

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

ESCUELA DE POSGRADO



**Implementación de un Esquema de Alto Orden Compacto para
hallar la Solución de la Ecuación del Calor Bidimensional**

Tesis para optar el grado de Magistra en Matemáticas Aplicadas

Autora

Yelinna Beatriz Pulliti Carrasco

Asesor

Rubén Agapito

Jurado

Dr. Juan Casavilca

Dr. Francisco Pasquel

Lima - Perú

2018

Resumen

En el presente trabajo, el cual está basado en [7] y [8], analizamos dos métodos para construir esquemas de alto orden compactos para resolver la ecuación del calor bidimensional en un dominio espacial rectangular. También explicamos paso a paso la construcción de un método no eficiente y otro eficiente (desde el punto de vista computacional) para calcular esquemas de alto orden compacto, partiendo desde los esquemas unidimensionales de alto orden hasta finalizar con el algoritmo respectivo en pseudocódigo, esto con el objetivo de resolver problemas de valor inicial y condiciones de frontera periódicas para la ecuación del calor bidimensional. Finalmente estudiamos las condiciones generales de estabilidad para el caso de condiciones de frontera no periódicas, cuyo análisis es omitido por [7] y [8].

Primeramente definimos h como el tamaño de paso para la discretización espacial, Δt como el tamaño de paso para la discretización temporal, y N como la cantidad de operaciones que deben realizarse para hallar la solución numérica.

El primer método presentado se considera ineficiente, a diferencia del segundo método que sí se considera eficiente, según el siguiente criterio:

Un esquema numérico se considera eficiente si cumple las tres siguientes condiciones: estabilidad, orden de aproximación a la solución analítica mayor a $O(h^2)$, y complejidad computacional inferior a $O(N^3)$ para el caso unidimensional.

Se prefieren los esquemas implícitos a los explícitos y asumir condiciones de frontera periódicas, dada la dificultad para hallar esquemas de alto orden compacto estables que consideren condiciones de frontera tanto periódicas como no periódicas. Finalmente por motivo de la complejidad computacional al hallar la solución numérica, se prefieren algoritmos optimizados en lugar de algoritmos iterativos con más de dos bucles anidados, ya que los métodos de diferencias finitas en general implican operaciones entre vectores y matrices, lo que suele incrementar la complejidad computacional de los algoritmos empleados en su implementación.

Abstract

In the present work, that is based on [7] and [8], we analyze two methods to construct high order compact schemes to solve the bidimensional heat equation in a rectangular domain. Also we explain step by step the construction of a non efficient method and an efficient one (from the computational point of view) for calculating high order compact schemes. We start with the high order unidimensional schemes and end with the respective algorithm in pseudocode, this is for solving initial value problems with periodic boundary conditions for the bidimensional heat equation. Finally we study the general conditions for stability in the case of non periodic boundary conditions. This analysis is omitted by [7] and [8].

First we define h as the spatial discretizing step size, Δt as the time discretizing step size, and N as the number of operations to make for finding the numerical solution.

The first shown method is considered inefficient, on the other hand the second one is considered efficient according to the following criteria:

A numerical scheme is considered efficient if it satisfies these three conditions: stability, accuracy order to the analytical solution superior to $O(h^2)$, and computational complexity inferior to $O(N^3)$ for the unidimensional case.

Implicit schemes are preferred to explicit ones and assuming periodic boundary conditions, because it is difficult to find stable high order compact schemes with periodic and non periodic boundary conditions. Finally because of the computational complexity to find the analytical solution, it is preferred optimized algorithms to iterative algorithms with more than two nested loops. Finite difference methods imply vectorial and matricial operations, and this often increments the computational complexity of the implemented algorithms.

Índice general

Resumen	i
Abstract	ii
1 Introducción	1
1.1 Motivación.....	4
2 Preliminares	6
2.1 Construcción de los esquemas unidimensionales de alto orden compacto para aproximar las derivadas de una función.....	9
3 Estabilidad, Consistencia y Convergencia	13
4 Construcción de un Esquema de Alto Orden Compacto	15
4.1 Caso Periódico.....	16
4.1.1 Primer Método: Construcción de los Esquema de Alto Orden Compacto Bidimensional (Ineficiente).....	16
4.1.2 Segundo Método: Construcción de los Esquema de Alto Orden Compacto Bidimensional (Eficiente).....	30
4.2 Caso No Periódico.....	41
4.2.1 Construcción de las Matrices LHS y RHS para el Caso No Periódico.....	41
4.2.2 Análisis de Estabilidad para el Caso No Periódico.....	44
5 Resultados	49
5.1 Empleando Esquemas para Fronteras Periódicas.....	49
5.2 Empleando Esquemas para Fronteras No Periódicas (Caso General).....	52
5.3 Comparación de los Errores de los Esquemas.....	55
5.3.1 Error usando el esquema para fronteras periódicas vs. el esquema para fronteras no periódicas.....	55

5.3.2 Error usando el esquema de segundo orden vs. el esquema de cuarto orden para fronteras periódicas	56
6 Conclusiones	58
Referencias	59
A Programas	64

Índice general



Capítulo 1

Introducción

Uno de los métodos más usados para calcular soluciones discretas de ecuaciones diferenciales es el método de diferencias finitas, cuyas fórmulas pueden construirse en base a las expansiones de Taylor de las derivadas de la ecuación diferencial a resolver, aplicadas sobre una malla resultante de la discretización espacial y/o temporal del dominio de la ecuación diferencial a resolver.

Para hallar la solución numérica, primero se debe discretizar el dominio considerado, tanto para las coordenadas espaciales y temporales (en el caso de la ecuación (1.2) sólo hay una coordenada espacial). A continuación, se puede emplear uno de los dos tipos de esquemas de diferencias finitas, los explícitos o los implícitos, para calcular la solución.

Si t_n y t_{n-1} son puntos en la discretización temporal, y x_i y x_{i-1} son puntos en la discretización espacial, se definen $h = x_i - x_{i-1}$ y $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ constantes de modo que los puntos de la malla estén igualmente espaciados. Al discretizar el dominio espacial, la solución u toma valores en puntos específicos tales como x_1 , x_2 , etc. Al discretizar el dominio temporal, los puntos se denominan n , $n + 1$, etc.

Un esquema de diferencias finitas se considera de alto orden si tiene error de aproximación igual o superior a $O((\Delta t)^2)$ para la discretización temporal, y error de aproximación igual o superior a $O(h^4)$ para la discretización espacial. Por ejemplo, un esquema de diferencias finitas para la segunda derivada es el esquema de valor centrado:

$$u_i^{\text{ff}} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad (1.1)$$

Este esquema sólo utiliza tres puntos de la malla de la discretización espacial y tiene error de aproximación $O(h^2)$ por lo que no es de alto orden. u_i y u_i^{ff} son los valores de la solución numérica y su segunda derivada para cada punto x_i de la malla respectivamente, de modo que $u_i = u(x_i)$ y $u_i^{\text{ff}} = u^{\text{ff}}(x_i)$.

En el presente trabajo, se analizará la ecuación del calor bidimensional con condiciones iniciales y de frontera mostrada en (1.2). Los valores de u corresponden a la solución analítica de esta ecuación:

$$\frac{du}{dt} + a\frac{d^2u}{dy^2} + b\frac{d^2u}{dx^2} = F(x) \quad (1.2)$$

Donde $F(x)$ es una función conocida.

Los esquemas explícitos aproximan la solución numérica calculando en cada paso un solo valor desconocido para el nivel temporal $n + 1$ a partir del nivel temporal ya conocido n , donde los valores para $n = 0$ los da la condición inicial. El resultado para la solución numérica en el nivel temporal $n + 1$ es igual a una combinación lineal de más de un valor conocido de la solución en el nivel temporal n .

A pesar de que los esquemas explícitos son más fáciles de resolver, imponen condiciones de estabilidad muy estrictas, como se comprueba en [12], que restringen los valores permitidos de Δt y h a rangos muy estrechos de valores.

En cambio los esquemas implícitos tienen la ventaja de poder ser incondicionalmente estables (ver definición 2.4). Estos esquemas comúnmente se reescriben de forma matricial, y se resuelven con el algoritmo de Thomas o algoritmos de inversión matricial optimizados (esto es mencionado en [15]). A diferencia de los esquemas explícitos, los esquemas implícitos aproximan la solución numérica evaluando los valores desconocidos en el nivel temporal $n + 1$ resolviendo un sistema lineal de ecuaciones de la forma:

$$Au^{n+1} = Bu^n \quad (1.3)$$

Donde u^n es el valor de la solución numérica para el nivel temporal n y u^{n+1} es el valor para el nivel temporal $n + 1$. A y B son las matrices que resultan a partir de los esquemas implícitos elegidos.

En el presente trabajo, mostraremos cómo construir la ecuación (1.3) a partir de (1.2).

El análisis de estabilidad para ambos tipos de esquemas se realiza en las secciones 2.3.1 y 5.2.2. de [7], y específicamente para la ecuación del calor bidimensional en [12], pero sólo para el caso con fronteras periódicas. La estabilidad para el caso con fronteras no periódicas (o caso genérico) la estudiamos al final del presente trabajo.

Los esquemas de diferencias finitas de alto orden pueden clasificarse en esquemas explícitos, y esquemas compactos o de Padé. Los esquemas de alto orden explícitos calculan las derivadas en cada punto de la malla empleando estenciles más amplios para aproximar las derivadas, es decir, sólo calculan un punto a la vez en el lado izquierdo de la ecuación. Los esquemas compactos calculan 3 o más puntos en el lado izquierdo de la ecuación lo cual permite

aumentar el orden de aproximación sin tener que ampliar excesivamente el estencil empleado en el lado derecho de la ecuación (ver [15]).

La ampliación del estencil permite mejorar el error de aproximación pero complica los cálculos numéricos, además de presentar problemas de estabilidad similares a los que ocurren en los esquemas de diferencias finitas explícitos de bajo orden. Por otro lado [11] y [7] señalan que los esquemas de alto orden compacto emplean estenciles más pequeños, y obtienen todas las derivadas numéricas a lo largo de la malla resolviendo un sistema lineal de ecuaciones. Otra ventaja de los esquemas compactos es que pueden construirse de manera que sean incondicionalmente estables.

El orden de aproximación en el caso de los esquemas de alto orden explícitos será inferior para la misma cantidad de puntos considerados que en el caso de los esquemas compactos. [7] señala que la experiencia ha demostrado que los esquemas compactos son mucho más precisos que los esquemas explícitos del mismo orden.

Un inconveniente de utilizar más puntos en la malla se presenta al considerar los puntos cercanos a las fronteras, esto complica los cálculos dado que los puntos $u_{i-2}, u_{i-1}, u_{i+2}, u_{i+2}$ quedan fuera del dominio de la ecuación diferencial a resolver. El tratamiento de los puntos cercanos a la frontera también se discute en el presente trabajo.

Un método de alto orden compacto se considera eficiente si cumple las siguientes tres condiciones:

- 1) Debe ser incondicionalmente estable.
- 2) Debe tener error de aproximación espacial igual o inferior a $O(h^4)$.
- 3) Debe requerir para el cálculo de la solución numérica una complejidad computacional inferior a $O(N^3)$ para el caso unidimensional, y $O(N^4)$ para el caso bidimensional. N es la cantidad de puntos a considerar para la solución numérica.

En el presente trabajo consideramos solamente esquemas de alto orden compactos implícitos e incondicionalmente estables, además de mostrar la implementación de un método ineficiente y otro eficiente.

En el caso del esquema compacto de alto orden ineficiente nos basaremos en el método de construcción dado por [7] y [11] sin realizar la implementación del código computacional para hallar la solución. En el caso del esquema compacto de alto orden eficiente, emplearemos el método ADI (Alternate Direction Implicit method) para calcular la solución numérica en dominios bidimensionales. Se ha comprobado en [12] que este método es incondicionalmente estable y que requiere alrededor de $\frac{2 \log N}{\log 2}$ cálculos para hallar la solución, mientras que

los métodos iterativos no optimizados o vectorizados requieren como mínimo de N^3 cálculos. Más detalle del análisis de complejidad computacional para ambos tipos de métodos computacionales se encuentra en [12].

1.1 Motivación

Debido a su menor consumo de memoria y mayor orden de aproximación, los métodos de diferencias finitas compactos de alto orden han hallado aplicaciones en campos tales como la acústica, electromagnetismo computacional, oceánica, y simulaciones que deben llevarse a cabo durante largos periodos de tiempo y considerando grandes distancias. A pesar de ello, la mayoría de las investigaciones se enfocan en los casos gobernados por ecuaciones diferenciales hiperbólicas o con términos convectivos y difusivos, prestándose menos atención a las ecuaciones parabólicas o puramente difusivas, especialmente en dimensiones espaciales mayores a uno (ver [8]).

Al desarrollar métodos de alto orden compacto para ecuaciones parabólicas, la mayoría de los autores sólo consideran el caso unidimensional, y muchas veces no son muy claros al explicar cómo relacionar las derivadas temporales con las espaciales, especialmente para el caso parabólico. Además muchos autores sólo consideran los casos con fronteras periódicas, omitiendo los casos más generales que son más difíciles de tratar, especialmente por las condiciones de estabilidad de las que dependen. En el estudio dado por [1], se implementa un nuevo método de solución para la ecuación de convección-difusión bidimensional, pero el análisis de estabilidad sólo se realiza considerando condiciones de frontera periódicas, y al presentar los resultados de los experimentos numéricos, los autores no especifican si están usando los esquemas para el caso con fronteras periódicas o no periódicas.

En el caso del método de alto orden compacto no eficiente, no todos los autores explican cómo construir las matrices de la ecuación (1.3) para hallar la solución de una ecuación parabólica bidimensional, o suelen limitarse a explicar sólo la construcción de las matrices para el caso unidimensional, sin considerar que para el caso bidimensional existen varios pasos intermedios, y que no se puede ir desde el caso unidimensional al bidimensional de forma directa (por ejemplo [14] omite estos pasos y sólo muestra el código en Matlab para resolver la ecuación bidimensional del calor con un esquema de segundo orden).

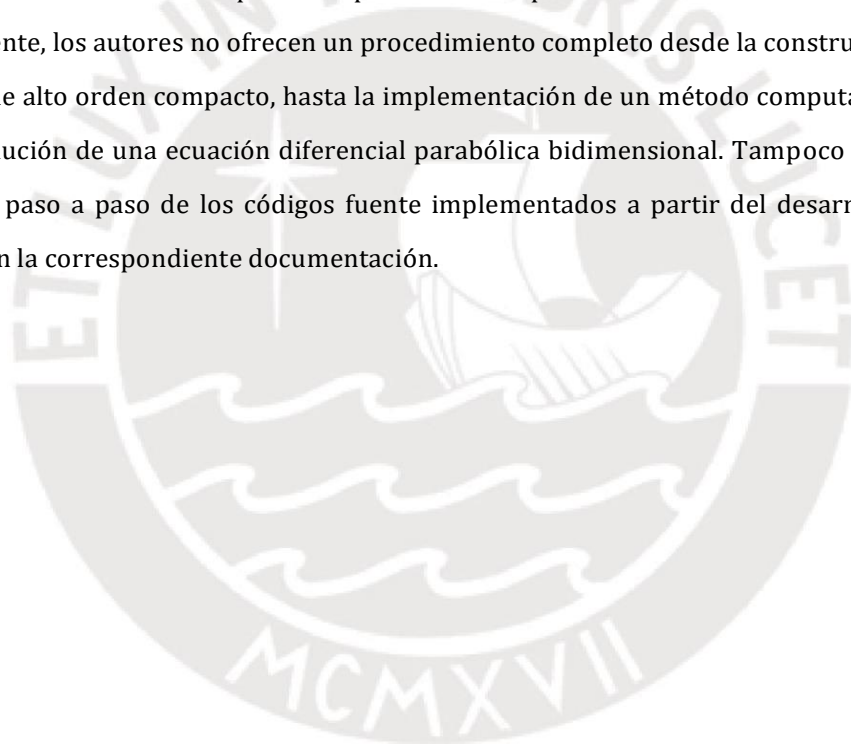
Algunos autores como [10] y [11] explican cómo construir los esquemas de alto orden compacto bidimensionales, pero omiten cómo construir las matrices para implementar el método de solución propuesto. En el caso que los autores expliquen cómo construir las matrices, omiten cómo relacionar las derivadas temporales con las espaciales (en el caso de [26]) o sólo lo

explican para la ecuación diferencial hiperbólica unidimensional (en el caso de [15]).

El mismo problema se presenta para el método eficiente, los autores suelen explicar la implementación sólo para el caso unidimensional o para el caso de los esquemas de segundo orden (ver [20]). Si la implementación existe, se suelen emplear métodos iterativos sin explicar que estos métodos no son aconsejables para el caso bidimensional, o si se emplea el método ADI, no dan una explicación previa que justifique su uso (ver [7]).

Otros autores como [20] ofrecen las explicaciones que omiten [7] y [14], pero sin ofrecer la explicación detallada del código fuente para obtener la solución numérica (en caso de existir), o sin hacer el análisis de eficiencia computacional que permite escoger el método ADI en lugar de los métodos iterativos con complejidad computacional $O(N^3)$ o más, como sí se hace en [12]. En la sección 5.10 en [17] el autor analiza distintos métodos iterativos con complejidad computacional menor a $O(N^3)$ pero sólo para el caso elíptico.

Finalmente, los autores no ofrecen un procedimiento completo desde la construcción de los esquemas de alto orden compacto, hasta la implementación de un método computacional para hallar la solución de una ecuación diferencial parabólica bidimensional. Tampoco ofrecen una explicación paso a paso de los códigos fuente implementados a partir del desarrollo teórico mostrado en la correspondiente documentación.



Capítulo 2

Preliminares

Definición 2.1 (Problema Bien Condicionado). Un problema Cauchy o de valor en la frontera está bien condicionado si la solución existe, es única, y depende continuamente de la condición inicial y las condiciones de frontera (ver [9]).

Definición 2.2 (Error de Truncamiento). Los esquemas de diferencias finitas se calculan a partir de las expansiones de Taylor de cada uno de sus términos. El error de truncamiento se define como la diferencia entre la solución exacta (la cual considera todos los términos de las expansiones de Taylor) y el esquema de diferencias finitas correspondiente.

Por ejemplo, para obtener el esquema de diferencias finitas centradas (1.1), se consideran las expansiones de Taylor de los términos u_{i+1} y u_{i-1} , alrededor de x_i :

$$\begin{aligned}
 u_{i+1} = u(x_{i+1}) &= u_i + hu_i^f + \frac{h^2 u_i^{ff}}{2} + \frac{h^3 u_i^{(3)}}{6} + \frac{h^4 u_i^{(4)}}{24} + \frac{h^5 u_i^{(5)}}{120} + \frac{h^6 u_i^{(6)}}{720} + \frac{h^7 u_i^{(7)}}{5040} + O(h^8), \\
 u_{i-1} = u(x_{i-1}) &= u_i - hu_i^f + \frac{h^2 u_i^{ff}}{2} - \frac{h^3 u_i^{(3)}}{6} + \frac{h^4 u_i^{(4)}}{24} - \frac{h^5 u_i^{(5)}}{120} + \frac{h^6 u_i^{(6)}}{720} - \frac{h^7 u_i^{(7)}}{5040} + O(h^8),
 \end{aligned}$$

donde $h = x_i - x_{i-1}$. Sumando ambas expansiones y despejando u_i^{ff} resulta

$$u_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + \frac{h^4 u_i^{(4)} + h^6 u_i^{(6)}}{360} + O(h^8),$$

donde el error de truncamiento es:

$$T(h) = \frac{h^4 u_i^{(4)}}{12} + \frac{h^6 u_i^{(6)}}{360} + O(h^8) \Rightarrow T(h) = O(h^2)$$

En resumen, para el esquema de diferencias finitas centradas (1.1) se cumple

$$u_i^{ff} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \tag{2.1}$$

En el caso de la derivada temporal, para un esquema de diferencias finitas centradas hacia atrás se tiene

$$u_t^f = \frac{u(t_i) - u(t_{i-1})}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad \text{donde } \Delta t = t_i - t_{i-1} \quad (2.2)$$

El error de truncamiento $T(t) = O(\Delta t)$ y $T(h) = O(h^2)$ son funciones de $(\Delta t)^p$ y h^q con $p, q \geq 1$ enteros.

