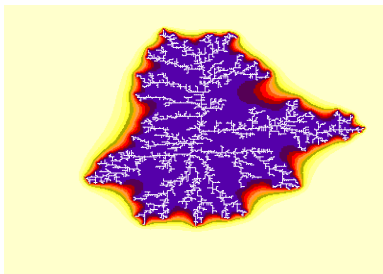


Capítulo 3: Métodos Numéricos Avanzados



Una descarga electrostática fractal

Índice

1. Ecuación de Laplace	3
1.1. 1D: Interpolación vs Splines vs Fit	3
1.1.1. Interpolación Cuadrática	4
1.1.2. Interpolación Cubica	7
1.1.3. Splines Cubicas	8
1.2. Laplace en 1D	9
1.2.1. “Shooting Method”	9
1.2.2. Relajación	12
1.2.3. Elementos finitos	12
1.2.4. Solución directa	16
1.2.5. Transformada de Fourier	17
1.3. Problema en 2-D y 3-D	18
1.3.1. Solución por relajación	18
1.3.2. Solución directa	18
1.3.3. Solución por elementos finitos	20
2. Dieléctricos	22
3. Ecuación de Difusión	24
3.1. Estabilidad de Von Neumann y Condicion de Courant	25
3.2. Transformación de Fourier	26
3.3. Condiciones de Borde	27
3.4. D variable y Método conservativo	28
3.5. Método de Linea	29

4. Propagación de Frentes	31
4.1. Condiciones de Borde	32
4.2. Ecuación no-lineal	34
4.3. Método de conservación de flujo	35
4.4. Características hacia atrás	36
4.5. Características hacia adelante: Moving finite elements	37
4.6. Fast Fourier Transform	38
5. Ecuación de Burgers	39
5.1. Condiciones de Borde libre y método de características	40
5.2. Método Pseudo espectral	40
5.3. Spliting de los operadores	40
6. Ecuación de ondas	41
6.1. Interferencia y difracción	42
7. Fluidos 1D y 2D	43
8. Ecuación de Shrodinger	44
9. guías de onda	45
9.1. problema del valor propio	45
10. Modelos simples de magnetización	46
10.1. Método de MonteCarlo	47
10.2. Dinámica de Espines	48
11. Método de Minimización local	49
12. Métodos de minimización global	49
13. Redes Neuronales	49

1. Ecuación de Laplace

Estamos interesados en resolver numéricamente la ecuación de Laplace y la de Poisson

$$\nabla^2 \Psi = -4\pi\rho$$

con condiciones de borde.

Problema: Resolver el problema de

$$\rho(x) = \sin(\cos[x]) \quad \Psi(0) = 1 \quad \Psi(1) = 4$$

Notemos que NO es un problema de condiciones iniciales que se pueda integrar con métodos estándar como Runge-Kutta, ya que no tenemos $\Psi'(0)$.

1.1. 1D: Interpolación vs Splines vs Fit

En una dimensión, por lo general estamos interesados en evaluar la función $f(x)$ y sus derivadas en una grilla x_n ($n = 0, \dots, N$) donde

$$f_n = f(x_n)$$

y en el caso de una discretización homogénea tenemos $x_n = n\Delta x$. En su formulación más simple, las derivadas se pueden evaluar en forma discreta usando

$$\begin{aligned} \frac{df}{dx}(x) &\approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \\ \frac{d^2 f}{dx^2}(x) &\approx \frac{\frac{df}{dx}\left(x + \frac{\Delta x}{2}, y\right) - \frac{df}{dx}\left(x - \frac{\Delta x}{2}, y\right)}{\Delta x} \\ &\approx \frac{f(x + \Delta x, y) - 2f(x, y) + f(x - \Delta x, y)}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

Dado que

$$\begin{aligned} \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} &\approx +\frac{1}{2\Delta x} \left[f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2 + \frac{1}{6}f'''(x)\Delta x^3 + O(\Delta x^4) \right] \\ &\quad -\frac{1}{2\Delta x} \left[f(x) - f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2 - \frac{1}{6}f'''(x)\Delta x^3 + O(\Delta x^4) \right] \\ &= f'(x) + O(\Delta x^2) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
\frac{f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2} &\approx +\frac{1}{\Delta x^2} \left[f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2 + \frac{1}{6}f'''(x)\Delta x^3 + O(\Delta x^4) \right] \\
&\quad +\frac{1}{\Delta x^2} \left[f(x) - f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2 - \frac{1}{6}f'''(x)\Delta x^3 + O(\Delta x^4) \right] \\
&\quad -\frac{1}{\Delta x^2} [2f(x)] \\
&= f''(x) + O(\Delta x^2)
\end{aligned}$$

vemos que el error en nuestra aproximación es $O(\Delta x^2)$. Notemos que estas aproximaciones funcionan cuando tenemos una **grilla homogénea**, con una separación constante. Ahora buscaremos otro tipo de aproximaciones para evaluar estas derivadas en el intervalo $x_n \leq x \leq x_{n+1}$, que además pueden servir para el caso de una **grilla no-homogénea**.

1.1.1. Interpolación Cuadrática

Supongamos que queremos generar un polinomio de interpolación

$$p(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$$

que pase con los puntos

$$(x_{n-1}, f_{n-1}) \qquad (x_n, f_n) \qquad (x_{n+1}, f_{n+1})$$

El punto (x_n, f_n) se puede incluir fácilmente re-escribiendo el polinomio cuadrático como

$$p(x) = f_n + \alpha_1(x - x_n) + \alpha_2(x - x_n)^2$$

ya que $p(x_n) = f_n$.

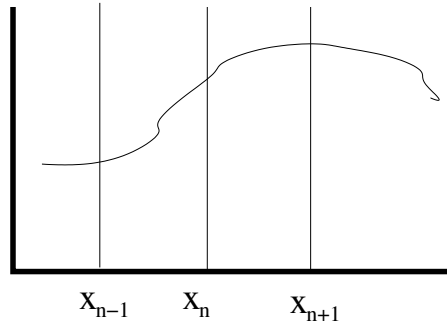


Figura 1: Interpolación cuadrática usando 3 puntos.

Evaluando en los tres puntos que faltan, tenemos que garantizar

$$\begin{aligned} f_{n-1} &= p(x_{n-1}) = f_n + \alpha_1(x_{n-1} - x_n) + \alpha_2(x_{n-1} - x_n)^2 \\ f_{n+1} &= p(x_{n+1}) = f_n + \alpha_1(x_{n+1} - x_n) + \alpha_2(x_{n+1} - x_n)^2 \end{aligned}$$

o en forma matricial

$$\begin{bmatrix} (x_{n-1} - x_n) & (x_{n-1} - x_n)^2 \\ (x_{n+1} - x_n) & (x_{n+1} - x_n)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{n-1} - f_n \\ f_{n+1} - f_n \end{bmatrix}$$

Notemos que el determinante de la matriz es

$$\begin{vmatrix} (x_{n-1} - x_n) & (x_{n-1} - x_n)^2 \\ (x_{n+1} - x_n) & (x_{n+1} - x_n)^2 \end{vmatrix} = (x_{n+1} - x_n)(x_{n-1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})$$

Usando la formula de Cramer, tenemos

$$\alpha_1 = \frac{\begin{vmatrix} \textcolor{red}{(f_{n-1} - f_n)} & (x_{n-1} - x_n)^2 \\ \textcolor{red}{(f_{n+1} - f_n)} & (x_{n+1} - x_n)^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} (x_{n-1} - x_n) & (x_{n-1} - x_n)^2 \\ (x_{n+1} - x_n) & (x_{n+1} - x_n)^2 \end{vmatrix}} = \frac{(f_{n-1} - f_n)(x_{n+1} - x_n)^2 - (f_{n+1} - f_n)(x_{n-1} - x_n)^2}{(x_{n+1} - x_n)(x_{n-1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})}$$

y también

$$\alpha_2 = \frac{\begin{vmatrix} (x_{n-1} - x_n) & \textcolor{red}{(f_{n-1} - f_n)} \\ (x_{n+1} - x_n) & \textcolor{red}{(f_{n+1} - f_n)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} (x_{n-1} - x_n) & (x_{n-1} - x_n)^2 \\ (x_{n+1} - x_n) & (x_{n+1} - x_n)^2 \end{vmatrix}} = \frac{(f_{n+1} - f_n)(x_{n-1} - x_n) - (f_{n-1} - f_n)(x_{n+1} - x_n)}{(x_{n+1} - x_n)(x_{n-1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})}$$

Vemos que para una **grilla no-homogénea** es entonces trivial construir las derivadas

$$\begin{aligned} \frac{df}{dx}(x_n) &= \frac{(f_{n-1} - f_n)(x_{n+1} - x_n)^2 - (f_{n+1} - f_n)(x_{n-1} - x_n)^2}{(x_{n+1} - x_n)(x_{n-1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})} \\ \frac{d^2f}{dx^2}(x_n) &= 2 \frac{(f_{n+1} - f_n)(x_{n-1} - x_n) - (f_{n-1} - f_n)(x_{n+1} - x_n)}{(x_{n+1} - x_n)(x_{n-1} - x_n)(x_{n+1} - x_{n-1})} \end{aligned}$$

mientras que para una **grilla homogénea** con $x_n - x_{n-1} = \Delta x$ obtenemos el resultado anterior

$$\begin{aligned} f'(x_n) &= \frac{f_{n+1} - f_{n-1}}{2\Delta x} \\ f'(x_n) &= \frac{f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

Notar: En nuestro problema con condiciones de borde vamos a tener que exigir muchas veces algunas condiciones en la derivadas en los bordes, las cuales pueden ser encontradas a partir de estas expresiones.

