

Operador lineal. Un operador $P : D \rightarrow Y$ tal que $\forall x, y \in D$ y $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$ o \mathbb{C} se cumple $P(\alpha x + \beta y) = \alpha P(x) + \beta P(y)$.

Problema bien planteado. Un problema diferencial $L\varphi = f$ se llama *bien planteado*, si tiene la única solución φ^* , que depende continuamente de la función del lado derecho f (de las “fuentes”).

Producto escalar. Véase espacio euclidiano.

Secuencia fundamental. Una secuencia $\{x_n\}$ de un espacio métrico M tal que $\forall \varepsilon > 0$ $\exists N$ tal que $\rho(x_n, x_m) < \varepsilon \quad \forall n, m > N$. Aquí $\rho(\cdot, \cdot)$ es la métrica del espacio M .

Solución fundamental. Para un problema diferencial $L\varphi = f$ la solución φ^* tal que se cumple $L\varphi^* = \delta$, donde δ es la función de Dirac.

Transformada de Fourier. La transformada integral, que para cada función $f(t)$ de variable real t pone en correspondencia la función $F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt$ de variable real ω , donde $i^2 = -1$. La función $F(\omega)$ se llama *transformada de Fourier* de la función $f(t)$. La función $f(t)$ debe ser absolutamente integrable, es decir, $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(t)| dt < \infty$.

Transformada de Laplace. La transformada integral, que para cada función $f(t)$ de variable real t pone en correspondencia la función $F(s) = \int_0^{+\infty} f(t)e^{-st} dt$ de variable compleja s . La integral se llama *integral de Laplace*, mientras la función $F(s)$ es *transformada de Laplace* (o bien, *imagen*) de la función $f(t)$. La última se llama *original*. Las condiciones sobre el original son: 1) $D(f) = \mathbb{R}$, $f(t) = 0 \quad \forall t < 0$; 2) $f \in C(\mathbb{R})$; 3) $\exists M, \alpha$ tales que $|f(t)| \leq Me^{\alpha t}$.

Contenido

| | |
|---|----|
| Resumen | 2 |
| Abstract | 3 |
| Introducción | 4 |
| Motivación | 4 |
| Objetivo del trabajo | 5 |
| Metas de investigación..... | 5 |
| Divulgación del trabajo..... | 5 |
| Volumen y estructura de la tesis | 6 |
| Agradecimientos | 6 |
| Capítulo 1. Estado del arte | 7 |
| 1.1 Métodos de construcción de las CFAs globales | 7 |
| 1.2 Métodos de construcción de las CFAs locales..... | 14 |
| 1.3 Cuestiones relacionadas | 17 |
| 1.4 Conclusión del primer capítulo..... | 18 |
| Capítulo 2. El método de construcción de las CFAs | 19 |
| 2.1 Planteamiento del problema..... | 19 |
| 2.2 Escisión por procesos físicos | 20 |
| 2.3 Advección | 23 |
| 2.3.1 Descomposición de dominio | 24 |
| 2.3.2 Imponiendo la condición de frontera para el problema interior..... | 25 |
| 2.3.3 Buen planteamiento del problema interior | 26 |
| 2.4 Difusión | 33 |
| 2.4.1 Descomposición de dominio | 33 |
| 2.4.2 Una familia de soluciones aproximadas del problema exterior | 38 |
| 2.4.3 Imponiendo las condiciones de frontera para el problema interior..... | 43 |
| 2.4.4 Buen planteamiento del problema interior | 47 |
| 2.4.5 Algunas estimaciones y observaciones | 53 |
| 2.5 Conclusión del segundo capítulo | 58 |

| | |
|--|-----|
| Capítulo 3. Experimentos numéricos | 59 |
| 3.1 Comentarios generales..... | 59 |
| 3.2 Advección | 60 |
| 3.2.1 Grupo I. Valores constantes del campo de velocidades..... | 62 |
| 3.2.2 Grupo II. Valores variables del campo de velocidades..... | 66 |
| 3.2.3 Grupo III. Ahorro de los recursos | 67 |
| 3.3 Difusión | 68 |
| 3.3.1 Grupo I. Valores constantes del coeficiente de difusión..... | 71 |
| 3.3.2 Grupo II. Valores variables del coeficiente de difusión..... | 75 |
| 3.3.3 Grupo III. Ahorro de los recursos | 76 |
| 3.4 Advección-difusión-absorción..... | 77 |
| 3.4.1 Grupo I. Valores constantes de los parámetros..... | 80 |
| 3.4.2 Grupo II. Valores variables de los parámetros..... | 91 |
| 3.4.3 Grupo III. Ahorro de los recursos | 94 |
| 3.5 Dominio convexo no cuadrado | 95 |
| 3.6 Experimentos con datos reales..... | 102 |
| 3.7 Conclusión del tercer capítulo | 115 |
| Conclusión | 117 |
| Novedad científica | 117 |
| Importancia práctica | 117 |
| Comentarios de conclusión..... | 117 |
| Bibliografía | 119 |
| Lista de figuras | 130 |
| Lista de tablas | 133 |
| Glosario | 134 |
| Contenido | 139 |