En una ecuación diferencial comúnmente se tiene una relación entre las derivadas temporales y las espaciales; por ejemplo para la ecuación del calor unidimensional

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

al escoger el esquema de diferencias centrado explícito para la segunda derivada espacial 2.1 y el esquema (2.2) para la derivada temporal, se tiene

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{u^n - 2u^n + u^n}{h^2} + O(h^2) + O(\Delta t) \quad (2.3)$$

Así, al relacionar las derivadas temporales con las espaciales, el error de truncamiento es una función de $(\Delta t)^p$ y h^q , el cual denotaremos por $T(t, h) = O((\Delta t)^p, h^q)$.

Definición 2.3 (Problema con fronteras Periódicas). Problema de valor inicial con condiciones de frontera en el que la solución y todas sus derivadas tienen los mismos valores en todas las fronteras del dominio considerado, el cual es finito (ver [4]). Es decir, si el dominio es igual al intervalo $[-L, L] \times [-N, N]$, y $u(x, t)$ es la solución del problema, se cumple que:

$$u(0, t) = u(L, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} u(-L, t) = \frac{\partial}{\partial x} u(L, t)$$

$$\forall t \geq 0$$

Para el caso bidimensional:

$$\frac{\partial}{\partial x} u(-L, y, t) = \frac{\partial}{\partial x} u(L, y, t)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} u(x, -N, t) = \frac{\partial}{\partial y} u(x, N, t)$$

$$\forall t \geq 0$$

Definición 2.4 (Estabilidad de un Esquema Numérico). Dada una ecuación diferencial $y' = f(y, t)$ cuya solución es acotada, y un esquema numérico, se define la estabilidad como (ver [17]):

1. Esquema Estable o Incondicionalmente Estable: La solución numérica no crece sin cota con ninguna elección para los tamaños de paso h o Δt .
2. Esquema Inestable: La solución crece al infinito sin importar el tamaño de paso h o Δt elegido. Estos esquemas no son de ninguna utilidad.
3. Esquema Condicionalmente Estable: La solución se mantiene acotada con valores específicos para los tamaños de paso h o Δt .

Definición 2.5 (Análisis de Estabilidad de Von Neumann). Método para analizar la estabilidad de un esquema numérico en función a los tamaños de paso espacial y temporal elegidos. Dado que la solución de una ecuación diferencial parabólica puede expresarse como una suma de series de Fourier, se asume que la solución en el nivel temporal n es de la forma:

$$u_{i,j}^n = \xi^n e^{I(w_x i + w_y j)}$$

Para el nivel temporal $n + 1$ la solución se considera de la forma:

$$u_{i,j}^{n+1} = \xi^{n+1} e^{I(w_x i + w_y j)}$$

En un esquema numérico dado, se realizan los siguientes reemplazos:

$$u_{i+k_1, j+k_2}^{n+k} = \xi^{n+k} e^{I(w_x(i+k_1) + w_y(j+k_2))}$$

Donde $k \in \{0, 1\}$ y k_1, k_2 son enteros que indican los puntos de la discretización espacial considerados. w_x y w_y son ángulos de fase cualesquiera. $I = \sqrt{-1}$.

El sistema se considera estable si $|\xi|$ es menor a 1 para todo w_x y w_y .

En el caso del esquema 2.3 se tiene:

$$\frac{\xi^{n+1} e^{I w_x i} - \xi^n e^{I w_x i}}{\Delta t} = \frac{\xi^n e^{I w_x (i+1)} - 2 \xi^n e^{I w_x i} + \xi^n e^{I w_x (i-1)}}{h^2}$$

$$\frac{(\xi - 1) e^{I w_x i}}{\Delta t} = \frac{e^{I w_x (i+1)} - 2 e^{I w_x i} + e^{I w_x (i-1)}}{h^2}$$

$$\frac{(\xi - 1)}{\Delta t} = \frac{e^{Iw_x} - 2 + e^{-Iw_x}}{h^2}$$

$$\frac{(\xi - 1)}{\Delta t} = \frac{-4 \sin^2(\frac{1}{2}w_x)}{h^2}$$

$$\xi = 1 + \Delta t \frac{-4 \sin^2(\frac{1}{2}w_x)}{h^2}$$

Escogiendo $\sin^2(\frac{1}{2}w_x) = 1$:

$$\xi = 1 - 4 \frac{\Delta t}{h^2}$$

Con esto se demuestra que el esquema 2.3 es condicionalmente estable. Los valores que se elijan para Δt o h^2 deben cumplir la relación:

$$-1 \leq 1 - 4 \frac{\Delta t}{h^2} \leq 1$$

$$\frac{\Delta t}{h^2} \leq \frac{1}{2}$$

Este ejemplo ilustra la importancia de los análisis de estabilidad al escoger un esquema de diferencias finitas.

En el capítulo 2 de [7], en el capítulo 5 de [17] y en la sección 4.1.2 se explica cómo realizar el análisis de estabilidad de Von Neumann para esquemas más complejos.

2.1 Construcción de los esquemas unidimensionales de alto orden compacto para aproximar las derivadas de una función

La técnica general para construir un esquema de alto orden compacto para el caso periódico se explica en el capítulo 2 de [17] para la primera derivada, y de forma más general en [18]. Empleando el método en [18] se parte de la siguiente fórmula:

$$\frac{h^d}{d} f_i^{d+} + \sum_{k=k_{min}}^{k=k_{max}} a_k f_{i+k} = O(h^p) \quad (2.4)$$

La cual aproxima cualquier derivada de una función f arbitraria diferenciable. d es un número entero mayor o igual a 1, k_{max} y k_{min} indican la cantidad de puntos de la malla que se escogerán para la aproximación, $O(h^p)$ es el error de aproximación, y a_k son los coeficientes de la combinación lineal resultante de las expansiones de Taylor de los términos f_{i+k} ; $\forall k \geq 0$. El parámetro p en el error de aproximación depende de la cantidad de términos a_k considerados

en la ecuación (2.4). Éstos deben calcularse de modo que mejoren el orden de aproximación del esquema que resultará de la ecuación (2.4). Para $d = 2$ y si sólo se consideran tres sumandos, la ecuación (2.4) puede escribirse como:

$$\frac{h^2}{2} f_i^{ff} + \sum_{k=0}^2 a_k f_{i+k} = \frac{h}{2} f_i^{ff} + a_0 f_i + a_1 f_{i+1} + a_2 f_{i+2} \quad (2.5)$$

Como primer paso para hallar los términos a_k , calculamos las expansiones de Taylor de los términos f_{i+1} y f_{i+2} :

$$f_{i+1} = f_i + hf_i^f + \frac{h^2}{2} f_i^{ff} + \frac{h^3}{6} f_i^{(3)} + \frac{h^4}{24} f_i^{(4)} \dots \quad (2.6)$$

$$f_{i+2} = f_i + 2hf_i^f + \frac{(2h)^2}{2} f_i^{ff} + \frac{(2h)^3}{6} f_i^{(3)} + \frac{(2h)^4}{24} f_i^{(4)} \dots \quad (2.7)$$

A continuación reemplazamos las ecuaciones (2.6) y (2.7) en el lado derecho de la ecuación (2.5):

$$\frac{h^2}{2} f_i^{ff} + \sum_{k=0}^2 a_k f_{i+k} = \frac{h^2}{2} f_i^{ff} + a_0 f_i + a_1 \left(f_i + hf_i^f + \frac{h^2}{2} f_i^{ff} + \frac{h^3}{6} f_i^{(3)} \right) + a_2 \left(f_i + 2hf_i^f + 2h^2 f_i^{ff} + \frac{(2h)^3}{6} f_i^{(3)} \right) + \dots$$

Re acomodando los términos se obtiene:

$$\frac{h^2}{2} f_i^{ff} + \sum_{k=0}^2 a_k f_{i+k} = \frac{h^2}{2} f_i^{ff} + (a_0 + a_1 + a_2) f_i + (1 + a_1 h + 2a_2 h) f_i^f + \frac{a_1 h^2}{2} + 2a_2 h^2 f_i^{ff} + \dots$$

El error $O(h^p)$ de la ecuación 2.4 resulta del truncamiento de las expansiones de Taylor en las ecuaciones 2.6 y 2.7. Para mejorar este error se deben igualar a cero los términos que multiplican a f_i , f_i^f y a f_i^{ff} , de modo que se eliminan los coeficientes con los términos de menor orden h^0 , h y h^2 . De este modo resulta el siguiente sistema de ecuaciones:

$$a_0 + a_1 + a_2 = 0$$

$$1 + a_1 h + 2a_2 h = 0$$

$$\frac{a_1 h^2}{2} + 2a_2 h^2 = 0$$

Cuyas solución es: $a_0 = -\frac{3}{2}a_1 = -\frac{2}{h}$, $a_2 = \frac{1}{2h}$. Para evitar la dependencia con el término h se considera $h = 1$ de modo que se tiene: $a_0 = \frac{3}{2}$, $a_1 = -2$ y $a_2 = \frac{1}{2}$. De esta forma sólo quedan los términos que multiplican a h^4 . Finalmente se divide el error entre h^2 y obtenemos el

siguiente esquema de segundo orden para aproximar la segunda derivada de una función en una dimensión:

$$f_i^{\text{ff}} = \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{h^2} + O(h^2)$$

Con este método también se obtiene un esquema explícito como el propuesto en 1.1. El orden de aproximación depende de la cantidad de puntos considerados en el lado derecho de la ecuación. Para generar un esquema implícito utilizaremos la siguiente fórmula propuesta por [15]:

$$\sum_{k=-L}^L \alpha_k \frac{h^d}{d} f_{i+k}^d = \frac{1}{h^d} \sum_{l=-M}^M a_l f_{i+l} + O(h^p) \quad (2.8)$$

El máximo orden de aproximación (el mayor valor para p) puede incrementarse escogiendo valores mayores para M y L , es decir eligiendo más puntos a ambos lados de la ecuación. Como menciona [15], se suelen restringir los valores de L y M a $L \leq 2$ y $M \leq 4$ debido a la mayor complejidad computacional requerida al resolver los esquemas implícitos resultantes.

Escogiendo $d = 2$, $M = 2$, $L = 1$, $\alpha_{-1} = a_1 = \alpha$, $\alpha_0 = 1$, $a_{-1} = a_1 = a$, $a_{-2} = a_2 = \frac{b}{4}$ y $a_0 = \frac{b}{4} + a$ se obtiene el siguiente esquema implícito propuesto por [7]:

$$\alpha f_{i-1}^{\text{ff}} + f_i^{\text{ff}} + \alpha f_{i+1}^{\text{ff}} = \frac{\alpha f_{i+1} - 2\alpha f_i + \alpha f_{i-1}}{h^2} + \frac{b f_{i+2} - 2b f_i + b f_{i-2}}{4h^2} + O(h^p) \quad (2.9)$$

Luego de reemplazar el lado derecho de la ecuación 2.8 por las expansiones de Taylor como se realizó con la ecuación 2.4, se obtiene la siguiente familia de esquemas unidimensionales de cuarto orden:

$$\alpha f_{i-1}^{\text{ff}} + f_i^{\text{ff}} + \alpha f_{i+1}^{\text{ff}} = \frac{\frac{4}{3}(1-\alpha)(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})}{h^2} + \frac{\frac{1}{12}(-1+11\alpha)(f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2})}{h^2} + O(h^4)$$

Si se escoge $\alpha = \frac{2}{15}$ se obtiene un esquema de sexto orden el cual es también propuesto por [21].

Este mismo procedimiento es también explicado y usado por [7], [21] y [22].

Siguiendo la misma lógica, también se pueden hallar aproximaciones para las derivadas primera y tercera como se explica en [15] y en [21]. Para hallar esquemas más amplios, los cuales poseen mayor orden de aproximación al considerar más puntos, existen tablas con los respectivos coeficientes las cuales son dadas por [15] y [22].

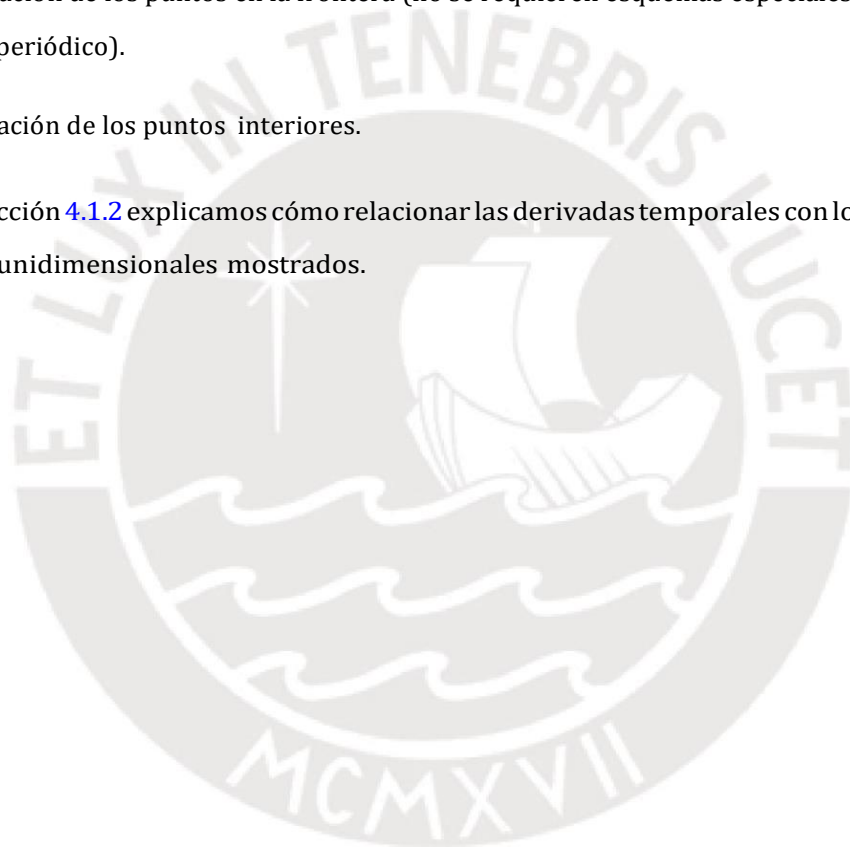
Las ecuaciones 2.4 y 2.8 las hemos usado para hallar esquemas para los puntos interiores de la malla. En el presente trabajo se prefieren los esquemas resultantes a partir de la ecuación 2.8 por ser implícitos, mientras que todos los esquemas resultantes a partir de la ecuación 2.4 son explícitos.

Para los puntos cercanos a las fronteras se pueden usar las mismas fórmulas de las ecuaciones 2.4 y 2.8 pero añadiendo "puntos fantasma" para los valores fuera del dominio como los puntos correspondientes a f_{-1} o f_{-2} . Si la solución es periódica en las fronteras, los valores de f_{-1} y f_{-2} se reemplazan por f_{N-1} y f_{N-2} , donde N es la cantidad de puntos considerados en la malla. Las tablas con los esquemas para los puntos en las fronteras, y con diferentes órdenes de aproximación, son dadas por [15].

Hasta este momento sólo se han aproximado las derivadas para una dimensión espacial. Esta aproximación consta de dos partes:

- Aproximación de los puntos en la frontera (no se requieren esquemas especiales para el caso periódico).
- Aproximación de los puntos interiores.

En la sección 4.1.2 explicamos cómo relacionar las derivadas temporales con los esquemas espaciales unidimensionales mostrados.



Capítulo 3

Estabilidad, Consistencia y Convergencia de un Esquema de Diferencias Finitas

Para poder evaluar si un esquema de diferencias finitas es adecuado para su implementación, sea de alto orden o no, se deben considerar tres condiciones (dadas por [9]):

1. Consistencia:

Es decir que el error de truncamiento del esquema de diferencias finitas cumple: $T(t, h) \rightarrow 0$ si $\Delta t, h \rightarrow 0$

2. El esquema debe tener error de aproximación mayor o igual a 2:

Si $T(t, h) = O((\Delta t)^p, h^q)$, donde p y q son los enteros que corresponden a los exponentes de menor orden de los términos h y Δt en el error de truncamiento, se cumple que $p \geq 2$ y $q \geq 2$. El esquema se considera de alto orden si $p \geq 4$.

3. Convergencia:

Si para cualquier punto (t, x) y cualquier punto sobre la malla (t_i, x_i) se tiene que $t \rightarrow t_i$ y $x \rightarrow x_i$, entonces el esquema de diferencias finitas es convergente en el punto (t_i, x_i) si se aproxima a la solución exacta en el punto (t, x) .

4. Estabilidad:

Un esquema de diferencias finitas es estable con respecto a la norma " k " si existen constantes positivas Δx_0 y Δt_0 , y constantes no negativas K y β tal que:

$$\|U^n\| \leq K e^{\beta n} \|U^0\|$$

para $0 < h < \Delta x_0$, $0 < \Delta t < \Delta t_0$, donde U es la matriz correspondiente a la solución numérica en cada punto de la malla, U^0 es la correspondiente condición inicial.

Esta definición de estabilidad permite a la solución crecer en el tiempo pero sin considerar el número de pasos temporales. Algunas definiciones establecen $\beta = 0$ como la presentada en el capítulo 2 de [7]. [7] también menciona que, en la práctica, la estabilidad se suele analizar usando la técnica de Fourier o de Von-Neumann, dado que los métodos de la energía suelen ser muy complicados y dependen del problema a resolver. El inconveniente de la técnica de Von Neumann es que sólo da resultados de estabilidad fiables para los casos con fronteras periódicas.

Teorema 3.1 (Teorema de Lax-Richtmyer). *Para un esquema de diferencias finitas que aproxima a un problema lineal de valor en la frontera bien condicionado, es necesario y suficiente que el esquema sea estable y consistente para que converja a la solución (ver [20]).*

Teorema 3.2 (Teorema de Equivalencia de Lax). *Un esquema de diferencias finitas consistente de dos niveles $U^{n+1} = A^{-1}BU^n$, para un problema de valor inicial bien condicionado con coeficientes constantes, es convergente sí y sólo si es estable (ver [5]).*

Ambos teoremas indican que, para que un esquema de diferencias finitas converja a la solución, es necesario y suficiente que sea estable y consistente en el espacio y en dos niveles de discretización temporal. Como se verá en las últimas secciones, estos teoremas no excluyen que el esquema elegido sea inestable si $n \rightarrow \infty$.

Capítulo 4

Construcción de un Esquema de Alto Orden Compacto

Al construir un esquema de alto orden compacto se deben considerar dos casos: si la ecuación diferencial a resolver toma valores periódicos en las fronteras del dominio o no; el caso con valores de frontera periódicos se suele llamar problema de valor inicial con fronteras periódicas, en el cual los esquemas de diferencias finitas son mucho más fáciles de construir y analizar que en el caso con fronteras no periódicas. En el presente trabajo analizamos ambos casos.