El polinomio de interpolación ahora se puede construir en su forma tradicional

$$p(x) = \omega_{n-1}(x)f_{n-1} + \omega_n(x)f_n + \omega_{n+1}(x)f_{n+1}$$

donde

$$\begin{aligned}\omega_{n-1} &= \frac{(x - x_n)(x - x_{n+1})}{(x_{n-1} - x_n)(x_{n-1} - x_{n+1})} \\ \omega_n &= \frac{(x - x_{n-1})(x - x_{n+1})}{(x_n - x_{n-1})(x_n - x_{n+1})} \\ \omega_{n+1} &= \frac{(x - x_{n-1})(x - x_n)}{(x_{n+1} - x_{n-1})(x_{n+1} - x_n)}\end{aligned}$$

En caso de querer interpolar con un polinomio de orden mayor, por ejemplo de orden n , tendríamos que tener n puntos para encontrar los n coeficientes β_i .

Notemos que podríamos usar otras funciones para interpolar los 3 puntos, por ejemplo

$$f(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \alpha_3 g_3(x)$$

donde $g_1(x)$, $g_2(x)$, y $g_3(x)$ son funciones que conocemos. Evaluando en los tres puntos, tenemos

$$\begin{aligned}f_{n-1} &= f(x_{n-1}) = \alpha_1 g_1(x_{n-1}) + \alpha_2 g_2(x_{n-1}) + \alpha_3 g_3(x_{n-1}) \\ f_n &= f(x_n) = \alpha_1 g_1(x_n) + \alpha_2 g_2(x_n) + \alpha_3 g_3(x_n) \\ f_{n+1} &= f(x_{n+1}) = \alpha_1 g_1(x_{n+1}) + \alpha_2 g_2(x_{n+1}) + \alpha_3 g_3(x_{n+1})\end{aligned}$$

o en forma matricial

$$\begin{bmatrix} g_1(x_{n-1}) & g_2(x_{n-1}) & g_3(x_{n-1}) \\ g_1(x_n) & g_2(x_n) & g_3(x_n) \\ g_1(x_{n+1}) & g_2(x_{n+1}) & g_3(x_{n+1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{n-1} \\ f_n \\ f_{n+1} \end{bmatrix}$$

Usando la formula de Cramer, podemos resolver por los coeficientes

$$\alpha_1 = \frac{\begin{vmatrix} \textcolor{red}{f}_{n-1} & g_2(x_{n-1}) & g_3(x_{n-1}) \\ \textcolor{red}{f}_n & g_2(x_n) & g_3(x_n) \\ \textcolor{red}{f}_{n+1} & g_2(x_{n+1}) & g_3(x_{n+1}) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} g_1(x_{n-1}) & g_2(x_{n-1}) & g_3(x_{n-1}) \\ g_1(x_n) & g_2(x_n) & g_3(x_n) \\ g_1(x_{n+1}) & g_2(x_{n+1}) & g_3(x_{n+1}) \end{vmatrix}} \quad \alpha_2 = \frac{\begin{vmatrix} g_1(x_{n-1}) & \textcolor{red}{f}_{n-1} & g_3(x_{n-1}) \\ g_1(x_n) & \textcolor{red}{f}_n & g_3(x_n) \\ g_1(x_{n+1}) & \textcolor{red}{f}_{n+1} & g_3(x_{n+1}) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} g_1(x_{n-1}) & g_2(x_{n-1}) & g_3(x_{n-1}) \\ g_1(x_n) & g_2(x_n) & g_3(x_n) \\ g_1(x_{n+1}) & g_2(x_{n+1}) & g_3(x_{n+1}) \end{vmatrix}} \quad \alpha_3 = \frac{\begin{vmatrix} g_1(x_{n-1}) & g_2(x_{n-1}) & \textcolor{red}{f}_{n-1} \\ g_1(x_n) & g_2(x_n) & \textcolor{red}{f}_n \\ g_1(x_{n+1}) & g_2(x_{n+1}) & \textcolor{red}{f}_{n+1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} g_1(x_{n-1}) & g_2(x_{n-1}) & g_3(x_{n-1}) \\ g_1(x_n) & g_2(x_n) & g_3(x_n) \\ g_1(x_{n+1}) & g_2(x_{n+1}) & g_3(x_{n+1}) \end{vmatrix}}$$

1.1.2. Interpolación Cubica

Supongamos que queremos generar un polinomio de interpolación

$$p(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3$$

que pase con los puntos

$$(x_{n-1}, f_{n-1}) \quad (x_n, f_n) \quad (x_{n+1}, f_{n+1}) \quad (x_{n+2}, f_{n+2})$$

El punto (x_n, f_n) se puede incluir fácilmente re-escribiendo el polinomio cuadrático como

$$p(x) = f_n + \alpha_1(x - x_n) + \alpha_2(x - x_n)^2 + \alpha_3(x - x_n)^3$$

ya que $p(x_n) = f_n$.

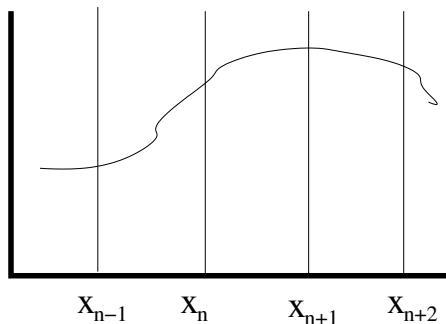


Figura 2: Interpolación cubica usando 4 puntos

Evaluando en los tres puntos que faltan, tenemos que garantizar

$$f_{n-1} = p(x_{n-1}) = f_n + \alpha_1(x_{n-1} - x_n) + \alpha_2(x_{n-1} - x_n)^2 + \alpha_3(x_{n-1} - x_n)^3$$

$$f_{n+1} = p(x_{n+1}) = f_n + \alpha_1(x_{n+1} - x_n) + \alpha_2(x_{n+1} - x_n)^2 + \alpha_3(x_{n+1} - x_n)^3$$

$$f_{n+2} = p(x_{n+2}) = f_n + \alpha_1(x_{n+2} - x_n) + \alpha_2(x_{n+2} - x_n)^2 + \alpha_3(x_{n+2} - x_n)^3$$

o en forma matricial

$$\begin{bmatrix} (x_{n-1} - x_n) & (x_{n-1} - x_n)^2 & (x_{n-1} - x_n)^3 \\ (x_{n+1} - x_n) & (x_{n+1} - x_n)^2 & (x_{n+1} - x_n)^3 \\ (x_{n+2} - x_n) & (x_{n+2} - x_n)^2 & (x_{n+2} - x_n)^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{n-1} - f_n \\ f_{n+1} - f_n \\ f_{n+2} - f_n \end{bmatrix}$$

Usando la regla de Cramer, podemos resolver este problema para el caso general. Para una grilla homogénea con $x_n = n\Delta x$ podemos evaluar

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= -\frac{2f_{n-1} + 3f_n - 5f_{n+1}}{6\Delta x} \\
\alpha_2 &= \frac{f_{n-1} - 2f_n + f_{n+1}}{2\Delta x^2} \\
\alpha_3 &= -\frac{f_{n-1} - 3f_n + 2f_{n+1}}{6\Delta x^3}
\end{aligned}$$

y por lo tanto las derivadas son

$$\begin{aligned}
\frac{df}{dx}(x_n) &= -\frac{2f_{n-1} + 3f_n - 5f_{n+1}}{6\Delta x} \\
\frac{d^2f}{dx^2}(x_n) &= \frac{f_{n-1} - 2f_n + f_{n+1}}{\Delta x^2} \\
\frac{d^3f}{dx^3}(x_n) &= -\frac{f_{n-1} - 3f_n + 2f_{n+1}}{\Delta x^3}
\end{aligned}$$

Notemos que la segunda derivada es la misma que en la interpolación cuadrática.

1.1.3. Splines Cubicas

Supongamos que tenemos una función evaluada en los puntos $x_n = n\Delta x$, con valores f_n , para $n = 0, \dots, N$. Nos gustaría escribir una función cubica que interpole todos estos puntos. Esto implica usar la interpolación cubica entre $x_n \leq x \leq x_{n+1}$

$$P_n(x) = f_n + \alpha_{n,1}(x - x_n) + \alpha_{n,2}(x - x_n)^2 + \alpha_{n,3}(x - x_n)^3$$

con los parámetros $\alpha_{n,1}$, $\alpha_{n,2}$ y $\alpha_{n,3}$ para $n = 0, \dots, N - 1$. Primero debemos exigir continuidad en x_n , dando

$$P_n(x_{n+1}) = f_{n+1} \quad \rightarrow \quad f_n + \alpha_{n,1}\Delta x + \alpha_{n,2}\Delta x^2 + \alpha_{n,3}\Delta x^3 = f_{n+1}$$

para $n = 0, \dots, N - 1$. Aun nos faltan otras condiciones para poder determinar el sistema. Una posibilidad es exigir continuidad en x_n en la primera

$$P'_n(x_n) = P'_{n-1}(x_n) \quad \rightarrow \quad \alpha_{n,1} = \alpha_{n-1,1} + 2\alpha_{n-1,2}\Delta x + 3\alpha_{n-1,3}\Delta x^2$$

y segunda derivada

$$P''_n(x_n) = P''_{n-1}(x_n) \quad \rightarrow \quad 2\alpha_{n,2} = 2\alpha_{n-1,2} + 6\alpha_{n-1,3}\Delta x$$

para $n = 1, \dots, N - 1$. Las 2 condiciones que faltan, por lo general dependen de las condiciones de borde que queramos exigir:

1. Si el problema exige una condiciones particular en el borde, ya sea sobre la función, o alguna de sus derivadas, esta se pueden implementar directamente

2. Si el problema es periódico, entonces podemos asignar $x_N \rightarrow x_0$ e imponer que $f_0 = f_N$. Para poder encontrar una solución tenemos que también incluir una condición sobre las derivadas

$$\begin{aligned} P'_{N-1}(x_N) &= P'_0(x_0) & \rightarrow & \alpha_{N-1,1} + 2\alpha_{N-1,2}\Delta x + 3\alpha_{N-1,3}\Delta x^2 = \alpha_{0,1} \\ P''_{N-1}(x_N) &= P''_0(x_0) & \rightarrow & 2\alpha_{N-1,2} + 6\alpha_{N-1,3}\Delta x = 2\alpha_{0,2} \end{aligned}$$

3. En el caso de no haber restricciones podemos exigir

$$P''_0(x_0) = P''_{N-1}(x_N) = 0$$

Estas relaciones se tienen que invertir, lo cual se puede hacer con un método matricial, o con un método directo. También podemos notar que el caso de una **grilla no-homogénea** sigue un procedimiento muy similar.