En la introducción de [2], el autor enumera varios casos en los que se pueden considerar fronteras periódicas, incluyendo casos para la ecuación de onda, y la ecuación de convección-disipación. En el caso específico de la ecuación del calor, las fronteras se pueden considerar periódicas cuando el dominio tiene forma de anillo, toro o cilindro y se desea representar en forma de una línea finita o de forma rectangular.

De forma muy general, [15] enumera los pasos para construir un esquema de alto orden compacto para resolver un problema de valor inicial con valores en la frontera periódicos o no periódicos:

1. Escoger un orden de aproximación.
2. Escoger tamaño de los estenciles.
3. Determinar los coeficientes necesarios para los esquemas de diferencias finitas respectivos.
4. Analizar si los esquemas elegidos son estables mediante el método de Von Neumann.
5. Generar la matriz del lado izquierdo de la ecuación 1.3.

6. Generar la matriz del lado derecho de la ecuación 1.3.
7. Resolver el sistema para obtener las matrices para las derivadas temporales.
8. Actualizar la solución en cada nivel temporal.

Como veremos en las secciones siguientes, estos pasos son suficientes para el caso con fronteras periódicas, pero no lo son para el caso general (fronteras no necesariamente periódicas).

4.1 Caso Periódico

Partiendo de los métodos de diferencias finitas, existe más de una forma de construir un esquema de alto orden compacto bidimensional para el caso de ecuaciones con fronteras periódicas.

4.1.1 Primer Método: Construcción de los Esquema de Alto Orden Compacto Bidimensional (Ineficiente)

El primer método es explicado en la sección 5.3 de [7] y en la sección 2 de [11] poniendo como ejemplo la ecuación de convección difusión unidimensional. En [10] y [11] se emplea para la ecuación de Navier-Stokes bidimensional para flujo regular incompresible, y en [24] se emplea para una ecuación elíptica bidimensional con derivadas mixtas.

Este método se basa en los esquemas de diferencias finitas centrados para aproximar la primera y segunda derivada en la ecuación diferencial a resolver. Como primer paso considera la aproximación para las derivadas espaciales en los puntos interiores, dejando para el paso siguiente el tratamiento de los puntos cercanos en las fronteras, y finalmente realizando el cálculo de las derivadas temporales.

La aproximación de ambas derivadas espaciales es:

$$u_i^f \approx \frac{u_{i-1} + u_{i+1}}{2h} = \delta_x u_i \quad (4.1)$$

$$u_i^{ff} \approx \frac{u_{i-1} - 2u_{i+2} - u_{i+1}}{h^2} = \delta_x^2 u_i \quad (4.2)$$

donde $\delta_x u_i$ y $\delta_x^2 u_i$ son notaciones que se usarán para los esquemas centrados de aquí en adelante.

A continuación expresaremos las ecuaciones (4.1) y (4.2) de manera más exacta mostrando algunos términos de orden superior, las cuales resultan de las siguientes expansiones de Taylor:

$$u_{i+1} = u(x_{i+1}) = u_i + hu_i^f + \frac{h^2 u_i^{ff}}{2} + \frac{h^3 u_i^{(3)}}{6} - \frac{h^4 u_i^{(4)}}{24} + \frac{h^5 u_i^{(5)}}{120} - \frac{h^6 u_i^{(6)}}{720} + \frac{h^7 u_i^{(7)}}{7!} + O(h^8) \quad (4.3)$$

$$u_{i-1} = u(x_{i-1}) = u_i - hu_i^f + \frac{h^2 u_i^{ff}}{2} - \frac{h^3 u_i^{(3)}}{6} + \frac{h^4 u_i^{(4)}}{24} - \frac{h^5 u_i^{(5)}}{120} + \frac{h^6 u_i^{(6)}}{720} - \frac{h^7 u_i^{(7)}}{7!} + O(h^8) \quad (4.4)$$

Para obtener la aproximación de la primera derivada en (4.1), primero se deben restar las ecuaciones (4.3) y (4.4):

$$u_{i+1} - u_{i-1} = 2hu_i^f + \frac{h^3 u_i^{(3)}}{3} + \frac{h^5 u_i^{(5)}}{60} + \frac{h^7 u_i^{(7)}}{2 * 7!} + O(h^8) \quad (4.5)$$

A continuación se despeja u_i^f en función de $\delta_x u_i$:

$$2hu_i^f = u_{i+1} - u_{i-1} - \frac{h^3 u_i^{(3)}}{3} - \frac{h^5 u_i^{(5)}}{60} - \frac{h^7 u_i^{(7)}}{2 * 7!} + O(h^8) \quad (4.6)$$

de donde despejando u_i^f obtenemos

$$\begin{aligned} u_i^f &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1} - \frac{h^3 u_i^{(3)}}{3} - \frac{h^5 u_i^{(5)}}{60} - \frac{h^7 u_i^{(7)}}{2 * 7!} + O(h^8)}{2h} \\ &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - \frac{h^2 u_i^{(3)}}{6} - \frac{h^4 u_i^{(5)}}{120} - \frac{h^6 u_i^{(7)}}{2 * 7!} + O(h^7) \\ &= \delta_x u_i - \frac{h^2 u_i^{(3)}}{6} - \frac{h^4 u_i^{(5)}}{120} + O(h^6) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Para obtener la aproximación de la segunda derivada en la ecuación (4.2), se deben sumar las ecuaciones (4.3) y (4.4):

$$u_{i+1} + u_{i-1} = 2u_i + h^2 u_i^{ff} + \frac{h^4 u_i^{(4)}}{12} + \frac{h^6 u_i^{(6)}}{360} + O(h^8) \quad (4.8)$$

y despejar u_i^{ff} en función de $\delta_x^2 u_i$. De esta forma se tiene:

$$h^2 u_i^{ff} = u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i - \frac{h^4 u_i^{(4)}}{12} - \frac{h^6 u_i^{(6)}}{360} + O(h^8)$$

$$u_i^{ff} = \frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i - \frac{h^4 u_i^{(4)}}{12} - \frac{h^6 u_i^{(6)}}{360} + O(h^8)}{h^2}$$

$$u_i^{ff} = \frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{h^2} - \frac{h^2 u_i^{(4)}}{12} - \frac{h^4 u_i^{(6)}}{360} + O(h^6)$$

$$u_i^{ff} = \delta_x^2 u_i - \frac{h^2 u_i^{(4)}}{12} - \frac{h^4 u_i^{(6)}}{360} + O(h^6) \quad (4.9)$$

Se puede comprobar en las ecuaciones (4.8) y (4.9) que los esquemas centrados tienen error de aproximación de segundo orden $O(h^2)$ si sólo se consideran los términos $\delta_x u_i$ y $\delta_x^2 u_i$. Un error de aproximación $O(h^2)$ puede ser inadecuado para algunas aplicaciones, por ello hemos calculado las ecuaciones (4.8) y (4.9) para luego obtener aproximaciones de las derivadas primera y segunda incluyendo más términos de las expansiones de Taylor, lo que garantiza un mayor orden de aproximación.

A continuación ilustraremos la construcción de un esquema de alto orden compacto para una ecuación diferencial empleando las ecuaciones (4.8) y (4.9). Como primer ejemplo, consideraremos la siguiente ecuación diferencial en un dominio infinito (sin condiciones de frontera dadas), la cual sólo implica una dimensión espacial:

$$-a \frac{d^2 u}{dx^2} + b \frac{du}{dx} = s(x) \tag{4.10}$$

Donde $s(x)$ es una función conocida, y a y b son constantes dadas.

Los pasos son los siguientes:

Paso 1: En la ecuación diferencial a aproximar, reemplazamos las derivadas de primer y segundo orden por los esquemas centrados (4.1) y (4.2) respectivos. Para la ecuación (4.10), el esquema centrado correspondiente es:

$$-a \delta_x^2 u_i + b \delta_x u_i = s_i + O(h^2) \tag{4.11}$$

donde $s_i = s(x_i)$.

Paso 2: Reemplazamos las ecuaciones obtenidas en (4.8) y (4.9) en la ecuación (4.11), de tal forma que obtenemos una aproximación de $O(h^4)$.

El resultado para este ejemplo es:

$$-a \left[\delta_x^2 u_i - \frac{\lambda^2}{12} u_i^{(4)} \right] + b \left[\delta_x u_i - \frac{\lambda}{6} u_i^{(3)} \right] = s_i + O(h^4) \tag{4.12}$$

Paso 3: Derivamos la ecuación diferencial original tantas veces como sea necesario para hallar las derivadas cuarta y tercera que aparecen en el paso anterior.

Para la ecuación 4.9, la tercera derivada es:

$$-a u^{(3)} + b u_i^{ff} = s_i^f$$

$$u^{(3)} = \frac{b}{a} u_{i,ff} - \frac{1}{a} s_i^f \quad (4.13)$$

Para la cuarta derivada obtenemos:

$$-au^{(4)} - bu^{(3)} = s_i^{ff} \quad (4.14)$$

Reemplazando (4.12) en 4.13:

$$\begin{aligned} au^{(4)} - \frac{b^2}{a} u_{i,ff} - \frac{b}{a} s_i^f &= s_i \\ u^{(4)} &= \frac{b^2}{a^2} u_{i,ff} - \frac{b}{a^2} s_i^f - \frac{1}{a} s_i \end{aligned} \quad (4.15)$$

Hasta aquí el objetivo ha sido expresar las derivadas más altas en función de sólo las derivadas primera y segunda.

Paso 4: Reemplazamos las expresiones de las derivadas obtenidas en (4.14) y (4.15) en la ecuación (4.12).

En la ecuación de ejemplo se obtiene:

$$\begin{aligned} -a \left(\delta_x^2 u_i - \frac{h^2}{12} \frac{b^2}{a^2} \delta_x^2 u_i - \frac{b}{a^2} s_i^f - \frac{s_i^{ff}}{a} \right) + b \delta_x u_i - \frac{h^2}{6} \frac{b}{a} \delta_x^2 u_i - \frac{s_i^f}{a} &= s_i + O(h^4) \\ -a \delta_x^2 u_i - \frac{h^2 b^2}{12 a} \delta_x^2 u_i - \frac{h^2 b}{12 a} s_i^f - \frac{h^2}{12} s_i^{ff} + b \delta_x u_i - \frac{h^2 b^2}{6 a} \delta_x^2 u_i + \frac{h^2 b}{6} \frac{s_i^f}{a} &= s_i + O(h^4) \\ -a \delta_x^2 u_i + \frac{h^2 b^2}{12 a} \delta_x^2 u_i - 2 \frac{h^2 b^2}{12 a} \delta_x^2 u_i + b \delta_x u_i &= -2 \frac{h^2 b}{12 a} s_i^f + \frac{h^2 b}{12 a} s_i^f + \frac{h^2}{12} s_i^{ff} + s_i + O(h^4) \\ -a \left(1 + \frac{b^2 h^2}{12 a^2} \delta_x^2 u_i + b \delta_x u_i \right) &= s_i - \frac{b h^2}{12 a} s_i^f + \frac{h^2}{12} s_i^{ff} \end{aligned}$$

Resultando un esquema de orden $O(h^4)$ en función de $\delta_x^2 u_i$ y $\delta_x u_i$. Los valores de s_i y sus derivadas son conocidos.

Como segundo ejemplo se propone en [7] la siguiente ecuación del calor:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = s(x,y)$$

Donde $s(x, y)$ es una fuente de calor conocida.

En [7], y repitiendo el mismo método propuesto, se desarrolla el correspondiente esquema de Crank-Nickolson:

$$\begin{aligned} & \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \frac{h^2}{12\Delta t} [\delta_x^2(u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n) + \delta_y^2(u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n)] - \\ & \frac{a}{2} [\delta_x^2(u_{ij}^{n+1} + u_{ij}^n) + \delta_y^2(u_{ij}^{n+1} + u_{ij}^n) + \frac{h^2}{6} \delta_x \delta_y^2(u_{ij}^{n+1} + u_{ij}^n)] = \\ & \frac{1}{2} (s_{ij}^{n+1} + s_{ij}^n) + \frac{h^2 \partial^2}{24\partial x^2} (s_{ij}^{n+1} + s_{ij}^n) + \frac{h^2 \partial^2}{24\partial y^2} (s_{ij}^{n+1} + s_{ij}^n) \end{aligned} \quad (4.16)$$

Este esquema sólo es mencionado, pero no implementado, por los autores. Hasta aquí, hemos demostrado cómo obtener los esquemas unidimensionales a partir de los cuales se construirán las matrices para hallar la solución de la ecuación 1.3.

Construcción de las matrices A y B para los Esquema de Alto Orden Compacto Bidimensional

Para generar las matrices A y B para el esquema de Crank-Nicolson de cuarto orden de la ecuación 4.16 se debe adaptar el procedimiento mencionado en [16], [17] y [20] para este esquema más complejo. Este procedimiento está explicado en la sección 11.7 de [16] pero aplicado para el esquema explícito de segundo orden, en la sección 5.8 de [17] el mismo procedimiento se usa para el esquema implícito de sólo segundo orden, y en [20] se usa para el esquema de Crank-Nicolson de segundo orden.

Por otro lado, en el caso bidimensional, la construcción de las matrices A y B (o matrices del lado izquierdo o LHS y matriz del lado derecho o RHS) de la ecuación 1.3 no es tan directa como en el caso unidimensional. En general, para construir estas matrices para el caso bidimensional se desea colocar la la ecuación 1.3 de forma que implique productos de matrices con vectores en lugar de productos de matrices. Desde el punto de vista computacional, es más eficiente resolver sistemas de esta manera.

Para ilustrar los pasos a seguir se considerará una malla espacial de 4×3 puntos:

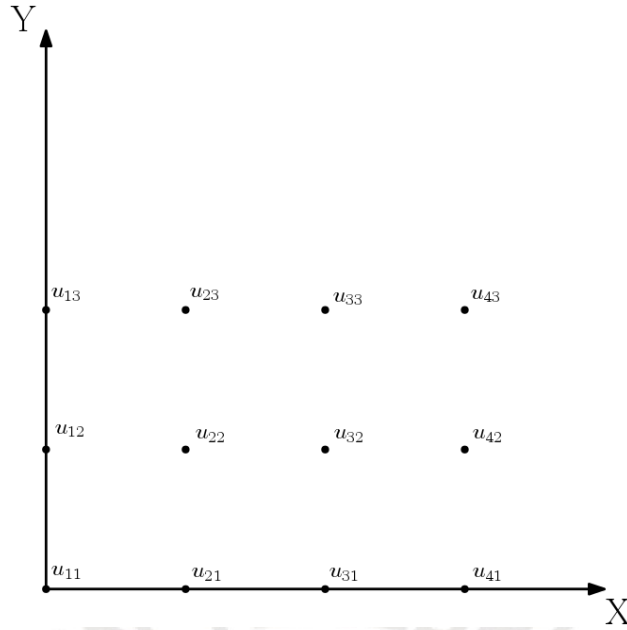


Figura 4.1: Ejemplo de malla de 12 puntos espaciales

Paso 1: Obtener los esquemas del lado izquierdo o LHS y del lado derecho o RHS:

El esquema LHS corresponderá al nivel temporal $n + 1$, cuyos valores son desconocidos.

El esquema RHS corresponde al nivel temporal n el cual es el último nivel temporal para el que ya se ha calculado la solución.

De esta forma, los puntos correspondientes al esquema LHS son: $u_{ij}^{n+1}, u_{i+1,j+1}^{n+1}, u_{i+1,j-1}^{n+1}, u_{i-1,j+1}^{n+1}, u_{i-1,j-1}^{n+1}, u_{i+1,j}^{n+1}, u_{i-1,j}^{n+1}, u_{i,j+1}^{n+1}$ y $u_{i,j-1}^{n+1}$.

Para el esquema del lado derecho o RHS son los puntos: $u_{ij}^n, u_{i+1,j+1}^n, u_{i+1,j-1}^n, u_{i-1,j+1}^n, u_{i-1,j-1}^n, u_{i+1,j}^n, u_{i-1,j}^n, u_{i,j+1}^n$ y $u_{i,j-1}^n$.

En la ecuación 4.16, y considerando una fuente de calor igual a cero, se obtiene el siguiente esquema LHS:

$$\begin{aligned}
 & \cdot \frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{3\Delta t} + \frac{2a}{h^2} - \frac{a}{3h^2} \sum u_{ij}^{n+1} \\
 & \cdot \frac{1}{12\Delta t} - \frac{a}{2h^2} + \frac{a}{6h^2} \sum u_{i+1,j}^{n+1} \\
 & \cdot \frac{1}{12\Delta t} - \frac{a}{2h^2} + \frac{a}{6h^2} \sum u_{i-1,j}^{n+1} \\
 & \cdot \frac{1}{12\Delta t} - \frac{a}{2h^2} + \frac{a}{6h^2} \sum u_{i,j+1}^{n+1} \\
 & \cdot \frac{1}{12\Delta t} - \frac{a}{2h^2} + \frac{a}{6h^2} \sum u_{i,j-1}^{n+1} \\
 & - \frac{a}{12h^2} u_{i+1,j+1}^{n+1} + \frac{a}{12h^2} u_{i-1,j-1}^{n+1} + \frac{a}{12h^2} u_{i+1,j-1}^{n+1} + \frac{a}{12h^2} u_{i-1,j+1}^{n+1}
 \end{aligned}$$

El respectivo esquema del lado derecho o RHS es:

$$\begin{aligned}
 & \cdot \frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{3\Delta t} - \frac{2a}{h^2} + \frac{a}{3h^2} u_{i,j}^n \\
 & \cdot -\frac{1}{12\Delta t} + \frac{a}{2h^2} - \frac{a}{6h^2} u_{i+1,j}^n \\
 & \cdot -\frac{1}{12\Delta t} + \frac{a}{2h^2} - \frac{a}{6h^2} u_{i-1,j}^n \\
 & \cdot -\frac{1}{12\Delta t} + \frac{a}{2h^2} - \frac{a}{6h^2} u_{i,j+1}^n \\
 & \cdot -\frac{1}{12\Delta t} + \frac{a}{2h^2} - \frac{a}{6h^2} u_{i,j-1}^n \\
 & \frac{a}{12h^2} u_{i+1,j+1}^n + \frac{a}{12h^2} u_{i-1,j-1}^n + \frac{a}{12h^2} u_{i+1,j-1}^n + \frac{a}{12h^2} u_{i-1,j+1}^n
 \end{aligned}$$

Con objetivo de simplificar las expresiones correspondientes a la ecuación 4.16, se realizan los siguientes reemplazos:

Para el esquema LHS:

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= \frac{1}{\Delta t} - \frac{1}{3\Delta t} + \frac{2a}{h^2} - \frac{a}{3h^2} \\
 \beta_1 &= \frac{1}{12\Delta t} - \frac{a}{2h^2} + \frac{a}{6h^2} \\
 \gamma_1 &= \frac{a}{12h^2}
 \end{aligned}$$

Para el esquema RHS:

$$\begin{aligned}
 \alpha_2 &= \frac{1}{\Delta t} + \frac{1}{3\Delta t} - \frac{2a}{h^2} + \frac{a}{3h^2} \\
 \beta_2 &= -\frac{1}{12\Delta t} + \frac{a}{2h^2} - \frac{a}{6h^2} \\
 \gamma_2 &= \frac{a}{12h^2}
 \end{aligned}$$

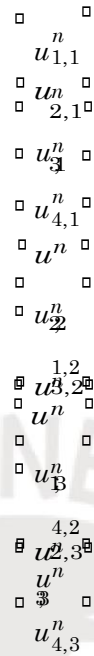
Para los siguientes pasos utilizamos las mismas variables α, β, γ para ambos esquemas, porque la construcción de las matrices A y B es similar como se verá más adelante.

Paso 2: Los puntos de la malla deben acomodarse en forma de un vector:

De preferencia se debe seguir el orden lexicográfico. Siguiendo este orden, las dimensiones espaciales se organizarán de la siguiente manera (considerando una malla de $M \times N$ puntos):

$$\{u_{1,1} u_{2,1} \dots u_{M,1} \mid u_{1,2} u_{2,2} \dots u_{M,2} \mid \dots \mid u_{1,N} u_{2,N} u_{3,N} \dots u_{M,N}\}$$

Re acomodando como vector columna, los puntos de la malla de ejemplo quedarán como sigue:



Donde $u^n(i, j)$ o también u_{ij}^n es el valor de la ecuación diferencial en cada punto (x_i, y_j) para el nivel temporal n .

Paso 3: Construimos las submatrices A_1 y B_1 de dimensiones $M \times N$ para los esquemas LHS y RHS correspondientes a los términos para un valor fijo de j :

La forma de las matrices A_1 y B_1 resulta de considerar cada fila como un elemento de la dimensión x , y cada columna como el recorrido en la dirección y :

En la submatriz A_1 se ubicarán los coeficientes que multiplican a los términos u_{ij}^{n+1} , $u_{i-1,j}^{n+1}$ y $u_{i+1,j}^{n+1}$. En la submatriz B_1 se ubicarán los coeficientes que multiplican a los términos u_{ij}^n , $u_{i-1,j}^n$ y $u_{i+1,j}^n$.

Para ubicar cada coeficiente del esquema elegido en su correspondiente entrada en la matriz A_1 y B_1 , empezamos con el coeficiente que multiplica al término u_{ij}^{n+1} , el que se ubicará en la diagonal principal de la matriz A_1 . Del mismo modo el coeficiente que multiplica al término u_{ij}^n se ubicará en la diagonal principal de la matriz B_1 . Las entradas en las diagonales de estas matrices corresponden a las coordenadas (i, j) , donde se cumple $i = j$. En los esquemas LHS y RHS de la ecuación 4.16, son los términos α . Respectivamente, las diagonales inferior en A_1 y B_1 corresponden a las coordenadas $(i - 1, j)$ y las diagonales superiores a la coordenada $(i + 1, j)$. Ubicaremos en las diagonales inferior y superior de la matriz A_1 los coeficientes que multiplican a los términos

$u_{i-1,j}^{n+1}$, $u_{i+1,j}^{n+1}$ y en la diagonales inferior y superior de la matriz B_1 los coeficientes que multiplican a $u_{i-1,j}^n$ y $u_{i+1,j}^n$. En los esquemas LHS y RHS considerados, son los términos β .

Ambas matrices, A_1 y B_1 resultan como se muestra a continuación:

$$\begin{array}{cccc}
 \square & & & \square \\
 & \alpha & \beta & \\
 \square & \beta & \alpha & \beta & \square \\
 & & \beta & \alpha & \beta & \square \\
 \square & & & & & \beta & \alpha
 \end{array} \tag{4.17}$$

Donde las entradas omitidas son cero.

$\alpha = \alpha_1, \beta = \beta_1$ para el nivel n , y $\alpha = \alpha_2, \beta = \beta_2$ para el nivel $n + 1$.

En el caso unidimensional, las matrices A_1 y B_1 son las que se utilizarían para resolver la ecuación 1.3 como se explica en la sección 12.3 de [13] y en la sección 1.2.5 de [14].

Como las fronteras son periódicas, ya considerando una malla más amplia y los puntos cercanos a las fronteras, las matrices A_1 y B_1 finalmente quedan:

$$\begin{array}{cccc}
 \square & & & \square \\
 & \alpha & \beta & \beta \\
 \square & \beta & \alpha & \beta & \square \\
 & & \beta & \alpha & \beta & \square \\
 \square & & & & & \beta & \beta & \alpha
 \end{array}$$

Esto se explica con más detalle en la sección 9.1 de [37].

Para el caso bidimensional continuamos a partir de 4.17 con los siguientes pasos:

Paso 4: Definimos dos matrices A y B con dimensiones $(M \times N)^2$ para el esquema LHS y RHS respectivamente.

Paso 5: Ubicamos los coeficientes que multiplican a los términos $u_{ij}^{n+1}, u_{i-1,j}^{n+1}, u_{i+1,j}^{n+1}, u_{ij}^n,$

$$u_{i-1,j}^n \text{ y } u_{i+1,j}^n.$$

Continuando con la lógica del paso 3, los coeficientes para los términos $u_{ij}^{n+1}, u_{i-1,j}^{n+1}$ y

$u_{i+1,j}^{n+1}$ se ubican en las diagonales inferior, principal y superior de la matriz A, y los coeficientes para los términos $u_{ij}^n, u_{i-1,j}^n$ y $u_{i+1,j}^n$ se ubican en las diagonales inferior, principal y superior de la matriz B.

Si sólo se considerara los esquemas dados en [16], [17] y [20], las matrices A y B resultarían como sigue:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & \alpha & \beta & & & & \\
 \square & & & & & & \square \\
 & \beta & \alpha & \beta & & & \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & \beta & \alpha & \beta & & \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & \beta & \alpha & \beta & \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & & & & \beta & \alpha \\
 \square & & & & & & \square
 \end{array}$$

Visto como bloques, la forma será (se han simplificado las submatrices por motivos de claridad):

$$\begin{array}{ccccccc}
 \square & \alpha & \beta & & & & \square \\
 \square & & & & & & \square \\
 \square & \beta & \alpha & \beta & & & \square \\
 & & & & & & \\
 & & & \beta & \alpha & \beta & \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & \alpha & \beta & \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & & \alpha & \beta \\
 & & & & & & & \beta & \alpha & \beta \\
 \square & & & & & & \square \\
 & & & & & & & \beta & \alpha \\
 \square & & & & & & \square
 \end{array}$$

Es decir, la matriz A tendrá en sus diagonales a la matriz A_1 :

$$\begin{array}{cccc}
 \square & A_1 & & \square \\
 & & A_1 & \\
 \square & & & \square \\
 & & & A_1
 \end{array}$$

Y la matriz B será:

$$\begin{array}{cccc}
 \square & B_1 & & \square \\
 & & B_1 & \\
 \square & & & \square \\
 & & & B_1
 \end{array}$$

Paso 6: Ubicamos los coeficientes que multiplican a los términos $u_{i,j-1}^{n+1}, u_{i,j+1}^{n+1}, u_{i,j-1}^n$ y $u_{i,j+1}^n$.

Estos coeficientes deben colocarse en las entradas correspondientes a las coordenadas $(i, j + 1)$ y $(i, j - 1)$ en las matrices A y B .

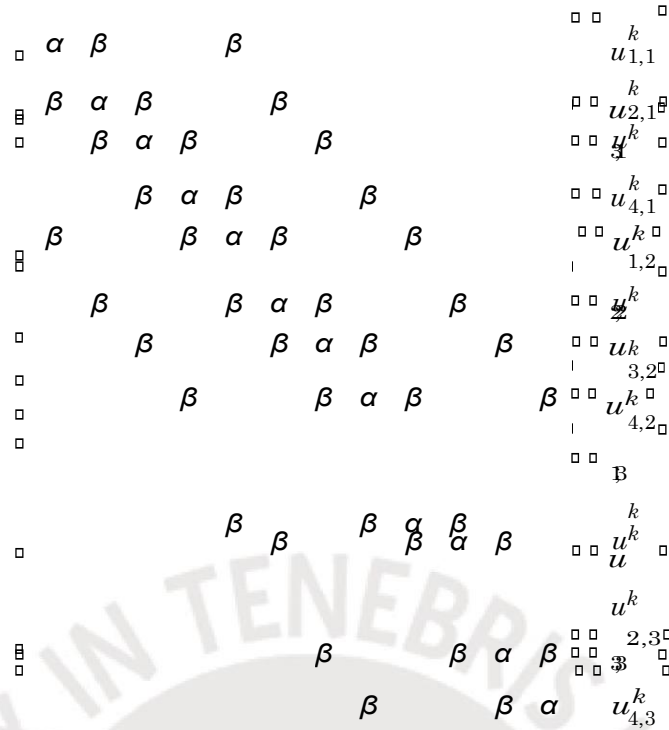
La ubicación de estas coordenadas se muestra en la siguiente figura:



Los términos d indican la ubicación de los coeficientes para la coordenada $(i, j + 1)$ y los términos g indican donde se ubicarán los coeficientes la coordenada $(i, j - 1)$. En la matriz A serán los coeficientes que multiplican al término $u_{i,j-1}^{n+1}$, y en la matriz B serán los coeficientes que multiplican al término $u_{i,j-1}^n$ los que se ubicarán donde indica g . De la misma manera, ubicaremos en las matrices A y B los coeficientes que multiplican a los términos $u_{i,j+1}^{n+1}$ y $u_{i,j+1}^n$ donde indica d .

Esta disposición resulta de la multiplicación de las matrices A y B por el vector columna del paso 2.

En el ejemplo considerado, las matrices LHS y RHS resultantes tendrán dimensiones $(3x4)^2$ y la siguiente forma, para ambos niveles temporales n y $n + 1$:



Donde $k \in \{n, n + 1\}$, y como en los casos anteriores $\alpha = \alpha_1, \beta = \beta_1, \gamma = \gamma_1$ para el nivel n , y $\alpha = \alpha_2, \beta = \beta_2, \gamma = \gamma_2$ para el nivel $n + 1$.

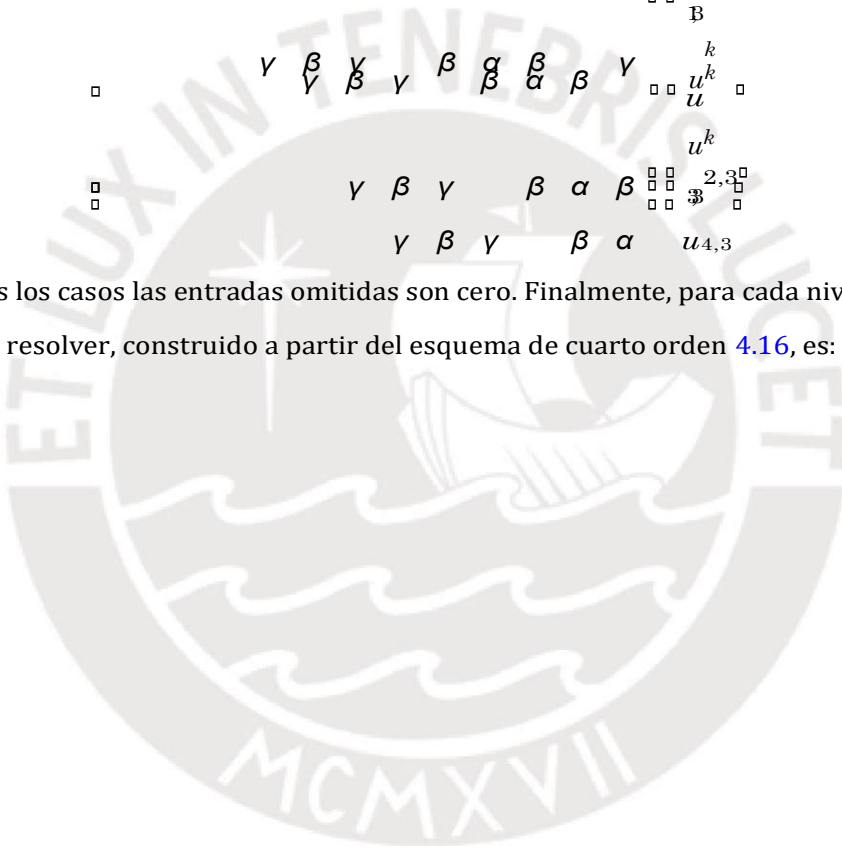
Paso 7: Ubicamos los coeficientes que multiplican a los términos $u_{i+1,j-1}^{n+1}, u_{i+1,j+1}^{n+1}, u_{i+1,j-1}^{n+1}, u_{i+1,j+1}^{n+1}$ y $u_{i+1,j+1}^n$.

Estos coeficientes deben colocarse en las entradas de las matrices A y B correspondientes a las coordenadas $(i + 1, j + 1), (i + 1, j - 1), (i - 1, j + 1)$ y $(i - 1, j - 1)$ en las matrices A y B . Como referencia se puede utilizar la ubicación de los términos β del paso anterior. Como éstos ya se han colocado en las entradas correspondientes a las coordenadas $(i, j + 1)$ y $(i, j - 1)$ es fácil notar que las coordenadas para los demás términos se ubicarán en las dos diagonales superiores e inferiores a las diagonales con los términos β . Estos últimos términos se indican

con la letra γ y su ubicación en ambas matrices se muestra en la siguiente figura:

$$\begin{array}{cccccc}
 \square & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & & \square & \square & \square & \\
 & & & & & & & & & & & u_{1,1}^k \\
 \square & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & & \square & \square & u_{2,1}^k \\
 \square & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & \square & \square & u_{2,1}^k \\
 & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & & u_{4,1}^k \\
 \square & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u_{4,1}^k \\
 & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u_{1,2}^k \\
 \square & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u^k \\
 & & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u^k \\
 & & & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u^k \\
 & & & & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u^k \\
 & & & & & & & & & & & & & & & & u^k \\
 & & & & & & & & & & & & & & & & u^k \\
 \square & & & & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u^k \\
 & & & & & & & & & & & & & & & & u^k \\
 \square & & & & & & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u^{2,3} \\
 & & & & & & & \gamma & \beta & \gamma & & \beta & \alpha & \beta & & \gamma & \beta & \gamma & u_{4,3}
 \end{array}$$

En todos los casos las entradas omitidas son cero. Finalmente, para cada nivel temporal, el sistema a resolver, construido a partir del esquema de cuarto orden 4.16, es:



En [20] se mencionan tres condiciones que debe cumplir un esquema de diferencias finitas para que sea computacionalmente eficiente:

1. Debe tener aproximación $O(h^2)$ o más, donde h es el tamaño de paso de la discretización espacial.
2. Debe ser incondicionalmente estable.
3. Para resolver el sistema resultante, el número de operaciones a realizar por nivel temporal debe ser igual o inferior a N^{d+1} , donde d es el número de dimensiones espaciales.

El esquema implícito construido en los pasos anteriores no cumple la tercera condición. En el caso de los esquemas explícitos, se comprueba en [12] que no cumplen las dos primeras condiciones.

En la siguiente sección construiremos un esquema para la ecuación del calor bidimensional con fronteras periódicas que cumpla las tres condiciones.

4.1.2 Segundo Método: Construcción de los Esquema de Alto Orden Compacto Bidimensional (Eficiente)

A partir de los esquemas unidimensionales construidos en el capítulo 2, y haciendo $f_i = u(x_i) = u_i$, se construirán las matrices que resuelven el sistema $Au^{\text{ff}} = -1 B u$.

El método para construir las matrices A y B es explicado en [15] y es el siguiente:

1. Se elige el esquema unidimensional para los puntos interiores para aproximar la segunda derivada correspondiente al orden de aproximación deseado.
2. Se eligen los esquemas para los puntos en la frontera siguiendo los mismos criterios que en el paso anterior (en el caso periódico se usan los mismos esquemas de los puntos interiores).
3. Se ubican los coeficientes en las matrices correspondientes.

El paso 3 se realiza siguiendo la misma lógica empleada en la construcción de las matrices para el caso unidimensional en la sección anterior. En la matriz A ubicaremos los coeficientes LHS, y en la matriz B los coeficientes RHS. Ubicaremos los coeficientes que acompañan a los términos u_i en la diagonal principal de cada matriz para los puntos interiores. Los coeficientes de los términos u_{i+1} y u_{i-1} se ubicarán en las diagonales superior e inferior respectivamente.

Para el caso del esquema de la fórmula 2.9, y considerando una malla unidimensional de 10 puntos, las matrices resultan como:

$$A = \begin{pmatrix}
 1 & \alpha & & & & & & & & \\
 \alpha & 1 & \alpha & & & & & & & \\
 & \alpha & 1 & \alpha & & & & & & \\
 & & \alpha & 1 & \alpha & & & & & \\
 & & & \alpha & 1 & \alpha & & & & \\
 & & & & \alpha & 1 & \alpha & & & \\
 & & & & & \alpha & 1 & \alpha & & \\
 & & & & & & \alpha & 1 & \alpha & \\
 & & & & & & & \alpha & 1 & \alpha \\
 & & & & & & & & \alpha & 1
 \end{pmatrix} \tag{4.18}$$

$$B = \begin{pmatrix}
 -2(a+b) & a & b & & & & & & & \\
 a & -2(a+b) & a & b & & & & & & \\
 b & a & -2(a+b) & a & b & & & & & \\
 b & a & a & -2(a+b) & a & b & & & & \\
 b & a & b & a & -2(a+b) & a & b & & & \\
 & & & b & a & -2(a+b) & a & b & & \\
 & & & & b & a & -2(a+b) & a & b & \\
 & & & & & b & a & -2(a+b) & a & b \\
 & & & & & & b & a & -2(a+b) & a \\
 & & & & & & & b & a & -2(a+b)
 \end{pmatrix} \tag{4.19}$$

El sistema a resolver será:

$$\begin{pmatrix}
 1 & \alpha & & & & & & & & \\
 \alpha & 1 & \alpha & & & & & & & \\
 & \alpha & 1 & \alpha & & & & & & \\
 & & \alpha & 1 & \alpha & & & & & \\
 & & & \alpha & 1 & \alpha & & & & \\
 & & & & \alpha & 1 & \alpha & & & \\
 & & & & & \alpha & 1 & \alpha & & \\
 & & & & & & \alpha & 1 & \alpha & \\
 & & & & & & & \alpha & 1 & \alpha \\
 & & & & & & & & \alpha & 1
 \end{pmatrix} \begin{pmatrix}
 u_1^{ff} \\
 u_2^{ff} \\
 u_3^{ff} \\
 u_4^{ff} \\
 u_5^{ff} \\
 u_6^{ff} \\
 u_7^{ff} \\
 u_8^{ff} \\
 u_9^{ff} \\
 u_{10}^{ff}
 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
 \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \\
 \end{pmatrix}$$

El Método ADI

El objetivo de utilizar este método es implementar el caso eficiente y relacionar las derivadas temporales con los esquemas unidimensionales espaciales.

Este método optimiza el cálculo de la solución numérica de una ecuación diferencial bidimensional resolviendo primero las derivadas de forma separada para cada dimensión espacial, y luego calculando las derivadas temporales de modo que sean funciones de las derivadas espaciales ya obtenidas. Existe más de una forma de implementar el método ADI como se menciona en [22], y tal como muestra [21] se puede emplear para los esquemas implícitos de segundo orden.

En [25] se muestra cómo se obtienen las relaciones entre las derivadas temporales y las espaciales resolviendo las siguientes ecuaciones en el orden indicado:

$$\begin{aligned} \text{Paso 1: } & 1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2 \sum u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = 1 - \frac{r_y}{2} \delta_y^2 \sum u_{ij}^n \quad \text{Recorrido en la dirección } x \\ \text{Paso 2: } & 1 - \frac{r_y}{2} \delta_y^2 \sum u_{ij}^{n+1} = 1 - \frac{r_x}{2} \delta_x^2 \sum u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \quad \text{Recorrido en la dirección } y \end{aligned}$$

Donde $r_x = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ y $r_y = \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}$. Los operadores δ_x^2 y δ_y^2 son los operadores de los esquemas centrados de segundo orden definidos en la ecuación 4.2 para las coordenadas espaciales (x, y) respectivas.