1.2. Laplace en 1D

Supongamos que para el caso en una dimensión tenemos que resolver

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \theta(x) = -4\pi \sin(\cos[x]) \quad \Psi(0) = 1 \quad \Psi(L) = 4$$

En principio la solución se puede escribir como

$$\Psi(x) = \Psi(0) + \Psi'(0)x + \int_0^x dz \int_0^z \theta(y)dy$$

con lo cual requerimos poder realizar la integral y evaluarla sobre la grilla, por ejemplo usando el método del trapecioide

$$\begin{aligned} f(x_n) &= \int_0^{x_n} \theta(x)dx = \sum_{m=1}^n \frac{1}{2} [\theta(x_m) + \theta(x_{m-1})] (x_m - x_{m-1}) \\ g(x_n) &= \int_0^{x_n} dx \int_0^x \theta(y)dy = \sum_{m=1}^n \frac{1}{2} [f(x_m) + f(x_{m-1})] (x_m - x_{m-1}) \end{aligned}$$

Con esto podemos evaluar

$$\Psi'(0) = \frac{1}{L} [\Psi(L) - \Psi(0) - g(x_N)]$$

con la grilla definida en x_n ($n = 0, \dots, N$) con $x_N = L$. El caso de condiciones periódicas se puede resolver en forma similar.

1.2.1. “Shooting Method”

Este mismo problema lo podemos resolver usando un “método de disparo”. Notemos que si supiéramos $\Psi'(0)$ podemos integrar esta ecuación en forma numérica usando Runge-Kutta directamente. Para una ecuación diferencial en cualquier dimensión

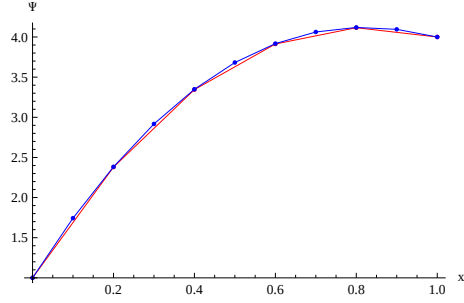


Figura 3: Solución al problema en una dimensión usando la formulación integral para $N = 5$ (azul) y $N = 10$ (rojo).

$$\dot{y} = F(y, x)$$

A partir de $y(t)$ podemos escribir una solución numérica

$$y(x + \Delta x) = y(x) + \frac{1}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$$

donde

$$\begin{aligned} k_1 &= \Delta x F[y(t), x] \\ k_2 &= \Delta x F\left[y(t) + \frac{1}{2}k_1, x + \frac{\Delta x}{2}\right] \\ k_3 &= \Delta x F\left[y(t) + \frac{1}{2}k_2, x + \frac{\Delta x}{2}\right] \\ k_4 &= \Delta x F[y(t) + k_3, x + \Delta x] \end{aligned}$$

Si ahora tomamos un arbitrario para $\Psi'(0)$ podemos integrar numéricamente usando el método de Runge-Kutta directamente para obtener una solución numérica $\bar{\Psi}(\Psi'(0), L = 1)$ en $x = L$. Si definimos $y_1 = \Psi(x)$ y $y_2 = \Psi'(x)$, podemos definir

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= y_2 \\ \frac{dy_2}{dx} &= \theta(x) \end{aligned}$$

con lo cual podemos encontrar el valor de $s = \bar{\Psi}(1)$ dado un valor inicial $\Psi'(0)$. Tenemos que encontrar el cero de la función

$$g(s) = \bar{\Psi}(s, L = 1) - \Psi(1)$$

que equivale encontrar el valor de $s = \Psi'(0)$ que de $\Psi(1) = 4$. Esto se puede hacer con el método de la secante dados dos valores iniciales $s_0 = 1$, $s_1 = 3$,

$$s_{n+1} = s_n - g(s_n) \frac{s_n - s_{n-1}}{g(s_n) - g(s_{n-1})}$$

el cual converge rápidamente a $s \rightarrow 7,2$, y la solución se muestra en la Fig. 4.

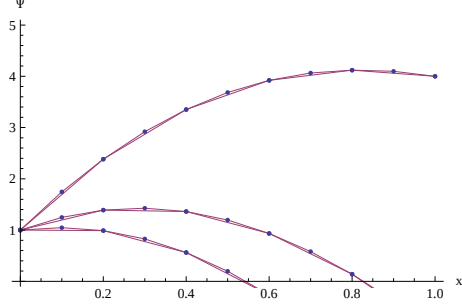


Figura 4: Convergencia de la solución de “shooting method” al problema en una dimensión para $N = 5$ y $N = 10$.

En el caso que la solución sea muy inestable numéricamente, es factible construir un “multi shooting method” en el cual por ejemplo se puede integrar numéricamente desde $x = 0 \rightarrow L/2$ y de $x = L \rightarrow L/2$. Así, dado

- $s^{(1)} = \psi'(0)$ obtenemos $\Psi^{(1)}(L/2)$ y $(d/dx)\Psi^{(1)}(L/2)$
- $s^{(2)} = \psi'(L)$ obtenemos $\Psi^{(2)}(L/2)$ y $(d/dx)\Psi^{(2)}(L/2)$

La solución a nuestro problema se puede lograr encontrando un cero de

$$g = [\Psi^{(1)}(L/2) - \Psi^{(2)}(L/2)]^2 + \left[\frac{d\Psi^{(1)}}{dx}(L/2) - \frac{d\Psi^{(2)}}{dx}(L/2) \right]^2$$

sobre las condiciones iniciales $s^{(1)}$ y $s^{(2)}$.

Esto también se puede lograr minimizando la distancia

$$g(s^{(1)}, s^{(2)}) = |\Psi^{(2)}(L/2) - \Psi^{(1)}(L/2)|$$

sobre $s^{(1)}$ y $s^{(2)}$. Aunque existen muchos métodos para lograr esto, una forma eficiente de construir una solución para un problema simple como este es usar un minimizador en la dirección de la gradiente, esto es

$$s_{n+1}^{(\beta)} = s_n^{(\beta)} - \alpha \left[\frac{g(s_n^{(1)}, s_n^{(2)}) - g(s_{n-1}^{(1)}, s_{n-1}^{(2)})}{s_n^{(\beta)} - s_{n-1}^{(\beta)}} \right]$$

para $\beta = 1, 2$ con un valor α a elegir. Notemos que este método se puede mejorar adaptando α_n en cada iteración o usando diferentes valores de $\alpha^{(\beta)}$ para cada variable. Por ejemplo si en una iteración no logramos bajar la función, α puede ser multiplicado en forma iterativa por un factor $0 < \gamma_r < 1$ hasta que la función decrezca. Cuando la función decrece podemos multiplicar α por un factor $\gamma_i > 1$.

1.2.2. Relajación

Este problema también se puede resolver por relajación. Primero discretizamos Ψ_n sobre la grilla $x_n = n\Delta x$ ($n = 0, \dots, N$) garantizando que $\Psi_0 = \Psi(0)$ y $\Psi_N = \Psi(L)$. Usando nuestra para la segunda derivada podemos escribir

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} - 2\Psi_n = \Delta x^2 \theta_n \quad n = 1, \dots, N-1$$

Podemos re-ordenar esta expresión como

$$\Psi_n = \frac{1}{2} [\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} - \Delta x^2 \theta_n]$$

y plantear la solución como una convergencia a “punto fijo”. Para esto planteamos una semilla inicial lineal

$$\Psi_n^{(0)} = \Psi(0) + [\Psi(L) - \Psi(0)] \frac{n}{N}$$

y luego iteramos la expresión

$$\Psi_n^{(m+1)} = \frac{1}{2} [\Psi_{n+1}^{(m)} + \Psi_{n-1}^{(m)} - \Delta x^2 \theta_n]$$

hasta que converja. La convergencia se puede medir como

$$\epsilon(m) = \max_n |\Psi_{n+1}^{(m)} + \Psi_{n-1}^{(m)} - \Delta x^2 \theta_n - 2\Psi_n^{(m)}| = \max_n |\Psi_n^{(m)} - \Psi_n^{(m-1)}|$$

y se observa

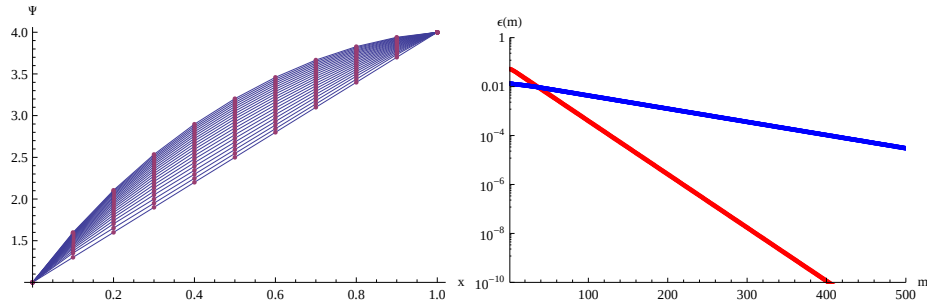


Figura 5: Convergencia de la solución de relajación al problema en una dimensión para $N = 10$ (rojo) y $N = 20$ (azul).