Para obtener un orden de aproximación mayor, en [7] se implementa el método ADI aplicando el método de Peaceman-Rachford (ver [12]) con los esquemas de alto orden compacto ya obtenidos.

el método de Peaceman-Rachford se basa en las siguientes igualdades:

$$\frac{u_{ij}^{n+1/2} - u_{ij}^n}{0.5\Delta t} = c[(u_{xx})_{ij}^{n+1/2} + (u_{yy})_{ij}^n] + (F)_{ij}^{n+1/2} \quad (4.21)$$

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^{n+1/2}}{0.5\Delta t} = c[(u_{xx})_{ij}^{n+1/2} + (u_{yy})_{ij}^{n+1}] + (F)_{ij}^{n+1/2} \quad (4.22)$$

A continuación se construyen las matrices A y B siguiendo los pasos de la sección anterior. En este caso empleamos los esquemas de sexto orden propuestos en el capítulo 5 de [7] y en [21]:

$$\alpha u_{i-1}^{ff} + u_i^{ff} + \alpha u_{i+1}^{ff} = \frac{b}{4} (u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}) + a(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})$$

las matrices A y B resultantes tiene la misma estructura que las matrices 4.18 y 4.19 del caso eficiente.

Estas matrices se usarán para hallar aproximaciones para u_{xx} y u_{yy} . De esta forma los autores en [7] implementan un método de solución para la ecuación parabólica:

$$u_t = c(u_{xx} + u_{yy}) + F(x, y, t)$$

Donde c es una constante y $F(x, y, t)$ es una fuente de calor conocida. Para aplicar el método ADI se deben resolver las siguientes ecuaciones (en notación matricial):

Paso 1: $I_x - \frac{cr_x}{2} A^{-1} B \sum u_j^{n+\frac{1}{2}} = I_x + \frac{cr_y}{2} A^{-1} B \sum u_j^n + \frac{\Delta t}{2} F_j^{n+\frac{1}{2}}$ Recorrido en la dirección x

Paso 2: $I_y - \frac{cr_y}{2} C^{-1} D \sum u_i^{n+1} = I_y + \frac{cr_x}{2} C^{-1} D \sum u_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} F_i^{n+\frac{1}{2}}$ Recorrido en la dirección y

En las que si se reemplaza:

$$(u_{xx})_j = \frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B u_j$$

$$(u_{yy})_i = \frac{1}{(\Delta y)^2} C^{-1} D u_i$$

Resultan dos funciones que dependen de ambas derivadas espaciales unidimensionales. La igualdad es válida ya que estas derivadas se aproximan con los esquemas elegidos para construir las matrices $A^{-1}B$ y $C^{-1}D$:

Paso 1: $I_x - \frac{cr_x}{2} A^{-1} B \sum u_j^{n+\frac{1}{2}} = u_j^n + \frac{c\Delta t}{2} (u_{xx})_j^n + \frac{\Delta t}{2} F_j^{n+\frac{1}{2}}$ Recorrido en la dirección x

Paso 2: $I_y - \frac{cr_y}{2} C^{-1} D \sum u_i^{n+1} = u_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{c\Delta t}{2} (u_{yy})_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} F_i^{n+\frac{1}{2}}$ Recorrido en la dirección y

Las matrices C y D se obtienen a partir de los esquemas unidimensionales aplicados a la coordenada y . Si se elige $\Delta x = \Delta y$ entonces $A = C$ y $B = D$.

Análisis de Estabilidad del Método ADI: Caso Periódico

El análisis de estabilidad de los esquemas del método ADI se realiza empleando el método de Fourier (Von-Neumann) en los capítulos 2 y 5 de [7]. Para simplificar se asume que la fuente de calor es cero:

Las filas de las matrices A y B tienen la estructura:

$$A_i = \alpha u_{i-1} + u_i + \alpha u_{i+1} \tag{4.23}$$

$$B_i = \frac{b}{4} (u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}) + a(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) \quad (4.24)$$

Sea: $u_i^n = \xi^n e^{I(w_x i + w_y j)}$ la solución numérica, con $I = \sqrt{-1}$, ángulos de fase $w_x = \frac{2\pi\delta x}{l_x}$, $w_y = \frac{2\pi\delta y}{l_y}$, y longitudes de onda l_x y l_y .

Además se tiene la siguiente igualdad:

$$u_i = e^{Iw_x i}$$

Empleando la fórmula de Euler, se verifica que:

Para el lado izquierdo del esquema:

$$Ae^{Iw_x i} = e^{Iw_x i} (ae^{Iw_x} + 1 + ae^{-Iw_x}) = e^{Iw_x i} (2a \cos w_x + 1)$$

Para el lado derecho:

$$Be^{Iw_x i} = e^{Iw_x i} \frac{b}{4} (e^{2Iw_x} - 2 + e^{-2Iw_x}) + a(e^{Iw_x} - 2 + e^{-Iw_x})$$

$$Be^{Iw_x i} = e^{Iw_x i} \frac{b}{2} (\cos 2w_x - 1) + 2a(\cos w_x - 1)$$

$$Be^{Iw_x i} = e^{Iw_x i} (-b(\sin w_x)^2 - 4a(\sin \frac{w_x}{2})^2)$$

Entonces se tiene:

$$(u_{xx})_{ij}^{n+1/2} = \frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B u_{ij}^{n+1/2} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \frac{-b \sin^2 w_x - 4a \sin^2 \frac{w_x}{2}}{2a \cos w_x + 1} u_{ij}^{n+1/2} \quad (4.25)$$

Denotando $m_x = \frac{c\Delta t}{2(\Delta x)}$, $m_y = \frac{c\Delta t}{2(\Delta y)}$

$$\gamma_x = \frac{-b(\sin w_x)^2 - 4a(\sin \frac{w_x}{2})^2}{2a \cos w_x + 1}$$

$$\gamma_y = \frac{-b(\sin w_x)^2 - 4a(\sin \frac{w_x}{2})^2}{2a \cos w_x + 1}$$

la ecuación 4.25 puede reescribirse como:

$$(u_{xx})_{ij}^{n+1/2} = \frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B u_{ij}^{n+1/2} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \gamma_x u_{ij}^{n+1/2}$$

Igualmente:

$$(u_{yy})_{ij}^{n+1/2} = \frac{1}{(\Delta y)^2} C^{-1} D u_{ij}^{n+1/2} = \frac{1}{(\Delta y)^2} \gamma_y u_{ij}^{n+1/2}$$

Reemplazando los términos $(u_{xx})_{ij}^{n+1/2}$ y $(u_{yy})_{ij}^{n+1/2}$ en las ecuaciones 4.21 y 4.22:

Para los niveles temporales n y $n + 1/2$:

$$\frac{u_{ij}^{n+1/2}}{0.5\Delta t} - c(u_{xx})_{ij}^{n+1/2} = -\frac{u_{ij}^n}{0.5\Delta t} + c(u_{yy})_{ij}^n$$

$$u_{ij}^{n+1/2} - c0.5\Delta t(u_{xx})_{ij}^{n+1/2} = u_{ij}^n + c0.5\Delta t(u_{yy})_{ij}^n$$

$$u_{ij}^{n+1/2} - c0.5\Delta t\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B u_{ij}^{n+1/2}\right) = u_{ij}^n + c\left(\frac{1}{(\Delta y)^2} C^{-1} D u_{ij}^{n+1/2}\right)$$

$$(1 - m_x \gamma_x) u_{ij}^{n+1/2} = (1 + m_y \gamma_y) u_{ij}^{n+1/2}$$

Se sigue el mismo procedimiento para los niveles temporales $n + 1/2$ y $n + 1$:

$$\frac{u_{ij}^{n+1}}{0.5\Delta t} - c(u_{yy})_{ij}^{n+1} = \frac{u_{ij}^{n+1/2}}{0.5\Delta t} + c(u_{xx})_{ij}^{n+1/2}$$

$$u_{ij}^{n+1} - c0.5\Delta t(u_{yy})_{ij}^{n+1} = u_{ij}^{n+1/2} + c0.5\Delta t(u_{xx})_{ij}^{n+1/2}$$

$$u_{ij}^{n+1} - c0.5\Delta t\left(\frac{1}{(\Delta y)^2} C^{-1} D u_{ij}^{n+1}\right) = u_{ij}^{n+1/2} + c\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B u_{ij}^{n+1/2}\right)$$

$$(1 - m_y \gamma_y) u_{ij}^{n+1} = (1 + m_x \gamma_x) u_{ij}^{n+1/2}$$

El factor de amplificación ξ se obtiene de la relación:

$$|\xi| = \left| \frac{u_{ij}^{n+1}}{u_{ij}^{n+1/2}} \right| = \frac{(1 + m_x \gamma_x)(1 + m_y \gamma_y)}{(1 - m_y \gamma_y)(1 - m_x \gamma_x)} \leq 1 \quad (4.26)$$

La desigualdad se cumple para valores de γ_x y γ_y menores o iguales a cero, de modo que para valores positivos de α , a y b , el esquema es incondicionalmente estable.

Implementación del método ADI para la ecuación del calor bidimensional: Caso Periódico

A continuación procedemos a implementar el método ADI para resolver el siguiente problema de valor inicial para la ecuación del calor bidimensional empleando el método en [7]:

$$u_t = c(u_{xx} + u_{yy}) + F(x, y, t), \quad (x, y, t) \in \Omega \times [0, T] \quad (4.27)$$

$$u(x, y, 0) = G(x, y), \quad (x, y) \in \Omega$$

$$u(x, y, t) = H(x, y), \quad t \in [0, T]$$

Para ello utilizaremos el siguiente pseudocódigo:

Entrada:

Valores de los extremos de la dimensión x : X_l, X_r .

Valores de los extremos de la dimensión y : Y_l, Y_r .

Tiempo máximo T .

Número de puntos en la dimensión x : N_x .

Número de puntos en la dimensión y : N_y .

Número de puntos en la dimensión temporales: N_{step}

Función de la fuente de calor: $F(x, y, t)$.

Paso 1:

Defina la matriz u con dimensiones $N_x \times N_y$ donde se guardarán los valores de la solución numérica para el último nivel temporal.

Defina la matriz u_{old} con dimensiones $N_x \times N_y$ donde se guardarán los valores ya calculados de la solución numérica para cada nivel temporal.

Defina las matrices u_{xx} y u_{yy} con dimensiones $N_x \times N_y$ donde se guardarán temporalmente los valores de las segundas derivadas espaciales de la solución numérica.

Si desea almacenar los valores de u para cada nivel temporal, defina la matriz U con dimensiones $N_x \times N_y \times N_{\text{step}}$.

Defina la matriz f con dimensiones $N_x \times N_y$ donde se guardarán los valores de la fuente de calor.

Defina la matriz u_{half} con dimensiones $N_x \times N_y$ donde se guardarán los valores de los niveles temporales $n + \frac{1}{2}$.

Paso 2:

$$\text{Tome } dx = \frac{X_r - X_l}{N_x - 1};$$

$$\text{Tome } dy = \frac{Y_r - Y_l}{N_y - 1};$$

$$\text{Tome } dt = \frac{T}{N_{\text{step}}};$$

Paso 3:

(Valores iniciales para $t = 0$)

Para $i = 1, \dots, N_x$,

Para $j = 1, \dots, N_y$,

tome $u(i, j) = G(x, y)$.

Si desea almacenar los valores de $u(i, j)$ para cada nivel temporal, tome $U(:, :,$

$, 0) = u(:, :)$

Paso 4:

Defina el esquema de alto orden compacto a utilizar y obtenga las matrices A, B, C y D .

Paso 5:

$$\text{Tome } M_x = \frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B$$

$$\text{Tome } M_y = \frac{1}{(\Delta y)^2} C^{-1} D$$

Paso 6:

(Los siguientes pasos calculan la solución numérica para cada nivel temporal)

Para $k = 1, \dots, N_{\text{step}} - 1$,

Tome $u_{old} = u$

Paso 7:

Para $i = 1, \dots, N_x$, (Cálculo de valores para cada vector $(u_{yy})_i^k$)

Tome $u_{yy}(i, :) = M_y u_{old}(i, :)$

Paso 8:

(Inicio del esquema ADI)

Para $j = 1, \dots, N_y$,

Para $i = 1, \dots, N_x$,

Tome $f(i, j) = F(X_l + (i - 1)dx, Y_l + (j - 1)dy, (k - 0.5)dt)$ (Cálculo de la fuente de calor en cada punto)

Paso 9:

$$\text{Tome } u_{half}(:, j) = I_x - \frac{cdt}{2} M_x^{\Sigma-1} \cdot u_{old}(:, j) + \frac{cdt}{2} u_{yy}(:, j) + \frac{dt}{2} f(:, j)$$

Paso 10:

(calculo de la segunda derivada en la dirección x para el nivel temporal $n + \frac{1}{2}$)

Tome $u_{xx}(:, j) = M_x u_{half}$ (Los valores correspondientes ya están almacenados en la matriz u_{half})

Paso 11:

(Cálculo para el nivel temporal $n + 1$)

Para $i = 1, \dots, N_x$,

$$\text{Tome } u(i, :) = I_y - \frac{cdt}{2} M_y^{\Sigma-1} \cdot u_{half}(i, :) + \frac{cdt}{2} u_{xx}(i, :) + \frac{dt}{2} f(i, :)$$

Paso 12:

(Opcional)

Si desea almacenar los valores de u para cada nivel temporal tome $U(:, :, k + 1) = u$

Salida:

Matriz u con la solución numérica para el último nivel temporal.

Opcionalmente: Matriz U con la solución numérica para cada nivel temporal.

En forma de pseudocódigo, las instrucciones serán:

Algorithm 1: Algoritmo 1

- 1: $G(x, y) \leftarrow$ Función de condición inicial
- 2: $X_l \leftarrow$ extremo izquierdo de la dimensión x
- 3: $X_r \leftarrow$ extremo derecho de la dimensión x
- 4: $Y_l \leftarrow$ extremo izquierdo de la dimensión y
- 5: $Y_r \leftarrow$ extremo derecho de la dimensión y
- 6: $T \leftarrow$ Tiempo máximo.
- 7: $N_x \leftarrow$ Número de puntos en la dimensión x
- 8: $N_y \leftarrow$ Número de puntos en la dimensión y

9: $N_{\text{step}} \leftarrow$ Número de puntos en la dimensión temporal

10: $F(x, y, t) \leftarrow$ Función de la fuente de calor

11: $u \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y$ con la solución numérica para el último nivel temporal

12: $u_{old} \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y$ con la solución numérica para cada nivel temporal

13: $u_{xx} \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y$ para los valores de las segundas derivadas de la dimensión x de la solución numérica

14: $u_{yy} \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y$ para los valores de las segundas derivadas de la dimensión y de la solución numérica

15: $U \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y \times N_{\text{step}}$ de u la solución numérica para cada nivel temporal

16: $f \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y$ para la fuente de calor.

17: $u_{half} \leftarrow$ Matriz $N_x \times N_y$ para los valores de la solución numérica en los niveles temporales $n + \frac{1}{2}$.

18: $dx \leftarrow \frac{X_r - X_l}{N - 1}$;

19: $dy \leftarrow \frac{Y_r - Y_l}{N - 1}$;

20: $dt \leftarrow \frac{T}{N_{\text{step}}}$;

21: $t \leftarrow 0$

22: **for** $i = 1$ **to** $i = N_x$ **do**

23: **for** $j = 1$ **to** $j = N_y$ **do**

24: $u(i, j) \leftarrow G(x, y)$

25: **end for**

26: **end for**

$U(:, :, 0) \leftarrow u(:, :)$

27: $A, B, C, D \leftarrow$ Matrices del esquema de alto orden compacto a utilizar

28: $M_x \leftarrow \frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1} B$

29: $M_y \leftarrow \frac{1}{(\Delta y)^2} C^{-1} D$

30: **for** $k = 1$ **to** $k = N_{\text{step}} - 1$ **do**

31: $u_{old} \leftarrow u$

32: **for** $i = 1$ **to** $i = N_x$ **do**

33: $u_{yy}(i, :) \leftarrow M_y u_{old}(i, :)$

;) 34: **end for**

35: **for** $j = 1$ **to** $j = N_y$ **do**

36: **for** $i = 1$ **to** $i = N_x$ **do**

37: $f(i, j) \leftarrow F(X_l + (i - 1)dx, Y_l + (j - 1)dy, (k - 0.5)dt)$

38: **end for**

```

39:      $u_{half}(:, j) \leftarrow I_x - \frac{cdt}{2} M_x \Sigma^{-1} \cdot u_{old}(:, j) + \frac{cdt}{2} u_{yy}(:, j) + \frac{dt}{2} f(:, j)$ 
40:      $u_{xx}(:, j) \leftarrow M_x u_{half}$ 
41:     end for
42:     for  $i = 1$  to  $i = N_x$  do
43:          $u(i, :) \leftarrow I_y - \frac{cdt}{2} M_y \Sigma^{-1} \cdot u_{half}(i, :) + \frac{cdt}{2} u_{xx}(i, :) + \frac{dt}{2} f(i, :)$ 
44:     end for
45:      $U(:, :, k+1) \leftarrow u$ 
46: end for
    
```

4.2 Caso No Periódico

A diferencia del caso periódico, donde bastaban los esquemas para los puntos interiores para obtener las matrices del lado derecho (matriz RHS) e izquierdo (matriz LHS) de la ecuación 1.3, el caso no periódico implica dificultades que no se encuentran en el caso periódico o el caso de emplearse esquemas de aproximación de segundo orden (ver [28] y [27]). El principal problema que se presenta es el de la estabilidad de las matrices resultantes al relacionar las derivadas temporales.

4.2.1 Construcción de las Matrices LHS y RHS para el Caso No Periódico

Para generar las matrices para el caso no periódico, se siguen los mismos pasos que para el caso periódico eficiente 4.1.2, pero ya considerando los esquemas para los puntos cercanos a las fronteras. Se pueden considerar esquemas para estos puntos de un orden inferior como máximo, pues como indica [15], de esta forma no se sacrifica la estabilidad de la solución numérica (en caso de ya ser estable), y tampoco se disminuye el orden de aproximación para los puntos interiores. Si se escogen esquemas para los puntos en la frontera con más de uno o dos órdenes de aproximación con respecto a los puntos interiores, sí se puede comprometer el orden de aproximación de toda la solución numérica. En el presente trabajo se emplean fórmulas "de un sólo lado" para los puntos en las fronteras con mayor cantidad de coeficientes, en lugar de usar las fórmulas que emplean puntos fantasma. Fórmulas y tablas completas para los puntos en la frontera se pueden encontrar en [7], [15] y [22].

A partir de las tablas con los valores de los coeficientes para los esquemas elegidos, tanto para los puntos interiores y para los puntos en la frontera, obtenemos los coeficientes para los términos u_{i-1} , u_i , u_{i+1} , u_{i-2} , u_{i+2} , etc. Se prefiere que las matrices resultantes de estos esquemas sean tridiagonales o pentadiagonales en los puntos interiores para permitir aplicar

4.2.2 Análisis de Estabilidad para el Caso No Periódico

Para el caso de sistemas de ecuaciones diferenciales con condiciones de frontera no periódicas, existen dos criterios de estabilidad a analizar como menciona [33]:

Criterio Estabilidad de Lax: Basado en los teoremas de estabilidad de Lax 3.2 y de Lax-Richtmyer 3.1. Permite saber si un esquema espacial unidimensional es estable para un tiempo t fijo y cuando el tamaño de paso de la discretización espacial $h \rightarrow 0$.

Criterio de Estabilidad Temporal: Analiza el comportamiento de la solución numérica para un h fijo y cuando $t \rightarrow T$, donde T no es necesariamente infinito, pero sí suficientemente grande para que el crecimiento del error en el tiempo haga que la solución numérica diverja con respecto a la solución analítica.