1.2.3. Elementos finitos

Podemos tratar de escribir la función $f(x)$ en termino de funciones localizadas

$$\Psi(x) = \sum_i \Psi_i h_i(x)$$

donde $h_i(x)$ es el elemento finito alrededor del punto de la grilla (x_i). Por ejemplo,

$$h_i(x) = \begin{cases} 1 - \frac{|x - x_i|}{\Delta x} & |x - x_i| \leq \Delta x \\ 0 & |x - x_i| > \Delta x \end{cases}$$

con $x_i = i\Delta x$. Pero hay otras posibilidades como una cuadrática centrada en x_i o una Gaussiana centrada en x_i

$$h_i(x) = \exp \left[- \left(\frac{x - x_i}{\sigma} \right)^2 \right]$$

La idea es calcular la integral de arriba en función de f_i .

Ejemplo: Supongamos que queremos resolver el mismo problema de arriba

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \theta(x) = -4\pi \sin(\cos[x])$$

con

$$\Psi(0) = 1 \quad \Psi(1) = 4$$

Para los elementos finitos Gaussianos, podemos definir

$$\Psi(x) = \sum_i \Psi_i h_i(x)$$

Si multiplicamos la ecuación de arriba por

$$\int_0^L dx h_j(x) \times \left[\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \theta(x) \right]$$

para $j = 1, \dots, N-1$, podemos escribir en forma matricial

$$\sum_i \Psi_i \int_0^L dx h_i''(x) h_j(x) = \int_0^L \theta(x) h_j(x) dx$$

Además tenemos las condiciones de borde

$$\Psi(0) = \sum_i \Psi_i h_i(0) \quad \Psi(L) = \sum_i \Psi_i h_i(L)$$

Podemos por lo tanto invertir estas relaciones para obtener la Fig. 6.

Ejemplo: Supongamos que queremos resolver el mismo problema de arriba

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \theta(x) = -4\pi \sin(\cos[x])$$

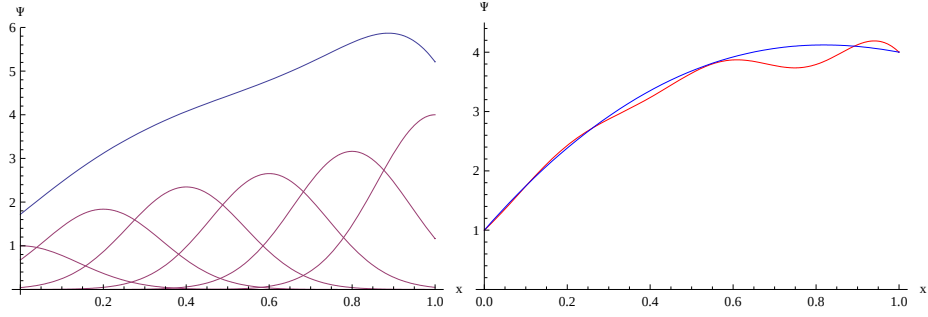


Figura 6: (a) Definición de los elementos finitos Gaussianos. (b) Convergencia de la solución por elementos finitos al problema en una dimensión para $N = 5$ (rojo) y $N = 20$ (azul), para $\sigma = 0,2$.

con

$$\Psi(0) = 1 \quad \Psi(1) = 4$$

Es posible escribir este problema como el funcional

$$S[f] = \int \mathcal{L} dx$$

donde

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \Psi'^2 + \theta(x) \Psi$$

Luego de optimizar esta expresión sobre los valores desconocidos de f_i , obtenemos la solución esperada. Por lo tanto re-escribmos la acción como

$$S[\{\Psi_i\}] = \frac{1}{2} \sum_{i,j=0}^N \Psi_i \Psi_j \int_0^1 dx h'_i(x) h'_j(x) + \sum_{i=0}^N \Psi_i \int_0^1 dx h'_i(x) \theta(x)$$

Con la definición

$$A_{i,j} = \int_0^1 dx h'_i(x) h'_j(x)$$

y

$$b_i = \int_0^1 dx h'_i(x) \theta(x)$$

donde $i = 0, \dots, N$ y $j = 0, \dots, N$. Entonces se puede escribir como una matriz actuando sobre el vector $\bar{\Psi} = (\Psi_0, \dots, \Psi_N)$,

$$S[\bar{\Psi}] = \frac{1}{2} \bar{\Psi}^T A \bar{\Psi} + \bar{\Psi}^T b$$

Notemos que las condiciones de borde tienen que ser satisfechas por

$$\Psi(0) = \sum_i \Psi_i h_i(0) \quad \Psi(1) = \sum_i \Psi_i h_i(1)$$

que se usan para despejar dos Ψ_i . Para nuestros elementos finitos triangulares tenemos

$$\Psi_0 = 1 \quad \Psi_N = 4$$

Con estos elementos finitos podemos calcular inmediatamente

$$A = \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

por lo tanto

$$S = \frac{1}{2} \sum_{n,m=0}^N \Psi_n A_{n,m} \Psi_m + \sum_{n=0}^N b_n \Psi_n$$

Si ahora buscamos el óptimo

$$\frac{dS}{d\Psi_i} = 0 \quad i = 1, \dots, N-1$$

obtenemos

$$\sum_{n=0}^N A_{i,n} \Psi_n + b_i = 0 \quad i = 1, \dots, N-1$$

porque la matriz A es simétrica. Notemos que las condiciones de borde están incluidas aquí ya que la sumatoria va de $n = 0$ hasta $m = N$. Separemos los términos correspondientes a condiciones de borde

$$\sum_{n=1}^{N-1} A_{i,n} \Psi_n = -b_i - A_{i,0} \Psi_0 - A_{i,N} \Psi_N = \bar{b}_i \quad i = 1, \dots, N-1$$

Podemos re-escribir entonces esto como

$$\bar{A} \bar{\Psi} = \bar{b}$$

y la solución es entonces

$$\bar{\Psi} = \bar{A}^{-1} \bar{b}$$

Problemas mas complicados también se pueden enfrentar.

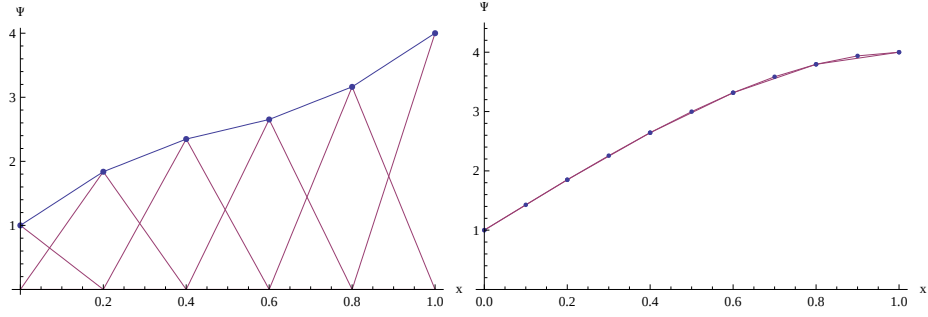


Figura 7: (a) Definición de los elementos finitos. (b) Convergencia de la solución por elementos finitos al problema en una dimensión para $N = 5$.

1.2.4. Solución directa

Notemos que también podemos plantear el problema en forma directa, ya sea usando la expresión en termino de elementos finitos

$$\Psi = \sum_i \Psi_i h_i(x)$$

o en termino de las derivadas discretas que definimos arriba. Por ejemplo en termino de diferencias finitas podemos escribir

$$\Psi_{n+1} - 2\Psi_n + \Psi_{n-1} = \Delta x^2 \theta_n$$

para $n = 1, \dots, N - 1$. Si además imponemos las condiciones de borde

$$\Psi_0 = \Psi(0) \quad \Psi_N = \Psi(L)$$

Podemos escribir la matriz

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

y el vector

$$b = \begin{bmatrix} \Delta x^2 \theta_1 - \Psi_0 \\ \Delta x^2 \theta_2 \\ \dots \\ \Delta x^2 \theta_{N-2} \\ \Delta x^2 \theta_{N-1} - \Psi_N \end{bmatrix}$$

la solución es entonces

$$A\Psi = b \quad \rightarrow \quad \Psi = A^{-1} b$$

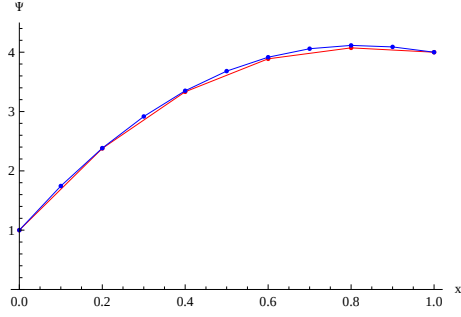


Figura 8: Solución directa al problema en una dimensión para $N = 5$ (rojo) y $n = 10$ (azul).

1.2.5. Transformada de Fourier

En el caso de una solución periódica, o incluso con condiciones fijas, es viable expandir la solución as

$$\Psi(x) = \Psi(0) + (\Psi(L) - \Psi(0))\frac{x}{L} + \sum_m A_m \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right)$$

Notemos que la función

$$f(x) = \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right)$$

satisface $f(0) = f(L) = 0$ que es lo apropiado para resolver nuestro problema. Dado que

$$\frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

podemos encontrar de la ecuación de movimiento que

$$A_m = -\left(\frac{L}{m\pi}\right)^2 \frac{2}{L} \int_0^L \theta(x) \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right) dx$$

y por lo tanto obtenemos la solución de la Fig. 9.

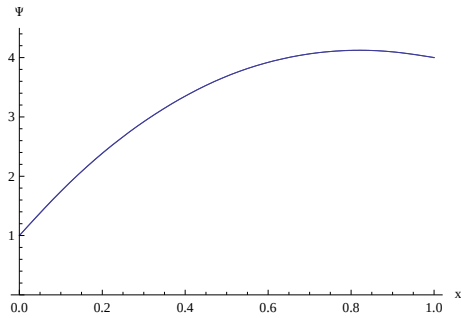


Figura 9: Solución por serie de Fourier al problema en una dimensión para $N = 5$.

1.3. Problema en 2-D y 3-D

Para el caso de una dimensión tenemos que resolver

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{d^2\Psi}{dy^2} = -4\pi\rho(x, y) \quad \Psi|_{\Omega}$$

en el borde.

1.3.1. Solución por relajación

Si asumimos una discretización para el Laplaciano podemos intentar resolver el problema por relajación.

$$\Psi_{i,j}^{(n+1)} = \frac{1}{4} \left[\Psi_{i+1,j}^{(n)} + \Psi_{i-1,j}^{(n)} + \Psi_{i,j+1}^{(n)} + \Psi_{i,j-1}^{(n)} \right] + \frac{1}{4} \Delta x^2 \theta_{i,j}$$

asumiendo una condición de borde conocida, la solución converge a la actual solución de la ecuación de Poisson. En otros sistemas de coordenadas es necesario discretizar apropiadamente. La extensión a 1D o 2D es trivial.

Problema: Descargas fractales

Asumamos que definimos una descarga fractal como un sistema de puntos adyacentes que están en un potencial fijo $\Psi = 1$, y el infinito (en este caso, un círculo de radio R) en $\Psi = 0$. Dada esta configuración de potencial, podemos usar el método de relajación para calcular el potencial en cualquier lado. En dos dimensiones el método de relajación es

$$\Psi_{i,j}^{(n+1)} = \frac{1}{4} \left[\Psi_{i+1,j}^{(n)} + \Psi_{i-1,j}^{(n)} + \Psi_{i,j+1}^{(n)} + \Psi_{i,j-1}^{(n)} \right]$$

Por lo tanto conocemos el campo eléctrico en cualquier lado, y especialmente en los puntos adyacentes a la descarga. La descarga se desarrollará agregando en los puntos adyacentes a la descarga. Un punto tiene la probabilidad de ser agregado a la descarga proporcional a un poder η en el campo eléctrico local

$$P_{i,j} \sim E_{i,j}^{\eta}$$

Una vez que el punto es agregado, recalculamos el potencial y repetimos la operación. Usamos el código de potencial escrito en C++ para calcular el fractal siguiente. El resultado está dado para $\eta = 1,0$

El potencial es mostrado como los contornos de color. Obviamente si $\eta = 0$ tenemos una estructura en dos dimensiones, en cambio si η va hacia infinito tenemos una línea de una dimensión.

1.3.2. Solución directa

También es posible construir una solución numérica resolviendo la ecuación de Laplace en forma directa desde su discretización. Esto funciona correctamente para condiciones de borde razonables. En forma implícita podemos escribir en la aproximación a primer orden de las derivadas

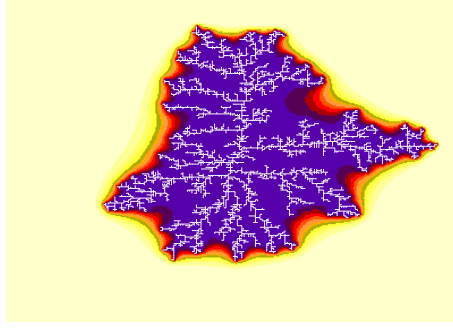


Figura 10: Descarga Fractal

$$\frac{\Psi_{i+1,j} + \Psi_{i-1,j} - 2\Psi_{i,j}}{\Delta x^2} + \frac{\Psi_{i,j+1} + \Psi_{i,j-1} - 2\Psi_{i,j}}{\Delta y^2} = -4\pi\rho_{i,j}$$

Tenemos que resolver este set implícito de relaciones, pero donde están mezclados condiciones de borde con valores que desconocemos. La idea es separar los valores que conocemos de los valores desconocidos en forma explícita

$$A\Psi = B \quad \rightarrow \quad \Psi = A^{-1}B$$

La única complicación es ordenar correctamente los índices en la Matriz. Notemos que otras discretizaciones son también posibles. Lo interesante, es que en principio una vez que resolvemos un problema, todos los otros problemas (con condiciones de borde similares) están resueltos.

Problema: Lente electrostático. Pretendemos resolver el problema

$$\Psi(x < 1, y = \pm 0,5) = \Psi(x > 4, y = \pm 0,5) = -1 \quad \Psi(2 < x < 3, y = \pm 0,5) = 0$$

en $[0, 5] \times [-0,5, 0,5]$ con una interpolación lineal entre los electrodos en el borde. Al invertir la matriz podemos encontrar la solución, la que se muestra en la Fig. 11.

Para ver la efectividad de este lente, como parte de un microscopio electrónico, tenemos que calcular las trayectorias de los electrones

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{e}{m}\nabla\Psi$$

y ahora podemos programar el calculo de la trayectoria de electrones, para lo cual necesitamos el interpolar el campo eléctrico en todo el espacio. Podemos utilizar una interpolación en 2 dimensiones para tener el potencial, y por ende el campo eléctrico en toda la región de interés.

O mejor aun, interpolando directamente el campo eléctrico en la grilla

$$(E_x)_{i,j} = \frac{\Psi_{i+1,j} - \Psi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (E_y)_{i,j} = \frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j-1}}{2\Delta x}$$

La interpolación mas trivial para $x_i < x < x_{i+1}$, $y_j < y < y_{j+1}$

$$f(x, y) = \Psi_{i,j} + \alpha_1(x - x_i) + \alpha_2(y - y_i) + \alpha_3(x - x_i)(y - y_i)$$

la que requiere resolver

$$\begin{bmatrix} \Delta x & 0 & 0 \\ 0 & \Delta x & 0 \\ \Delta x & \Delta x & \Delta x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Psi_{i+1,j} - \Psi_{i,j} \\ \Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j} \\ \Psi_{i+1,j+1} - \Psi_{i,j} \end{bmatrix}$$

para una grilla homogénea. El caso de una grilla no-homogénea (por ejemplo si $\Delta x \neq \Delta y$ se puede construir usando las ideas descritas arriba para estas grillas. También se pueden construir interpolaciones de mayor orden usando un mayor numero de puntos. También se puede hacer una spline en 2 dimensiones.

La distancia focal se puede calcular numéricamente a partir de electrones que vienen de la izquierda en forma horizontal como se ve en la Fig. 11, que muestra que el lente electrostático es convergente.

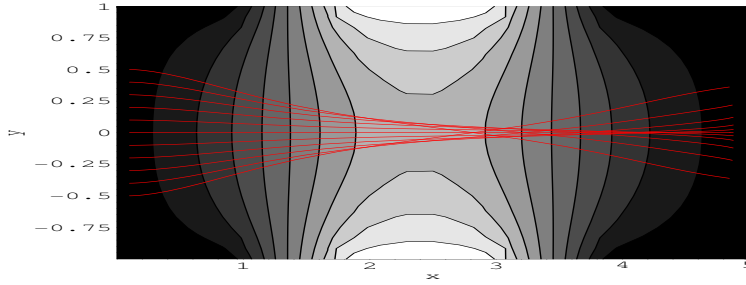


Figura 11: Solución al problema en dos dimensiones con las trayectorias de electrones superpuestos. La trayectoria de los electrones en un lente electrostático definen la distancia focal del lente. Esto es un lente convergente.

Las trayectorias en rojo se calcularon numéricamente utilizando

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{q}{m} \nabla \Psi$$

Notemos que podemos normalizar

$$\bar{\Psi} = \frac{\Psi}{V_o} \quad y = \frac{x}{L} \quad \tau = v_o t$$

con lo cual todo el problema queda determinado en termino de un parámetro a-dimensional. Es factible entonces graficar la distancia focal y la magnificación del lente electrostático como función de este parámetro.

1.3.3. Solución por elementos finitos

En realidad el método de elementos finitos tiene que ver con un procedimiento mas general para resolver problemas de este tipo. Notemos que la ecuación de Laplace viene de un principio de optimización

$$L[\Psi] = \int ((\nabla \Psi)^2 - 4\pi\rho\Psi) dx^3 \quad \rightarrow \quad \delta L = 0 \rightarrow \nabla^2 \Psi = -4\pi\rho$$

Por lo tanto uno puede asumir una forma de interpolación

$$\Psi(x, y) = \sum_{i,j} \Psi_{i,j} h(x, y, x_i, y_j)$$

donde $h(x, y, x_i, y_i)$ es el elemento finito alrededor del punto de la grilla (x_i, y_j) . Usando una aproximación lineal

$$h(x, y, x_i, y_i) = h(x, x_i)h(y, y_i)$$

donde

$$h(x, x_i) = \begin{cases} 1 - \frac{|x - x_i|}{\Delta x} & |x - x_i| \leq \Delta x \\ 0 & |x - x_i| > \Delta x \end{cases}$$

con $x_i = i\Delta x$, se puede calcular la integral de arriba. Luego optimizamos esta expresión sobre los valores desconocidos de $\Psi_{i,j}$. Aquí lo importante es ordenar apropiadamente los índices para poder escribir este problema como

$$\bar{A}\Psi = \bar{b}$$

y la solución es entonces

$$\bar{\Psi} = \bar{A}^{-1}\bar{b}$$

donde $\bar{b}$ contiene información sobre las condiciones de borde, y $\bar{A}$ es una matriz conocida.