Como indica [27], el análisis de Von Neumann provee la necesaria información de estabilidad para problemas tipo Cauchy en dominios infinitos, con fronteras periódicas, y como se ha visto anteriormente, también es útil para analizar la estabilidad de los esquemas en una dimensión espacial empleados para construir las matrices RHS y LHS; pero para problemas de valor inicial con condiciones de frontera no periódicas en dominios finitos, el análisis de Von Neumann no es fiable y no provee suficientes condiciones de estabilidad numérica (especialmente con respeto al criterio de estabilidad temporal). Para estos casos se deben utilizar otros métodos, como el análisis espectral o de autovalores, o el análisis GKS de estabilidad. En la página 114 (capítulo 5) de [7] los autores dicen: “Aplicando la técnica similar usada para el caso 2D, podemos probar estabilidad incondicional de nuestro esquema con condiciones de frontera periódicas. Los detalles se pueden encontrar en nuestro paper [8] (...). La estabilidad para casos no periódicos se puede buscar siguiendo otros métodos como los mencionados por [28] y [29], lo cual es mucho más complicado y debe ser estudiado en un futuro”.

Para el caso con fronteras no periódicas es necesario, además del análisis de Von Neumann, realizar por lo menos el análisis de autovalores o espectral, pero no sobre las matrices resultantes de utilizar los esquemas para los puntos interiores y los puntos cercanos en la frontera. El análisis de autovalores debe realizarse sobre las matrices que relacionan los niveles temporales (llamadas también matrices de iteración).

Para el método ADI propuesto en el presente trabajo, las matrices de iteración cuya estabilidad debe evaluarse son:

$$A_{inv} = (I_x - \frac{c\Delta t}{2} \frac{1}{(\Delta x)^2} A^{-1}B)^{-1} \quad (4.28)$$

$$B_{inv} = (I_y - \frac{c\Delta t}{2} \frac{1}{(\Delta y)^2} A^{-1}B)^{-1} \quad (4.29)$$

donde $\Delta x = \Delta y = h$, A y B son las matrices construidas a partir de los esquemas compactos de alto orden, y c es una constante en la ecuación del calor original 4.27 cuyo valor suele ser 1.

El problema de estabilidad surge debido a que en el análisis de estabilidad de un esquema numérico se deben considerar dos criterios: la estabilidad cuando $\Delta t \rightarrow 0$, $h \rightarrow 0$, y cuando $t \rightarrow \infty$. El análisis de Von Neumann y los teoremas de Lax sólo consideran el primer caso, pero su definición no excluye que el error crezca con el paso del tiempo. Para que una solución numérica sea estable en el tiempo, debe de ser estable en el sentido del análisis espectral [33], es decir, con autovalores con parte real negativa si el análisis de estabilidad se realiza para el caso semidiscreto, o autovalores con magnitud menor a 1 para el análisis discreto.

Análisis de estabilidad espectral: caso semidiscreto

El análisis semidiscreto se explica en [27] y [15]. Éste análisis es útil si se desea estudiar la estabilidad de un esquema determinado. Este análisis considera el tiempo continuo y el espacio discreto. Se parte de la ecuación unidimensional diferencial a considerar:

$$A \frac{dU}{dt} = B \frac{d^k U}{(dx)^k} + F \quad (4.30)$$

Donde U es la solución analítica, $k \geq 1$, y F es un término fuente de calor. Los datos de los valores en las fronteras y los valores iniciales están dados por:

$$U(0, t) = g(t)$$

$$U(x, 0) = f(x)$$

Al aplicar los esquemas de discretización espacial, y dejando el tiempo continuo, la información del orden de aproximación de las derivadas espaciales está en las matrices A y B que se obtienen al aplicar un esquema de diferencias finitas dado. Considerando $F = 0$ y $U_t = \frac{dU}{dt}$ la ecuación 4.30 queda:

$$AU_t = BU(t) \quad (4.31)$$

La ecuación 4.31 puede reescribirse como:

$$U_t = A^{-1}BU(t) \quad (4.32)$$

Cuya solución está dada por:

$$U(t) = f(x)e^{(A^{-1}B)t}$$

La estabilidad de este sistema depende de los autovalores de la matriz $A^{-1}B$ cuando $t \rightarrow \infty$. Si ésta tiene autovalores con parte real negativa, la solución numérica se mantendrá acotada de modo que el esquema se puede considerar estable para el caso semidiscreto.

Análisis de estabilidad espectral: caso discreto

Este análisis se realiza en aquellos casos en los que se desea implementar los esquemas numéricos de forma computacional, como es el caso de [31] y [34]. se consideran el tiempo y el espacio discretos.

Teorema 4.1. *Teorema de Convergencia Matricial: Sea la matriz A con autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots$. El límite $\lim_{n \rightarrow \infty} A^n \leq \infty$, existe si y sólo si $|\lambda_i| \leq 1$ y si la multiplicidad de $\lambda = 1$ es igual a la dimensión del eigenspacio E_1 (ver [30]).*

Según el teorema de Convergencia Matricial, si una matriz es diagonalizable y sus autovalores tienen magnitud menor o igual a 1 (algunos autores usan la norma 1 o la norma 2) entonces $\lim_{n \rightarrow \infty} A^n \leq \infty$.

Para el caso discreto, la ecuación 4.32 quedará como:

$$U^{n+1} = H(A^{-1}B)U^n$$

Donde H es una función de $A^{-1}B$ que resulta de relacionar los niveles temporales, de modo que la matriz de iteración resultante es $Q = H(A^{-1}B)$. En el método ADI, la función H toma la forma de las ecuaciones en 4.28 y 4.29.

En este caso, para asegurar la estabilidad, se debe cumplir que los autovalores de Q tengan módulo menor a 1.

Relación entre el análisis de Von Neumann y el análisis espectral

En el caso con fronteras periódicas, los autovectores $V = [V_1, V_2, \dots, V_N]$ de la matriz de iteración A se pueden representar de la forma (ver [36]):

$$V_j(\Delta x) = e^{ik_j j \Delta x} \text{ para } j = 1, 2, 3 \dots N$$

Al aplicar el operador de discretización espacial D los autovectores toman la forma:

$$D e^{k_j j \Delta x} = \lambda_j e^{ik_j j \Delta x}$$

Donde el autovalor λ_j es el símbolo de Fourier de la matriz A , el cual se calcula de manera idéntica al factor de amplificación en el análisis de Von Neumann.

En este caso, la solución analítica también puede considerarse una suma de series de Fourier.

Los coeficientes de cada término de las serie obedecen la relación [35]:

$$u(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(w) e^{iwx} dw$$

Por ejemplo, en el caso de la ecuación del calor periódica en su forma más simple:

$$u_t = u_{xx} \text{ para } 0 \leq x \leq 2\pi \text{ y } 0 \leq t$$

$$u(x, 0) = f(x)$$

$$u(0, t) = u(2\pi, t) = g(t) = 0$$

La solución está dada por:

$$u(x, t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{w=-N}^N \hat{u}(w, t) e^{iwx}$$

Donde $\hat{u}(w, t) = \hat{f}(w) e^{-w^2 x}$ y $\hat{f}(w)$ son los coeficientes de Fourier de la condición inicial $f(x)$.

Al discretizar el dominio espacial, y aplicar un esquema de diferencias finitas cuya matriz resultante es A , se obtiene el siguiente sistema de ODES (ver [36]):

$$\frac{dU}{dt} = AU + F \tag{4.33}$$

Sea $S = T^{-1}AT$, donde A se considera de rango completo, S es la matriz diagonal con los autovalores de A . T es la matriz formada por los autovectores de A . Como los autovectores de A forman una base completa en el espacio de funciones en el dominio considerado, se puede hallar una combinación lineal equivalente a U y F . En el caso de la solución analítica $\hat{U}(t)$, ésta está dada por:

$$\hat{U}(t) = \sum_{j=1}^N [U_{0j} e^{\lambda_j t} + \frac{F_j}{\lambda_j} (e^{\lambda_j t} - 1)] T_j \tag{4.34}$$

Donde T_j, F_j y U_{0j} son los vectores columna de las matrices T, F y U_0 respectivamente. λ_j para $j = 1, 2, \dots, N$ son los autovalores de A .

Para que la ecuación 4.34 se mantenga acotada, se debe cumplir $Re(\lambda_j) \leq 0$ para todo $j = 1, 2, 3, \dots, N$. [36] indica que esta condición es necesaria para que exista estabilidad en el caso totalmente discreto.

El análisis de Von Neumann considera un sólo modo de Fourier para evaluar la estabilidad y obtener el factor de amplificación al discretizar el tiempo haciendo $t = n\Delta t$. En el caso de condiciones de frontera periódicas, este análisis y el método matricial son equivalentes.

Al discretizar el tiempo, la ecuación 4.34 queda:

$$\begin{aligned} \hat{U}(n\Delta t) &= \sum_{j=1}^N [U_{0j} e^{\lambda_j n\Delta t} + \frac{F_j}{\lambda_j} (e^{\lambda_j n\Delta t} - 1)] T_j \\ \hat{U}(n\Delta t) &= \sum_{j=1}^N e^{\lambda_j n\Delta t} [U_{0j} + \frac{F_j}{\lambda_j}] T_j - \sum_{j=1}^N \frac{F_j}{\lambda_j} T_j \end{aligned} \tag{4.35}$$

Sea $G(\lambda_j) = e^{\lambda_j \Delta t}$ el factor de amplificación. En el tiempo $t = n\Delta t$ el valor de la amplificación será $G(\lambda_j)^n$, de modo que la condición para asegurar la estabilidad es: $|G(\lambda_j)| < 1$ para todo $j = 1, 2, 3, \dots, N$, de modo que también se cumple que los autovectores λ deben tener parte real negativa.

El análisis de estabilidad semidiscreto y el discreto dan condiciones para los autovalores de la matriz de iteración diferentes debido a que las matrices de iteración en ambos casos no son iguales.

En el caso más simple, el análisis discreto de la ecuación 4.33 toma la forma:

$$\frac{U_{n+1} - U_n}{\Delta t} = AU + F \quad (4.36)$$

$$U_{n+1} = U_n + \Delta t AU + \Delta t F$$

$$U_{n+1} = U_n(I + \Delta t A) + \Delta t F$$

Donde I es la matriz identidad. La matriz de iteración en este caso es $(I + \Delta t A)$. Para que la solución numérica se mantenga acotada, el módulo de los autovalores de $(I + \Delta t A)$ debe ser menor a 1.

Se puede concluir que la estabilidad en el sentido de Von Neumann es una condición necesaria (pero no suficiente) para obtener la estabilidad espectral.

Capítulo 5

Resultados

El análisis de estabilidad mediante el método espectral es explicado de forma muy básica en [20]. Este análisis se puede aplicar a matrices diagonalizables (con multiplicidad algebraica y geométrica iguales) como las que resultan para el caso parabólico. En [7], se encuentra el código fuente completo en Matlab para resolver la ecuación bidimensional del calor con fronteras periódicas, pero no se menciona dónde se deben declarar los esquemas para los puntos en las fronteras porque los autores no los usan. Las matrices RHS y LHS se construyen en la función reconux2p. La fuente de calor, la solución exacta y las condiciones iniciales se configuran en las funciones F2dcone y F2dconeF respectivamente.

A continuación, presentamos los resultados de analizar y comparar las matrices construidas para ambos casos: con fronteras periódicas y no periódicas. Los experimentos se llevaron a cabo usando Matlab 2016b en una computadora con Windows 7 x64, procesador Intel core Duo 2.2GHz, y 4GB de memoria ram.

5.1 Empleando Esquemas para Fronteras Periódicas

Para este caso, las matrices construidas para hallar la solución numérica sólo consideran los esquemas de alto orden compacto para los puntos interiores.

Para este análisis hemos usado el código fuente dado por [7]. La matriz RHS correspondiente para el análisis semidiscreto es la variable 'matA' y la matriz LHS es la variable 'matB' en la función reconux2p. La matriz para el análisis semidiscreto resultante es $Q = \frac{1}{h^2} (mat A)^{-1} matB$ para ambas dimensiones espaciales x e y . Los autovalores de Q para

una discretización de 10 pasos en ambas dimensiones espaciales, son:

$$\begin{aligned} \text{eig}(Q) = & -187.7727, -0.0000, -524.6606, -524.6606, -344.2500, -344.2500, -157.5173, \\ & -157.5173, -39.4770, -39.4770 \end{aligned}$$

Para el análisis discreto, y empleando una discretización de 10 pasos en ambas dimensiones espaciales, las matrices resultantes de emplear el método ADI son estables, como se demuestra al ejecutar el comando `eig` de Matlab sobre las matrices de iteración A_{inv} y B_{inv} :

$$\text{eig}(A_{inv}) = 0.9612, 0.8588, 0.7362, 0.6010, 0.4977, 0.4089, 0.3309, 0.2930, 0.2320, 0.2469$$

$$\text{eig}(B_{inv}) = 0.9612, 0.8588, 0.7362, 0.6010, 0.4977, 0.4089, 0.3309, 0.2930, 0.2320, 0.2469$$

Las figuras 5.1 y 5.2 muestran la solución numérica para el siguiente problema de valor inicial y condiciones de frontera periódicas:

$$u_t = u_{xx} + u_{yy} + F(x, y, t), (x, y) \in (0, 1)^2, t \in (0, 1)$$

Donde $F(x, y, t)$ es una fuente de calor conocida dada por:

$$(16\pi^2 - 1)e^{-t}(\sin(4\pi x) + \sin(4\pi y))$$

Con condiciones de frontera periódicas en ambas direcciones x e y , las cuales se obtienen de la función $F(x, y, t)$.

La solución exacta de este problema está dada por:

$$e^{-t}(\sin(4\pi x) + \sin(4\pi y))$$

Para 50 pasos en cada dimensión espacial y 80 pasos temporales, el resultado se muestra en la figura 5.1. El error absoluto se muestra en la figura 5.2 y es obtenido a partir de la norma L_1 , la cual se calcula con la siguiente fórmula para cada punto (i, j) de la discretización espacial:

$$\text{error} = \text{abs}(u_{ex}(i, j) - u(i, j))$$

donde u_{ex} es la solución analítica y u es la solución numérica.

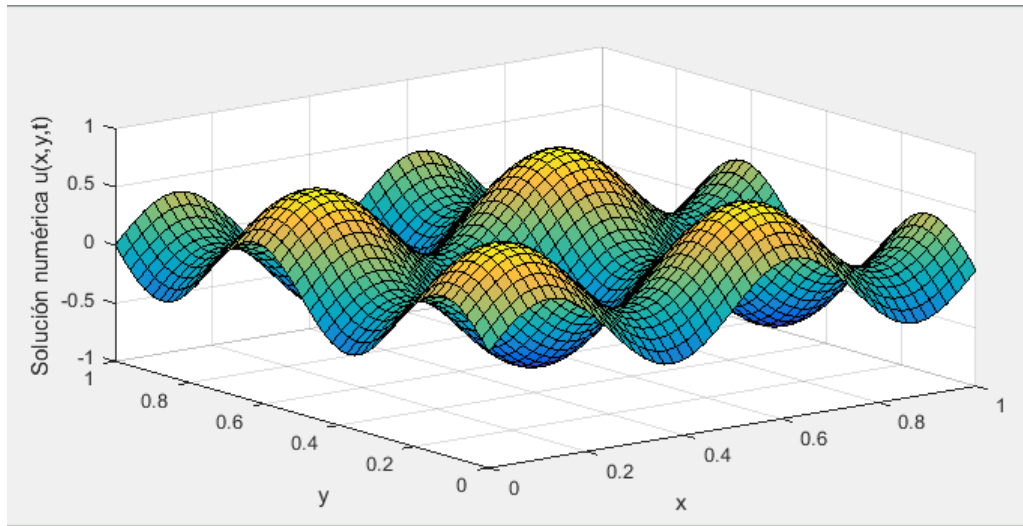


Figura 5.1: Modelo de función periódica: solución numérica

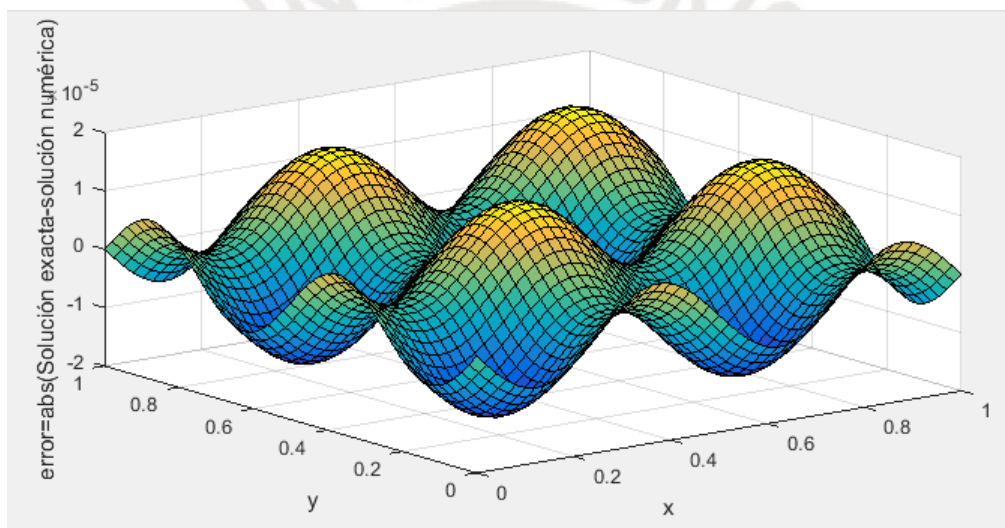


Figura 5.2: Modelo de función periódica: error absoluto

Las figuras 5.3 y 5.4 muestran la solución numérica para el problema de valor inicial y condiciones de frontera del modelo de cono rotatorio:

$$u_t = u_{xx} + u_{yy} + F(x, y, t)$$

$$(x, y) \in (0, 1)^2, t \in (0, 1)$$

Donde $F(x, y, t)$ es una fuente de calor conocida dada por:

$$0.8e^{-80((x-k_2)^2 + (y-k_1)^2)}(40\pi((x-k_2) \cos(\pi t) - (y-k_1) \sin(\pi t)) - (160^2(x-k_2)^2 - 160) - (160^2(y-k_1)^2 - 160))$$

Los valores de k_1 y k_2 están dados por: $k_2 = (2 + \sin(\pi t))/4$, $k_1 = (2 + \cos(\pi t))/4$. Las condiciones de frontera se obtienen de la función $F(x, y, t)$.