Si tenemos condiciones de borde donde otro sistema de coordenadas es razonable, tenemos que evaluar el funcional en forma apropiada.

Cuando las condiciones de borde no son regulares o rectangulares, es conveniente usar una grilla no rectangular. Para estos casos es muy común utilizar una grilla triangular (la mayoría de las veces se utiliza una grilla variable con en la Fig. 12).

Para estos casos, conviene utilizar una interpolación lineal dentro de cada triángulo

$$\Psi_i(x, y) \approx a_{i,0} + a_{i,1}x + a_{i,2}y$$

donde los coeficientes van variando en cada triángulo de área A_i y dependen de la posición de los tres puntos que definen cada triángulo. Es posible hacer una transformación de una interpolación dentro de los triángulos a una descripción en termino de elementos finitos sobre cada punto de la grilla, pero estos

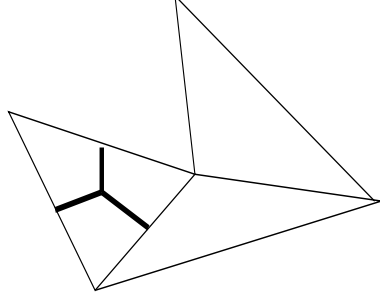


Figura 12: Grilla triangular variable

claramente dependen de la posición de los otros puntos del triángulo. El caso de una grilla regular es mas fácil. Notemos que el Lagrangiano en dos dimensiones es

$$\int (\nabla \Psi)^2 dx^2 = \sum A_i (a_{i,1}^2 + a_{i,2}^2)$$

donde la suma es sobre los triángulos. Notemos que puede ser mas fácil organizar computacionalmente los triángulos en termino de un método de refinamiento de la grilla, en lo que se llama un método adaptivo.

2. Dieléctricos

Hay una manera simple para resolver la ecuación para el potencial cuando incluimos dieléctricos

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \Psi) = - = 4\pi \rho$$

Integrando sobre el volumen de una esfera de radio Δx , podemos encontrar que

$$\oint_{\partial\Omega} \epsilon \nabla \Psi \cdot \hat{n} dS \approx -\frac{4\pi}{\Delta} x \Delta y \Delta z \rho_{i,j,k}$$

con lo cual podemos estimar numéricamente la integral de superficie

$$\begin{aligned} \oint_{\partial\Omega} \epsilon \nabla \Psi \cdot \hat{n} dS &= \epsilon_{i+1/2,j,k} (\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{x}})_{i+1/2,j,k} + \epsilon_{i-1/2,j,k} (-\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{x}})_{i-1/2,j,k} \\ &+ \epsilon_{i,j+1/2,k} (\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{y}})_{i,j+1/2,k} + \epsilon_{i,j-1/2,k} (-\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{y}})_{i,j-1/2,k} \\ &+ \epsilon_{i,j,k+1/2} (\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{z}})_{i,j,k+1/2} + \epsilon_{i,j,k-1/2} (-\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{z}})_{i,j,k-1/2} \end{aligned}$$

donde

$$(\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{x}})_{i+1/2,j,k} = \left. \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|_{i+1/2,j,k} = \frac{\Psi_{i+1,j,k} - \Psi_{i,j,k}}{\Delta x}$$

$$(\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{y}})_{i,j+1/2,k} = \left. \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right|_{i,j+1/2,k} = \frac{\Psi_{i,j+1,k} - \Psi_{i,j,k}}{\Delta y}$$

$$(\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{z}})_{i,j,k+1/2} = \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_{i,j,k+1/2} = \frac{\Psi_{i,j,k+1} - \Psi_{i,j,k}}{\Delta z}$$

Esto corresponde a la discretización a primer orden de la ecuación de arriba. Podemos resolver esto por relajación o por un método directo.

El caso de elementos finitos tenemos que minimizar el funcional

$$S[\Phi] = \int [(\epsilon \nabla \Phi)^2 + 4\pi\rho] dx$$

usando elementos finitos como describimos anteriormente.

3. Ecuación de Difusión

La ecuación de difusión que tenemos que resolver es

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial A}{\partial x}$$

con una condición inicial

$$A(x, t = 0) = f(x)$$

y condiciones de borde en $x = 0$ y $x = L$. Por ahora utilizaremos una grilla homogénea en el tiempo y en el espacio $A_m^n = A(m\Delta x, n\Delta t)$ ($m = 0, \dots, N$), y una discretización hacia adelante en el tiempo y centrada en el espacio

$$A_i^{n+1} = A_i^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} [A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n]$$

para $D = 1 = \text{const.}$ Por ahora asumiremos condiciones de borde constante

$$A(x = 0, t) = f_0 = 1 \quad A(x = L, t) = f_1 = 2.$$

y una condiciones inicial

$$f(x) = f_0 + (f_1 - f_0) \frac{x}{L} + x(1 - x) \exp \left[- \left(\frac{x - L/2}{\sigma} \right)^2 \right]$$

con $\sigma = 0.1$. Notemos que es implica que

$$\Delta x < \sigma$$

ya que tenemos que por lo menos ser capaz de resolver esta escala.

Notemos que con la condiciones inicial y las de borde es factible integrar esta ecuación en el tiempo. Por lo general es mejor graficar

$$A(x) - > f_0 + (f_1 - f_0) \frac{x}{L} + A(x)$$

En la Fig. 13b vemos el caso para $N = 50$ que requiere un $\Delta t_{max} = 1/5000$ y en la Fig. 13c vemos el caso para $N = 10$ que requiere un $\Delta t_{max} = 1/400$. Aunque si podemos integrar “mas rápido” nos damos cuenta que nuestro calculo no es muy preciso ya que $\Delta x \sim \sigma$ y no tenemos suficientes puntos para evaluar la condición inicial apropiadamente. Esto se traduce en un **coeficiente de difusión efectivo** mayor, como se puede observar en Fig. 13c. Hay que ser muy consiente de este balance entre **precisión** y **velocidad de integración**.

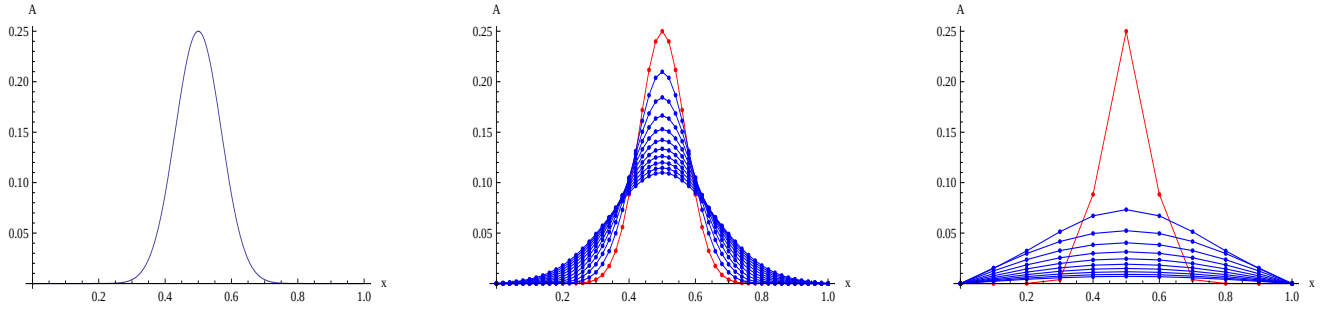


Figura 13: (a) Condiciones inicial. (b) Varios instantes $1000 \times t = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$. Hemos usando $\Delta x = L/50$ y $\Delta t = 1/10000$, tal que $r = 1/4$. (c) El caso con $N = 10$.

3.1. Estabilidad de Von Neumann y Condicion de Courant

Para que la solución sea numéricamente estable, debería haber una cierta relación entre Δx y Δt . Asumamos con una perturbación de la forma

$$A_m^n = M^n e^{ikm\Delta x}$$

y con la definición

$$r = \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2}$$

nuestro integrador da

$$M = 1 + r [\cos(\alpha) - 1]$$

para M y $\alpha = 2k\Delta x$. Sabemos que espontáneamente, la solución no debería crecer, y por lo tanto la condiciones de estabilidad de Von Neumann es

$$|M| \leq 1 \quad \forall(\alpha)$$

Con lo cual vemos que la la solución es estable si satisfacemos la **condición de Courant**

$$r < 1 \quad \rightarrow \quad \Delta t < \Delta t_{max} = \frac{\Delta x^2}{2D}$$

En la Fig. 13 hemos usando el valor de

$$\Delta t = \frac{1}{2} \Delta t_{max} = \frac{\Delta x^2}{4D} = \frac{1}{10000}$$

Es muy instructivo tratar de correr la simulación con un $\Delta t > \Delta t_{max}$ y ver como la solución se hace inestable. Es importante notar que la restricción es proporcional a Δx^2 por la segunda derivada espacial de esta ecuación.