La solución exacta de este problema está dada por:

$$0.8e^{-80((x-k1)^2+(y-k2)^2)}$$

Para 50 pasos en cada dimensión espacial y 80 pasos temporales, el resultado se muestra en la figura 5.3. El error absoluto se muestra en la figura 5.4:

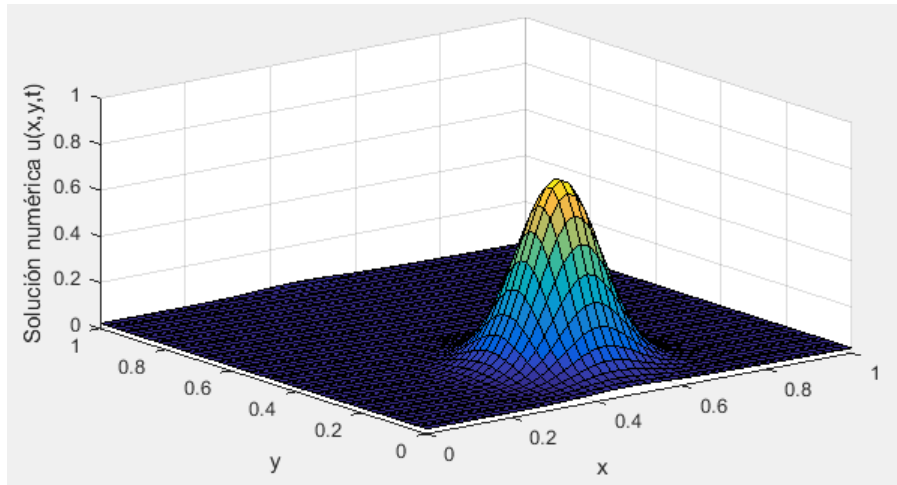


Figura 5.3: Modelo de cono rotatorio: solución numérica

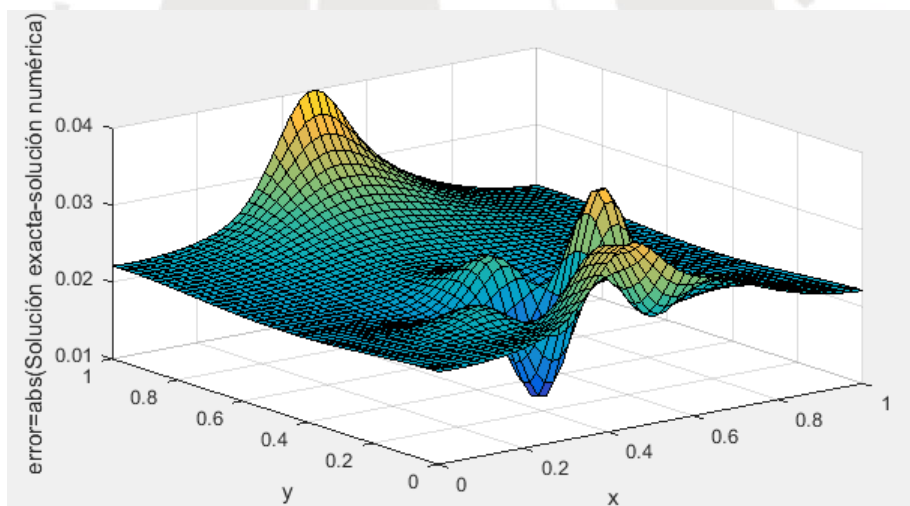


Figura 5.4: Modelo de cono rotatorio: error absoluto

5.2 Empleando Esquemas para Fronteras No Periódicas (Caso General)

Para este caso, las matrices construidas para hallar la solución numérica consideran los esquemas de alto orden compacto para los puntos interiores y los esquemas para los puntos cercanos a las fronteras. Empleamos el mismo código fuente dado por [7] con los esquemas de

sexto orden para los puntos cercanos a las fronteras para la segunda derivada dados por [15]. Estos esquemas deben ingresarse en la función `reconux2p` para obtener las matrices RHS y LHS respectivas, las cuales se almacenan en las mismas variables que en el caso con fronteras periódicas. El código fuente para contruir las matrices correspondientes se encuentra en la función dada en [A](#), y reemplaza a la función `reconux2p` dada por [7].

Con una discretización de 10 pasos en ambas dimensiones espaciales, la matriz $Q = \frac{1}{h^2}(\text{mat } A)^{-1} \text{mat } B$ correspondiente para el análisis semidiscreto tiene autovalores:

$$\begin{aligned} \text{eig}(Q) = & -337.4909, 0.2761 + 0.4400i, 0.2761 - 0.4400i, 0.2367 + 0.4415i, 0.2367 - 0.4415i, \\ & -0.0998, -0.2807 + 0.1573i, -0.2807 - 0.1573i, -0.3868, -0.8374 \end{aligned}$$

Para el análisis discreto y empleando una discretización de 10 pasos en ambas dimensiones espaciales, si se ejecuta el comando `eig` de Matlab sobre las matrices de iteración resulta:

$$\begin{aligned} \text{eig}(A_{inv}) = & 0.3216, 1.0883 + 0.3617i, 1.0883 - 0.3617i, 1.0623 + 0.3440i, 1.0623 - 0.3440i, 0.6564, 0.9413, \\ & 0.8448 + 0.0706i, 0.8448 - 0.0706i, 0.8053 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{eig}(B_{inv}) = & 0.3216, 1.0883 + 0.3617i, 1.0883 - 0.3617i, 1.0623 + 0.3440i, 1.0623 - 0.3440i, 0.6564, 0.9413, \\ & 0.8448 + 0.0706i, 0.8448 - 0.0706i, 0.8053 \end{aligned}$$

Al añadir los esquemas para los puntos en la frontera, las matrices con los esquemas de alto orden compacto se vuelven inestables. Las figuras 5.5 y 5.6 muestran la inestabilidad de las soluciones con estos nuevos esquemas para el problema 5.1 y con las mismas condiciones que para las figuras 5.1 y 5.2:

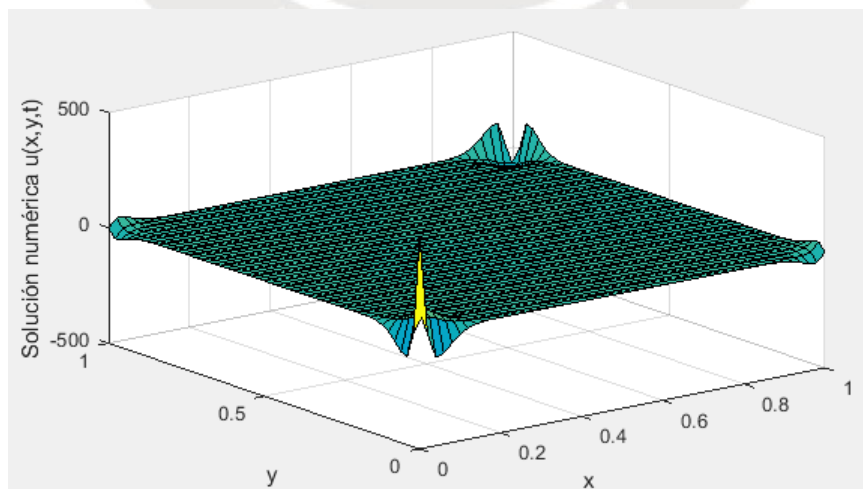


Figura 5.5: Modelo de función periódica: solución numérica

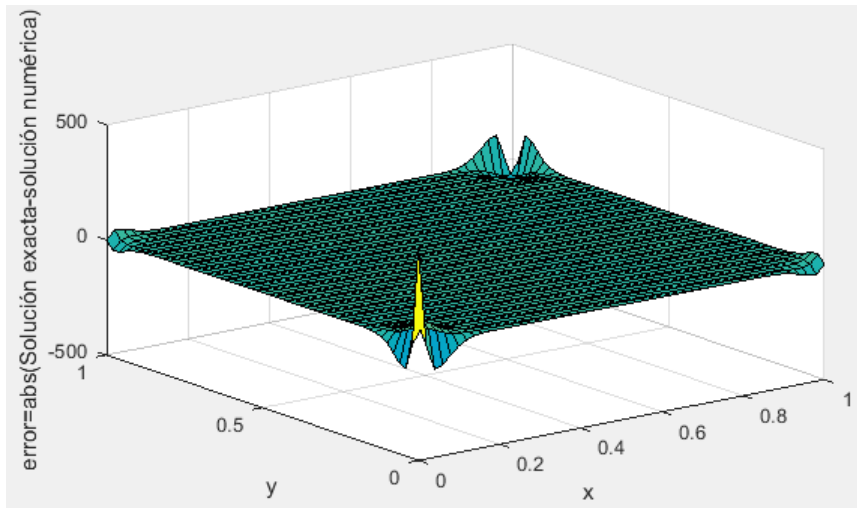


Figura 5.6: Modelo de función periódica: error absoluto

Las figuras 5.7 y 5.8 muestran la solución numérica y el error absoluto para el problema del cono rotatorio: 5.1

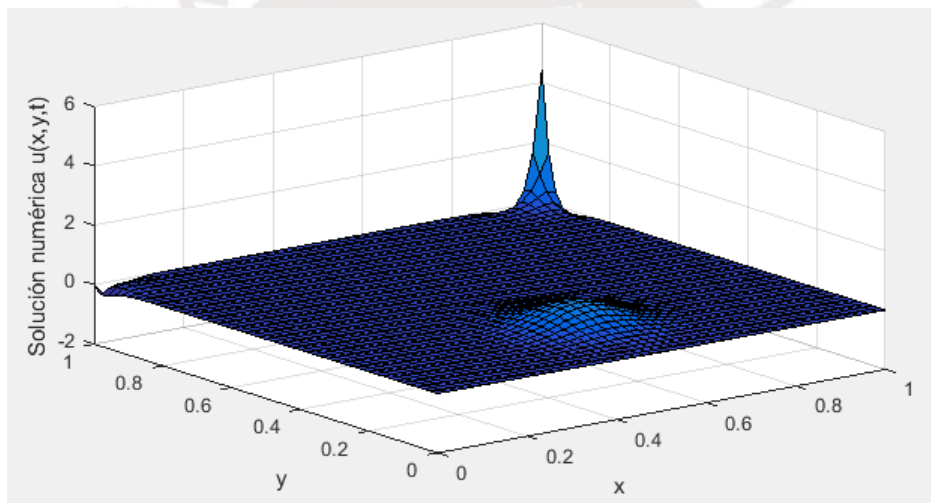


Figura 5.7: Modelo de cono rotatorio: solución numérica

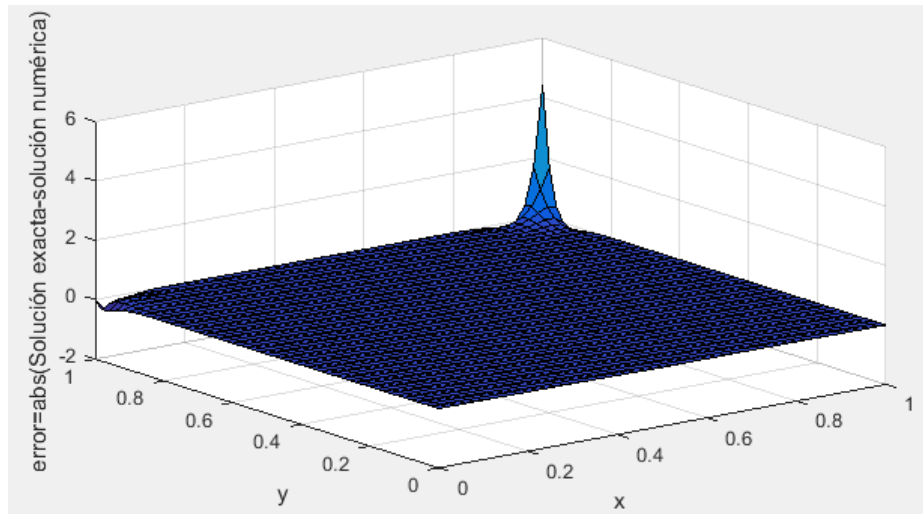


Figura 5.8: Modelo de cono rotatorio: error absoluto

Como se puede apreciar, el error es mayor que la solución que se intenta hallar.

5.3 Comparación de los Errores de los Esquemas

5.3.1 Error usando el esquema para fronteras periódicas vs. el esquema para fronteras no periódicas

En los cuadros 5.1 y 5.2 se puede apreciar cómo el error va acumulándose al disminuir Δt (o al aumentar la cantidad de pasos temporales) para el esquema para fronteras no periódicas versus el esquema para fronteras periódicas de las dos secciones anteriores, ambos para un tiempo $t = 1$ segundo.

Tamaño de paso temporal	Max Error (Esquema Periódico)	Max Error (Esquema no periódico)
1/10	7.2469e-004	0.3937
1/20	2.3031e-004	0.5000
1/40	5.7551e-005	0.5004
1/80	1.4346e-005	579.7817
1/160	3.5438e-006	1.4676e+024
1/360	8.4330e-007	2.0289e+098

Cuadro 5.1: Error Máximo con tiempo de paso espacial $\Delta x = \Delta y = h = 1/50$ para el modelo de función con fronteras periódicas

Tamaño de paso temporal	Max Error (Esquema Periódico)	Max Error (Esquema no periódico)
1/10	0.2416	0.2698
1/20	0.1498	0.1266
1/40	0.0713	0.0475
1/80	0.0400	4.4255
1/160	0.0392	1.5651e+021
1/360	0.0392	1.6070e+095

Cuadro 5.2: Error Máximo con tiempo de paso espacial $\Delta x = \Delta y = h = 1/50$ para el modelo de función cono rotatorio

5.3.2 Error usando el esquema de segundo orden vs. el esquema de cuarto orden para fronteras periódicas

Los cuadros 5.3 y 5.4 muestran los resultados al comparar el cálculo de la solución numérica utilizando un esquema de segundo orden vs el esquema de cuarto orden para fronteras periódicas dado por [7] para el caso de función con fronteras periódicas.

Los resultados para el esquema de segundo orden los obtuvimos empleando el código fuente dado por [39]. Los resultados para el esquema de cuarto orden los obtuvimos empleando el código fuente para el caso con fronteras periódicas dado por [7].

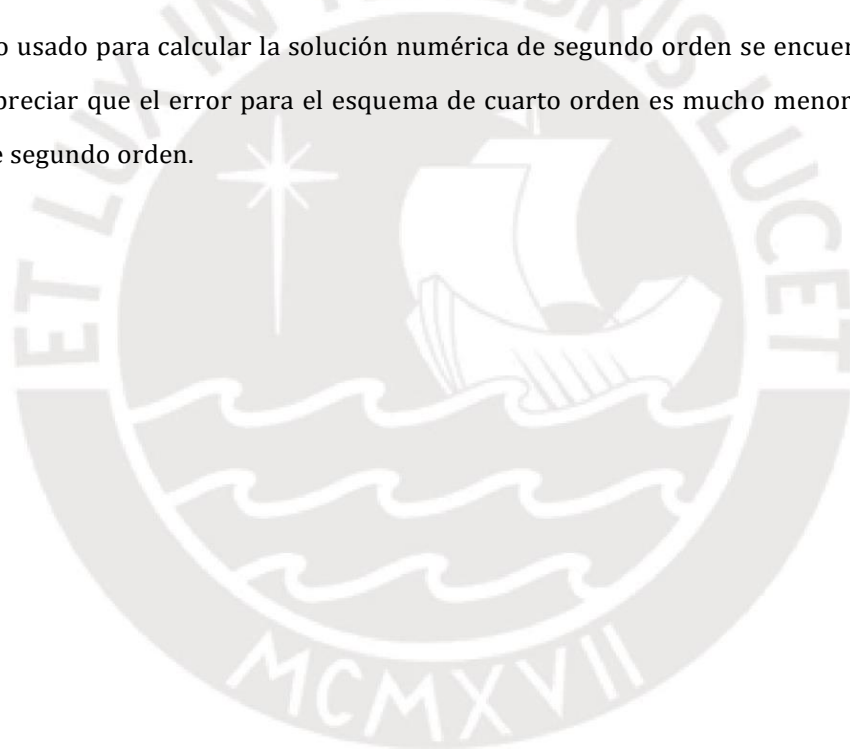
Tamaño de paso temporal	Max Error (Esquema de 2do orden)	Max Error (Esquema periódico 4to orden)	Tiempo de ejecución esquema de 2do orden	Tiempo de ejecución esquema de 4to orden
1/40	0.1453	7.2469e-04	0.1830	0.0523
1/20	0.0315	2.3031e-04	0.3602	0.0837
1/40	0.0081	5.7551e-05	0.6898	0.1412
1/80	0.0039	1.4346e-05	1.3756	0.2480
1/160	0.0039	3.5438e-06	2.7785	0.4634

Cuadro 5.3: Error Máximo utilizando un esquema de segundo orden vs. el esquema de cuarto orden con tiempo de paso espacial $\Delta x = \Delta y = h = 1/50$ y $t = 1$ segundo para el modelo de función con fronteras periódicas

Tamaño de pa- so temporal	Max Error (Es- quema de 2do orden)	Max Error (Es- quema periódi- co 4to orden)	Tiempo de eje- cución esquema de 2do orden	Tiempo de eje- cución esquema de 4do orden
1/40	0.0617	3.2337e-04	0.3657	0.0802
1/20	0.0116	8.4733e-05	0.7080	0.1367
1/40	0.0030	2.1172e-05	1.3795	0.2477
1/80	0.0014	5.2775e-06	2.7535	0.2480
1/160	0.0014	1.3037e-06	5.4613	0.9027

Cuadro 5.4: Error Máximo utilizando un esquema de segundo orden vs. el esquema de cuarto orden con tiempo de paso espacial $\Delta x = \Delta y = h = 1/50$ y $t = 2$ segundos para el modelo de función con fronteras periódicas

El algoritmo usado para calcular la solución numérica de segundo orden se encuentra en [39]. Se puede apreciar que el error para el esquema de cuarto orden es mucho menor que para el esquema de segundo orden.



Capítulo 6

Conclusiones

Se puede concluir que en el caso periódico, el análisis de estabilidad de Von Neumann es un buen indicador de la estabilidad de un esquema de diferencias finitas, pero no es suficiente para el caso no periódico, donde además es necesario analizar, como mínimo, la estabilidad mediante el método espectral. En [27], se demostró que muchos esquemas de alto orden compacto son estables según el método de Von Neumann, pero no son estables en el tiempo y son divergentes cuando se aplican a sistemas de ecuaciones diferenciales.

Del mismo modo que para el caso con fronteras periódicas, se pueden enumerar los pasos para construir un esquema de alto orden compacto para el caso con fronteras no periódicas:

1. Escoger un orden de aproximación.
2. Escoger tamaño de los estenciles, tanto para los puntos interiores como para los puntos cercanos a las fronteras.
3. Analizar si los estenciles para los puntos interiores elegidos son estables mediante el método de Von Neumann.
4. Determinar los coeficientes necesarios.
5. Generar la matriz implícita del lado izquierdo de la ecuación 1.3.
6. Generar la matriz del lado derecho de la ecuación 1.3.
7. Obtener la matriz o las matrices A_{inv} y/o B_{inv} de iteración. Estas matrices, y el que se requiera una o más, dependen del método empleado para calcular las derivadas temporales tales como un ADI específico, Runge Kutta, método no eficiente, etc.
8. Analizar la estabilidad de la matriz o matrices de iteración mediante el método espectral, tanto para el caso semidiscreto como para el caso discreto.

9. Resolver el sistema para obtener las matrices para las derivadas temporales.
10. Actualizar la solución en cada nivel temporal.

El análisis espectral (discreto o semidiscreto) sólo indica si un esquema en general es estable en el tiempo o no, no indica cómo construir estos esquemas, tampoco impone alguna condición en su construcción.

Para que un esquema de diferencias finitas con fronteras periódicas sea estable, basta que cumpla la condición de estabilidad de Von Neumann. En el caso de dominios con fronteras no periódicas, debe cumplir además la estabilidad para el análisis espectral semidiscreto y discreto.

En los casos de ecuaciones diferenciales con fronteras periódicas, los métodos de alto orden compacto ofrece mejor orden de aproximación que los métodos de bajo orden.

Ya para el caso de ecuaciones diferenciales con fronteras no periódicas, son preferibles otros métodos como los de elementos finitos, principalmente por la dificultades para hallar esquemas de alto orden estables.

Como indica [28], escoger un método de alto orden compacto con esquemas para fronteras no periódicas y luego examinar la estabilidad, no es la forma adecuada para calcular la solución numérica de una ecuación diferencial; es muy poco probable que se encuentren esquemas estables de este modo. Algunos autores como [31] y [32] han logrado construir esquemas de alto orden estables para los puntos interiores y los puntos en las fronteras ajustando muy finamente los coeficientes de éstos.