3.2. Transformación de Fourier

También podemos expandir en una serie de Fourier

$$A(x, t) = \sum_{m=1}^N A_m(t) \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right)$$

Notemos que la función

$$f(x) = \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right)$$

satisface $A(0, t) = A(L, t) = 0$ que es lo apropiado para resolver nuestro problema. Dado que

$$\frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

podemos encontrar de la ecuación de movimiento para cada modo A_m

$$\frac{dA_m}{dt} = -\left(D \frac{m\pi}{L}\right)^2 A_m$$

En este caso particular, con una ecuación lineal como la ecuación de difusión, obtenemos modos independientes. Esta ecuación se puede integrar numéricamente usando por ejemplo Runge-Kutta o analíticamente

$$A_m(t) = A_m(0) \exp\left[-D \left(\frac{m\pi}{L}\right)^2 t\right]$$

y por lo tanto obtenemos la solución de la Fig. 14, donde

$$A_m(0) = \frac{2}{L} \int_0^L dx f(x) \sin\left(\frac{\pi m x}{L}\right)$$

La Fig. 14a muestra la solución con la formulación analítica, mientras que la Fig. 14b muestra la solución usando Runge-Kutta con un $\Delta t = 1/1000$. Notemos que aquí obtuvimos una solución muy similar a la Fig 13 donde usamos $N = 50$ posiciones en la grilla, mientras que en la Fig. 14 solo usamos $N = 10$ modos.

La condición de Courant sugiere que podemos integrar con un Δt mayor dado que tenemos un numero menor de modos con una separación de grilla efectiva

$$\Delta x_e = L/N$$

en ambos casos.

Problema: Es muy instructivo integrar este problema para diferentes Δt , ver que efectivamente para $\Delta t > \Delta t_{max}$ la solución es inestable numéricamente.

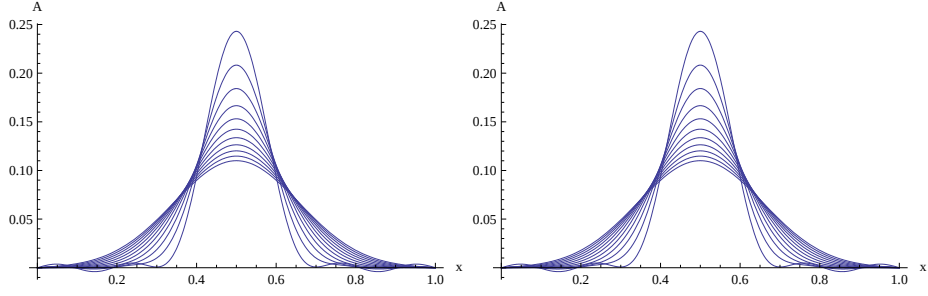


Figura 14: (a) Solución por serie de Fourier para $1000 \times t = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$. Hemos usado $N = 10$ y $\Delta t = 1/1000$. (b) Solución integrando por Runge-Kutta en el espacio de Fourier.

3.3. Condiciones de Borde

Otras condiciones de borde que se pueden estudiar son

$$\frac{\partial A}{\partial x}(x=0, t) = f(t) \quad \frac{\partial A}{\partial x}(x=L, t) = g(t)$$

Las cuales se pueden resolver de la misma manera, ya sea por diferencias finitas o usando una expansión en modos de Fourier. En este caso conviene usar la condición inicial

$$f(x) = x^2(1-x)^2 \exp \left[- \left(\frac{x - L/2}{\sigma} \right)^2 \right]$$

con $\sigma = 0,1$.

Notemos que si las condiciones son $f(t) = g(t) = 0$, podemos expandir en

$$A(x, t) = A_0(t) + \sum_{m=1}^N A_m(t) \cos \left(\frac{\pi m x}{L} \right)$$

donde

$$A_0(0) = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) dx \quad A_m(0) = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos \left(\frac{\pi m x}{L} \right) dx$$

En el caso de diferencias finitas tenemos que implementar estas condiciones de borde, que por lo general se logra agregando “elementos fantasmas” a la grilla. Por ejemplo la derivada en borde (al mismo orden que la segunda derivada) es

$$f(t) = \frac{\partial A}{\partial x}(x=0, t) = \frac{A_1^n - A_{-1}^n}{2\Delta x} \quad g(t) = \frac{\partial A}{\partial x}(x=L, t) = \frac{A_{N+1}^n - A_{N-1}^n}{2\Delta x}$$

Por lo tanto podemos definir

$$A_{-1}^n = A_1^n - 2\Delta x f(n\Delta t) \quad A_{N+1}^n = A_{N-1}^n + 2\Delta x g(n\Delta t)$$

en todo instante para asegurarnos que las primeras derivadas evalúen a cero en todo instante. La solución se muestra en la Fig. 15 para el caso $f = g = 0$.

Si la condiciones de borde en la segunda derivada tenemos que hacer el mismo análisis pero con

$$f(t) = \frac{\partial^2 A}{\partial^2 x}(x = 0, t) = \frac{A_1^n - 2A_0^n + A_{-1}^n}{\Delta x^2}$$

$$g(t) = \frac{\partial A}{\partial x}(x = L, t) = \frac{A_{N+1}^n - 2A_N^n + A_{N-1}^n}{\Delta x^2}$$

y por lo tanto

$$A_{-1}^n = 2A_0^n - A_1^n - \Delta x^2 f(n\Delta t)$$

$$A_{N+1}^n = 2A_N^n - A_{N-1}^n + \Delta x^2 g(n\Delta t)$$

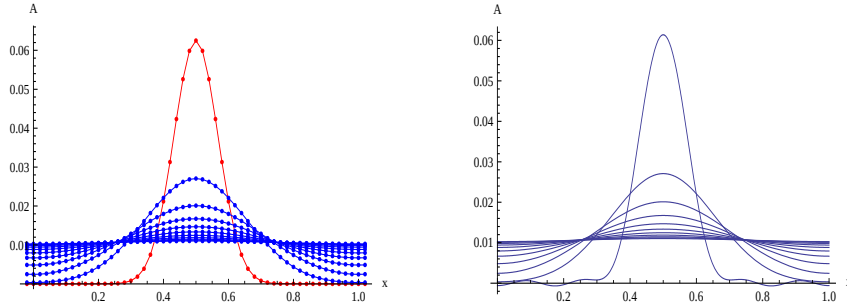


Figura 15: (a) Varios instantes $100 \times t = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$ de la solución por diferencias finitas. Hemos usando $\Delta x = L/50$ y $\Delta t = 1/10000$, tal que $r = 1/4$. Los elementos “fantasmas” están incluidos en el gráfico. (b) Solución por series de Fourier con $N = 10$ y $\Delta t = 1/1000$.

3.4. D variable y Método conservativo

Notemos que existen algunas relaciones globales

$$B_1(t) = \int_0^L A(x, t) dx$$

$$B_2(t) = \int_0^L A(x, t)^2 dx$$

Por lo tanto tenemos

$$\frac{dB_1}{dt} = \int_0^L \frac{\partial A}{\partial t} dx = \int_0^L \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial A}{\partial x} \right] dx = \left[D \frac{\partial A}{\partial x} \right]_0^L$$

y también

$$\frac{dB_2}{dt} = 2 \int_0^L A \frac{\partial A}{\partial t} dx = 2 \int_0^L A \frac{\partial A}{\partial x} \left[D \frac{\partial A}{\partial x} \right] dx = -2 \int_0^L D \left[\frac{\partial A}{\partial x} \right]^2 dx + \left[DA \frac{\partial A}{\partial x} \right]_0^L$$

Si la condición de borde es

$$\frac{\partial A}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial A}{\partial x}(L, t) = 0$$

entonces

$$B_1(t) = \int_0^L A(x, t) dx = \text{const}$$

y también

$$\frac{dB_2}{dt} = -2 \int_0^L D \left[\frac{\partial A}{\partial x} \right]^2 dx$$

Podemos utilizar estas expresiones para ver nuestra **precisión numérica**. También podemos escribir explícitamente un código conservativo que garantice estas expresiones. Por ejemplo

$$A_m^{n+1} = A_m^n + \Delta t \frac{\left(D \frac{dA}{dx} \right)_{m+1/2}^n - \left(D \frac{dA}{dx} \right)_{m-1/2}^n}{\Delta x}$$

claramente garantiza la integral

$$B_1(t) = \int_0^L A(x, t) dx = \text{const}$$

Al mismo tiempo vemos que esta expresión es también igual a

$$A_m^{n+1} = A_m^n + \Delta t \frac{D_{m+1/2}^m \left(\frac{A_{m+1}^n - A_m^n}{\Delta x} \right) - D_{m-1/2}^m \left(\frac{A_m^n - A_{m-1}^n}{\Delta x} \right)}{\Delta x}$$

si utilizamos una aproximación centrada

$$\left(\frac{dA}{dx} \right)_{m+1/2}^n = \frac{A_{m+1}^n - A_m^n}{\Delta x}$$

para la derivada. Si $D = \text{const}$ en el espacio y tiempo, entonces tenemos la misma expresión que teníamos antes en termino de diferencias finitas. Es por esto que la integral $B_1(t) = \text{const}$ en el tiempo como se observa en la Fig. 16. Pero al mismo tiempo vemos que la expresión de conservación es un poco mas complicada en el caso de un D que varíe en el espacio y tiempo.