Bibliografía

- [1] Sun HW, Li LZ, *A CCD-ADI method for unsteady convection-diffusion equations*, Department of Mathematics, University of Macau, Macao, 2013.
- [2] Rodríguez-Bernal A, *The Heat Equation with General Periodic Boundary Conditions*, *Potential Anal* (2017) 46:295–321, Springer Science+Business Media, 2016.
- [3] Feng T, Mouhot C, *Analysis of Partial Differential Equations* <https://web.stanford.edu/~tonyfeng/pde.pdf>, Stanford University, 2013.
- [4] Kris Wysocki, *Notas de Clase* http://www.math.psu.edu/wysocki/M412/Notes412_7.pdf, Penn State University, Department of Mathematics, 2010.
- [5] Owren B, *Numerical solution of partial differential equations with finite difference methods TMA4212 Course Notes* https://wiki.math.ntnu.no/_media/tma4212/2013v/tma4212april2013.pdf, NTNU Faculty of Information Technology and Electrical Engineering Department of Mathematical Sciences, 2013.
- [6] Gualtieri M, *Topology I, Course notes* <http://www.math.toronto.edu/mgualt/courses/MAT1300F-2016/docs/1300-2016-notes-1.pdf>, University of Toronto, 2016.
- [7] Li J, Chen YT, *Computational Partial Differential Equations Using MATLAB*, CRC Press Taylor & Francis Group, 2008.
- [8] Li J, Chen YT, *High-order compact ADI methods for parabolic equations*, *Comp. Math. Appl.*, 52:1343–1356, 2006.
- [9] Engan A, *Numerical Option Pricing in CARMA Models. Thesis for the degree of Master of Science*, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Oslo, 2013.

- [10] Spotz WF, Carey GF, *High-order compact scheme for the steady stream-function vorticity equations*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 38 Issue 20, 1995.
- [11] Spotz WF, Carey GF, *High-Order Compact Finite Difference Method*. Houston Journal of Mathematics, University of Houston, 1996.
- [12] Peaceman DW, Rachford HH Jr, *The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations*, Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, 1955.
- [13] Stanoyevitch A, *Introduction to Numerical Ordinary and Partial Differential Equations Using MATLAB*, John Wiley & Sons, Inc, 2005.
- [14] Bartels S, *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*, Springer International Publishing Switzerland, 2016.
- [15] Tyler JG, *Analysis and Implementation of High-Order Compact Finite Difference Schemes*, Master Thesis, Brigham Young University, 2007.
- [16] Mattheij RMM, Rienstra SW, Ten Thije Boonkkamp JFM, *Partial Differential Equations: Modeling, Analysis, Computation*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005.
- [17] Moin P, *Fundamentals of Engineering Numerical Analysis*, Cambridge University Press, 2010
- [18] Eberly D, *Derivative Approximation by Finite Differences* <https://www.geometrictools.com/Documentation/FiniteDifferences.pdf>, Geometric Tools, 2016
- [19] Lakoba T, *MATH 337 course notes* http://www.cems.uvm.edu/~tlakoba/math337/notes_15.pdf, University of Vermont.
- [20] Lakoba T, *MATH 337 course notes* http://www.cems.uvm.edu/~tlakoba/math337/notes_12.pdf, University
- [21] Lele SK, *Compact finite difference schemes with spectral-like resolution*, Journal of Computational Physics 103, 1992.
- [22] Datta V. Gaitonde, Visbal MR, *High-order schemes for navier-stokes equations: Algorithm and implementation into fdl3di*, Tech. report, Air Vehicles Directorate, Air Force Research Laboratory, August 1998.

- [23] Douglas, Gunn JE, *A General Formulation of Alternating Direction Methods – Part I. Parabolic and Hyperbolic Problems*, 1964.
- [24] Fournié M, Kara S, *Iterative Methods and High-Order Difference Schemes for 2D Elliptic Problems with Mixed Derivative*, 2006.
- [25] Schmuck M, *Lecture Notes* <http://www.macs.hw.ac.uk/~ms713/lectureNotes.pdf>, Heriot-Watt University.
- [26] Zhao J, Corless RM, *Compact Finite Difference Method for High Order Integro-Differential Equations*, University of Western Ontario, 2006.
- [27] Carpenter MH, Gottlieb D, Abarbanel S, *The Stability of Numerical Boundary Treatments for Compact High-Order Finite Difference Schemes*, Appl. Numer. Math., 12:55–87, 1993.
- [28] Carpenter MH, Gottlieb D, Abarbanel S, *Stable and accurate boundary treatments for compact high order finite difference schemes*, Journal of Computational Physics, 108 272–295, 1993.
- [29] Mattsson K, Nordstrom J, *Summation by parts operators for finite difference approximations of second derivatives*, J. Comp. Phys. 199:503–540, 2004.
- [30] Harwood, Main M, *Eigenvalue Dependence of Numerical Oscillations in Parabolic Partial Differential Equations*, Mathematics Subject Classification 65M06 65M12, 2000.
- [31] Yosaf A, Ur SR, Ahmad F, Zaka MZ, Alshomran AS, *Eighth-Order Compact Finite Difference Scheme for 1D Heat Conduction Equation*, Advances in Numerical Analysis Volume 2016, Article ID 8376061, 2016.
- [32] Han F, Weizhong D, *New higher-order compact finite difference schemes for 1D heat conduction equations*, Mathematics and Statistics, Louisiana Tech University, 2013.
- [33] Abarbanel SS, Chertock AE, *Strict Stability of High-Order Compact Implicit Finite-Difference Schemes: The Role of Boundary Conditions for Hyperbolic PDEs*, Department of Mathematical Sciences, University of Tel Aviv, 1999.
- [34] Sousa E, *On the edge of stability analysis*, CMUC, Department of Mathematics, University of Coimbra, 2009.
- [35] Gustafsson B, *High Order Difference Methods for Time Dependent PDE*, Springer series in computational mathematics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008.

- [36] Hirsch C, *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Springer series in computational mathematics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1994.
- [37] Hirsch C, *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Springer series in computational mathematics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Second Edition, 2007.
- [38] Kreiss HO, Wu L, *On the stability definition of difference approximations for the initial boundary value problem*, Applied Numerical Mathematics 12 213-227, North Holland, 1993.
- [39] Li Z, *Example of ADI Method for 2D heat equation*
<http://www4.ncsu.edu/~zhilin/TEACHING/MA584/index.html>, NC State University.



Apéndice A

Programas

Función reconux2p (archivo reconux2p.m) para el caso no periódico, ver código fuente en el capítulo 5 de [7].

```
1 %-----
2 % Ref to S.K. Lele ' s 1992 paper
3 % Reconstruct the 2nd derivative of a periodic function
4 %-----
5 function matAB=reconux2p (N,h)
6
7 % fo r i n t e r i o r p o i n t
8 % fo r 6 t h - o r d e r s c h e m e ( 2 . 2 . 7 )
9 matA= zeros (N,N) ; matB= zeros (N,N) ;
10 % fo r i n t e r i o r p o i n t
11 % fo r 6 t h - o r d e r s c h e m e ( 2 . 2 . 7 )
12 alfa =2.0/11.0; aa= 12/11; bb=3/11;
13
14 % i n t e r i o r p o i n t s
15 fo r i =3 :N-2
16     matA(i,i) =1 ;
17     matA(i,i+1)= alfa ;
18     matA(i,i-1)= alfa ;
19     matB(i,i-2)=bb / 4 ;
20     matB(i,i-1)=aa ;
21     matB(i,i)=-bb/2 -2*aa ;
```

```

22     matB(i, i+1)=aa;
23     matB(i, i+2)=bb / 4 ;
24 end
25
26     %%%%%%%%%%%
27     % fo r boundary point 1 : 6th-order at boundary nodes : Ref Tyler ' s
        thesis 2007
28 matA( 1 , 1 ) =1 ;
29 matA( 1 , 2 ) = 126 / 11 ;
30
31 matB( 1 , 1 ) =2077/ 157;
32 matB( 1 , 2 ) = -2943/110;
33 matB( 1 , 3 ) = 573 / 44 ;
34 matB( 1 , 4 ) = 167 / 99 ;
35 matB( 1 , 5 ) = -18/11;
36 matB( 1 , 6 ) = 57 / 110 ;
37 matB( 1 , 7 ) = -131/1980;
38
39     % fo r boundary point N
40 matA(N,N) =1 ;
41 matA(N,N-1) = 126 / 11 ;
42
43 matB(N,N) =2077/ 157;
44 matB(N,N-1)= -2943/110;
45 matB(N,N-2) = 573 / 44 ;
46 matB(N,N-3)= 167 / 99 ;
47 matB(N,N-4)= -18/11;
48 matB(N,N-5)= 57 / 110 ;
49 matB(N,N-6)= -131/1980;
50
51     % fo r boundary point 2
52 matA( 2 , 1 ) = 11 / 128 ;
53 matA( 2 , 2 ) =1 ;
54 matA( 2 , 3 ) = 11 / 128 ;

```

```

55
56 matB( 2 , 1 ) =585 / 512 ;
57 matB( 2 , 2 ) = -141/64;
58 matB( 2 , 3 ) =459 / 512 ;
59 matB( 2 , 4 ) = 9 / 3 2 ;
60 matB( 2 , 5 ) = -81/512;
61 matB( 2 , 6 ) = 3 / 6 4 ;
62 matB( 2 , 7 ) = -3/512;
63
64 % fo r boundary point N-1
65 matA(N-1 ,N-2) = 11 / 128 ;
66 matA(N-1 ,N-1) =1 ;
67 matA(N-1 ,N) = 11 / 128 ;
68
69 matB(N-1 ,N) =585 / 512 ;
70 matB(N-1 ,N-1)= -141/64;
71 matB(N-1 ,N-2) =459 / 512 ;
72 matB(N-1 ,N-3)= 9 / 3 2 ;
73 matB(N-1 ,N-4)= -81/512;
74 matB(N-1 ,N-5)= 3 / 6 4 ;
75 matB(N-1 ,N-6)= -3/512;
76
77 %%%%%%%%%%%%%%%
78
79 matB=matB ./ ( h*h ) ;
80
81 %matA , matB,
82 matAB=matA\matB; % the matrix fo r u_xx=A^( -1)B*u

```

Archivo adi2.m empleado para calcular la solución numérica de la ecuación con fronteras periódicas usando un esquema de segundo orden. Está basado en el código dado por [39]; utiliza las funciones F2dcone y F2dconeF dadas en el capítulo 5 de [7].

```

1
2 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
3 % http://www4.ncsu.edu/~zhilin/TEACHING/MA584/index.html %
4 % Example of ADI Method for 2D heat equation %
5 % %
6 %  $u_t = u_{xx} + u_{yy} + f(x,t)$  %
7 % %
8 % Files needed for the test: %
9 % %
10 % adi.m: This file, the main calling code. %
11 % F2dconeF.m: The file defines the f(t,x,y) %
12 % F2dcone.m: The exact solution. %
13 % %
14 %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
15
16 clear ; close all ; clc ;
17
18 a = 0 ; b=1 ; c=0 ; d=1 ; n = 50 ; tfinal=1 ;
19
20 m = n ;
21 h = (b-a)/n ; dt=1/80 ;
22 h1 = h*h ;
23 x=a:h:b ; y=c:h:d ;
24
25 %-- Initial condition :
26 t = 0 ;
27 for i=1:m+1 ,
28     for j=1:m+1 ,
29         u1(i,j) = F2dcone(x(i),y(j),t) ;
30     end
31 end

```



```

32
33  %----- Big loop for time t -----
34  k_t = fix(tfinal/dt);
35
36  for k=1:k_t
37
38      t1 = t+dt; t2 = t+dt/2;
39
40      %-- sweep in x-direction -----
41
42      for i=1:m+1,          % Boundary condition.
43          u2(i,1) = F2dcone(x(i),y(1),t2);
44          u2(i,n+1) = F2dcone(x(i),y(n+1),t2);
45          u2(1,i) = F2dcone(x(1),y(i),t2);
46          u2(m+1,i) = F2dcone(x(m+1),y(i),t2);
47      end
48
49      for j = 2:n,          % Look for fixed y(j)
50
51          A = sparse(m-1,m-1); b = zeros(m-1,1);
52          for i=2:m,
53              b(i-1) = (u1(i,j-1) - 2*u1(i,j) + u1(i,j+1))/h1 + F2dconeF(x(
54                  i),y(j),t2) + 2*u1(i,j)/dt;
55              if i==2
56                  b(i-1) = b(i-1) + F2dcone(x(i-1),y(j),t2)/h1;
57                  A(i-1,i) = -1/h1;
58              else
59                  if i==m
60                      b(i-1) = b(i-1) + F2dcone(x(i+1),y(j),t2)/h1;
61                      A(i-1,i-2) = -1/h1;
62                  else
63                      A(i-1,i) = -1/h1;
64                      A(i-1,i-2) = -1/h1;
65                  end
66              end
67          end
68      end

```

```

65         end
66
67         A(i-1,i-1) = 2/dt + 2/h1;
68     end
69
70     ut = A\b;           % Solve the diagonal matrix.
71     for i=1:m-1,
72         u2(i+1,j) = ut(i);
73     end
74
75 end                    % Finish x-sweep.
76
77 %----- loop in y-direction -----
78
79 for i=1:m+1,          % Boundary condition
80     u1(i,1) = F2dcone(x(i),y(1),t1);
81     u1(i,n+1) = F2dcone(x(i),y(m+1),t1);
82     u1(1,i) = F2dcone(x(1),y(i),t1);
83     u1(m+1,i) = F2dcone(x(m+1),y(i),t1);
84 end
85
86 for i = 2:m,
87
88     A = sparse(m-1,m-1); b = zeros(m-1,1);
89     for j = 2:n,
90         b(j-1) = (u2(i-1,j) - 2*u2(i,j) + u2(i+1,j))/h1 + F2dconeF(x(
91             i),y(j),t2) + 2*u2(i,j)/dt ;
92         if j == 2
93             b(j-1) = b(j-1) + F2dcone(x(i),y(j-1),t1)/h1;
94             A(j-1,j) = -1/h1;
95         else
96             if j == n
97                 b(j-1) = b(j-1) + F2dcone(x(i),y(j+1),t1)/h1;
98                 A(j-1,j-2) = -1/h1;

```

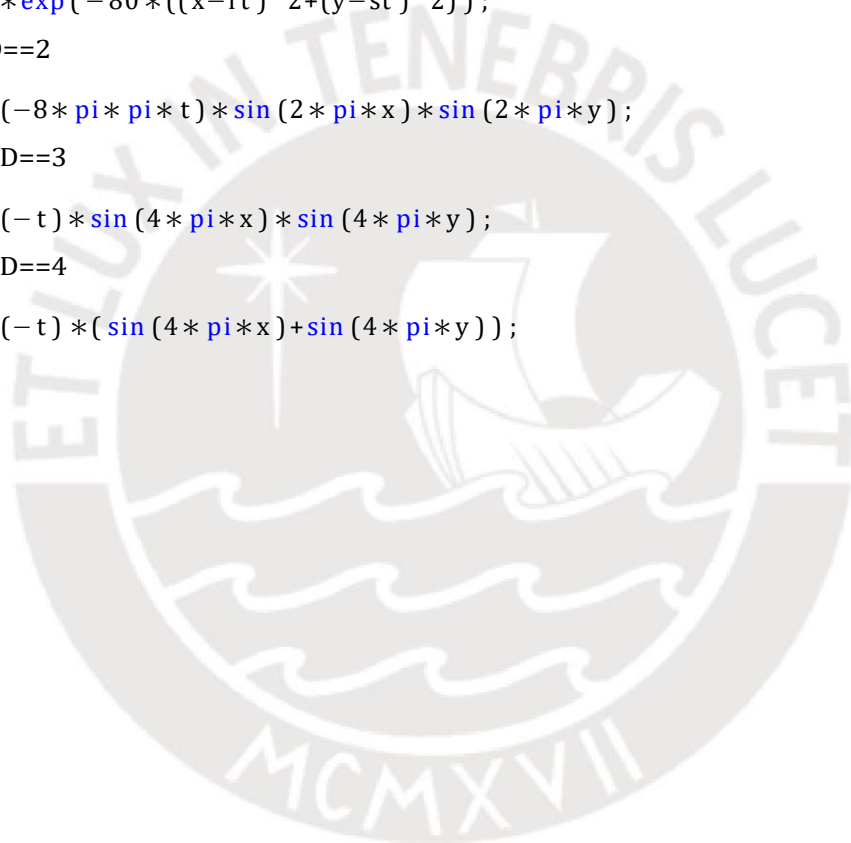
```

98         else
99             A(j-1,j) = -1/h1;
100            A(j-1,j-2) = -1/h1;
101         end
102     end
103
104     A(j-1,j-1) = 2/dt + 2/h1;           % Solve the system
105 end
106
107     ut = A\b;
108     for j=1:n-1
109         u1(i,j+1) = ut(j);
110     end
111
112 end % Finish y-sweep.
113
114     t = t + dt;
115     %--finish ADI method at this time level, go to the next time
116     level.
117 end %-- Finished with the loop in time
118 %----- Data analysis -----
119     for i=1:m+1,
120         for j=1:n+1,
121             ue(i,j) = F2dcone(x(i),y(j),tfinal);
122         end
123     end
124
125     e = max(max(abs(u1-ue)))           % The infinity error.
126     mesh(u1);                          % Plot the computed solution.
127     figure(2); mesh(u1-ue)             % Mesh plot of the error

```

Función F2dcone.m:

```
1 %-----  
2 % Calculate the exact solution of the given PDE  
3  
4 function u2d=F2dcone ( x , y , t )  
5 ID=4 ;  
6 if ID==1  
7     rt=(2+sin ( pi * t )) / 4 ;  
8     st=(2+cos ( pi * t )) / 4 ;  
9     u2d=0.8*exp ( - 80 * (( x - rt ) ^ 2 + ( y - st ) ^ 2 ) ) ;  
10 elseif ID==2  
11     u2d=exp ( - 8 * pi * pi * t ) * sin ( 2 * pi * x ) * sin ( 2 * pi * y ) ;  
12 elseif ID==3  
13     u2d=exp ( - t ) * sin ( 4 * pi * x ) * sin ( 4 * pi * y ) ;  
14 elseif ID==4  
15     u2d=exp ( - t ) * ( sin ( 4 * pi * x ) + sin ( 4 * pi * y ) ) ;  
16 end
```



Función F2dconeF.m:

```

1  % Calculate the RHS function
2
3  function rhsF=F2dconeF ( x , y , t )
4  ID=4 ;
5  if ID==1      % rotating cone model
6      rt=(2+sin ( pi * t ) ) / 4 ;
7      st=(2+cos ( pi * t ) ) / 4 ;
8      tmp=exp ( - 80 * (( x - rt ) ^ 2 + ( y - st ) ^ 2 ) ) ;
9      ut=0.8 * tmp * 40 * pi * (( x - rt ) * cos ( pi * t ) - ( y - st ) * sin ( pi * t ) ) ;
10     uxx=0.8 * tmp * ( 160 ^ 2 * ( x - rt ) ^ 2 - 160 ) ;
11     uyy=0.8 * tmp * ( 160 ^ 2 * ( y - st ) ^ 2 - 160 ) ;
12     rhsF=ut - uxx - uyy ;
13 elseif ID==2  % periodic function model
14     rhsF=0 ;
15 elseif ID==4
16     rhsF=( - 1 + 16 * pi * pi ) * exp ( - t ) * ( sin ( 4 * pi * x ) + sin ( 4 * pi * y ) ) ;
17 end

```