3.5. Método de Linea

El método de Linea consiste en discretizar la ecuación de movimiento en la grilla espacial, por ejemplo usando diferencias finitas, convirtiéndola en un set acoplado de **ecuaciones diferenciales ordinarias**

$$\frac{dA_m}{dt} = \frac{D_{m+1/2}^m \left(\frac{A_{m+1}^n - A_m^n}{\Delta x} \right) - D_{m-1/2}^m \left(\frac{A_m^n - A_{m-1}^n}{\Delta x} \right)}{\Delta x}$$

en la grilla, para $m = 0, \dots, N$. Esto es equivalente a expandir en **elementos finitos** en el espacio. Expansiones más complicadas se pueden lograr utilizando la metodología anterior: (a) grilla no-homogénea o

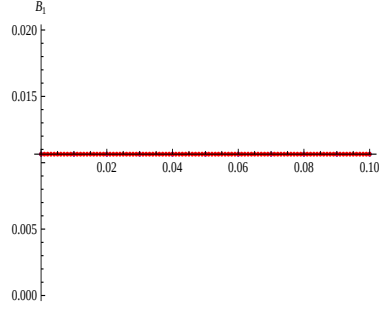


Figura 16: Leyes de conservación para solución por diferencias finitas y por series de Fourier mostradas en la Fig. 15.

adaptativa, (b) que incluyen la interacción de elementos mas alejados de la grilla, (c) etc. Este sistema ahora se puede integrar utilizando por ejemplo Runge-Kutta o variantes de Verlet que son mas barato de calcular en forma computacional.

Notemos que la solución por diferencias finitas presentada anteriormente es la integración por el método de Euler. Es interesante notar que aumentando el orden del método de integración (por ejemplo Runge-Kutta) no podemos ganarle a la **condición de Courant**.

En el caso de $D(x, t)$ tenemos que garantizar que la condiciones de Courant se satisface en toda la grilla

$$\Delta t \leq \min_m \left[\frac{\Delta x^2}{2D_m} \right]$$

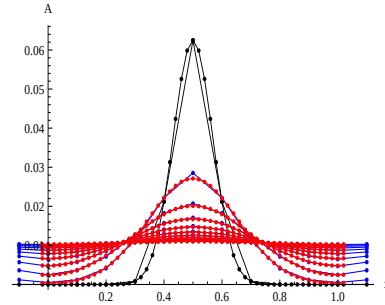


Figura 17: Comparación de la solución usando el método de linea con $N = 5$ y $N = 10$.

4. Propagación de Frentes

La ecuación

$$\frac{\partial A}{\partial t} + c \frac{\partial A}{\partial x} = 0$$

tiene como solución en el espacio infinito

$$A(x, t) = A(x - ct, 0)$$

La solución por diferencias finitas se puede escribir como

$$A_m^{n+1} = A_m^n - \frac{c\Delta t}{2\Delta x} [A_{m+1}^n - A_{m-1}^n]$$

Para que la solución sea numéricamente estable, debería haber una cierta relación entre Δx y Δt . Asumamos con una perturbación de la forma

$$A_m^n = M^n e^{ikm\Delta x}$$

Con la definición

$$r = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$$

nuestro integrador da

$$M = 1 - ir \sin(\alpha)$$

para M y $\alpha = 2k\Delta x$. Sabemos que espontáneamente la solución no debería crecer, y por lo tanto la condiciones de estabilidad de Von Neumann es

$$|M| \leq 1 \quad \forall(\alpha)$$

Con lo cual vemos que la solución es estable si satisfacemos la **condición de Courant**

$$r = 0$$

con lo cual reconocemos que esta **discretización** no permite una solución estable de la ecuación de convección. Una solución a este problema es re-escribir

$$A_m^{n+1} = \frac{1}{2} (A_{m+1}^n + A_{m-1}^n) + \frac{c\Delta t}{2\Delta x} [A_{m+1}^n - A_{m-1}^n]$$

con lo cual el integrador, llamado **método de Lax**, da

$$M = \cos \alpha - ir \sin(\alpha)$$

Con lo cual vemos que la la solución es estable si satisfacemos la **condición de Courant**

$$r < 1 \quad \rightarrow \quad \Delta t < \Delta t_{max} = \frac{\Delta x}{c}$$

4.1. Condiciones de Borde

Para resolver la ecuación de arriba, tenemos varias opciones de condiciones de Borde, estas son

1. condiciones sobre la función

$$A(x = 0, t) = f_1(t) \qquad A(x = L, t) = f_2(t)$$

2. condiciones sobre la derivada

$$\frac{\partial A}{\partial x}(x = 0, t) = g_1(t) \qquad \frac{\partial A}{\partial x}(x = L, t) = g_2(t)$$

3. condiciones periódicas

$$A(x = 0, t) = A(x = L, t)$$

4. condiciones libres (Lagrangianas)

$$\frac{\partial A}{\partial t} + c \frac{\partial A}{\partial x} = 0$$

Por ahora integraremos usando el **método de Lax** con la condición de borde periódica y la condición inicial

$$A(x, t = 0) = 1 + x^2(L - x)^2 \exp \left[- \left(\frac{x - \frac{L}{2}}{\sigma} \right)^2 \right]$$

El método es entonces

$$\begin{aligned} A_0^{n+1} &= \frac{1}{2} (A_1^n + A_{N-1}^n) - \frac{1}{2} r (A_1^n - A_{N-1}^n) \\ A_m^{n+1} &= \frac{1}{2} (A_{m+1}^n + A_{m-1}^n) - \frac{1}{2} r (A_{m+1}^n - A_{m-1}^n) \\ A_N^{n+1} &= \frac{1}{2} (A_1^n + A_{N-1}^n) - \frac{1}{2} r (A_1^n - A_{N-1}^n) \end{aligned}$$

lo cual garantiza la condición de borde

$$A_N^n = A_0^n$$

para todo tiempo. Notemos que la **condición de Courant** óptima es

$$\Delta t_{opt} = \frac{\Delta x}{c} \qquad \rightarrow \qquad r = 1$$

que es lo usamos para integrar la soluciones que se muestran en la Fig. 18. Vemos que no hay disipación numérica.

Podemos re-escribir la solución por diferencias finitas

$$\frac{A_m^{n+1} - A_m^n}{\Delta t} = -c \left[\frac{A_{m+1}^n - A_{m-1}^n}{2\Delta x} \right] + \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \left[\frac{A_{m+1}^n + A_{m-1}^n - 2A_m^n}{\Delta x^2} \right]$$

por lo cual vemos que hemos agregado una **disipación numérica (viscosidad numérica)** con

$$D_{eff} = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$$

que es eficiente para escalas del orden de Δx . Esto lo vemos en el hecho que el factor de amplificación $M = 1$ para $r = 1$, o

$$\Delta t_{opt} = \frac{\Delta x}{c}$$

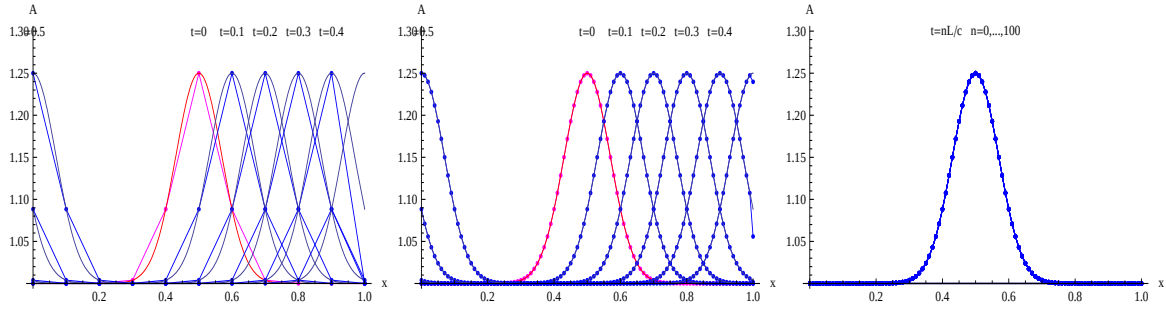


Figura 18: Solución de la convección usando el **método de Lax** con $N = 10$ y $N = 100$ en $t = 0, 1 \times L/c$.
(c) Solución evaluada en $t = n \times L/c$ ($n = 0, \dots, 100$).

Es interesante notar que la ecuación de onda

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$$

se puede escribir en una forma para ser integrada por el **método de Lax**, donde hemos usado

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= c \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= c \frac{\partial u}{\partial x} \end{aligned}$$

con

$$u = c \frac{\partial A}{\partial x} \quad v = \frac{\partial A}{\partial t}$$

El **método de Lax** da

$$\begin{aligned} u_m^{n+1} &= \frac{1}{2} (u_{m+1}^n + u_{m-1}^n) + \frac{c\Delta t}{2\Delta x} [v_{m+1}^n - v_{m-1}^n] \\ v_m^{n+1} &= \frac{1}{2} (v_{m+1}^n + v_{m-1}^n) + \frac{c\Delta t}{2\Delta x} [u_{m+1}^n - u_{m-1}^n] \end{aligned}$$

Podemos estudiar la estabilidad numérica

$$\begin{bmatrix} u_m^n \\ v_m^n \end{bmatrix} = M^n e^{imk\Delta x} \begin{bmatrix} u^0 \\ v^0 \end{bmatrix}$$

Lo que implica

$$\begin{bmatrix} \cos \alpha - M & ir \sin \alpha \\ ir \sin \alpha & \cos \alpha - M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^0 \\ v^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

y por lo tanto

$$M = \cos \alpha \pm ir \sin \alpha$$

y obtenemos la misma **condición de Courant** que antes.

4.2. Ecuación no-lineal

La ecuación

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U(x, t) \frac{\partial A}{\partial x} = g(x, t)$$

es una de las ecuaciones más complicadas en la física, pero al mismo tiempo es la más común. Si usamos el **método de Lax** con $g = 0$, podemos escribir

$$A_m^{n+1} = \frac{1}{2} (A_{m+1}^n + A_{m-1}^n) - \frac{1}{2} r_m^n (A_{m+1}^n - A_{m-1}^n)$$

donde

$$r_m^n = \frac{U_m^n \Delta t}{\Delta x}$$

El problema esta en que **no podemos** garantizar

$$r_m^n = 1$$

en todo el espacio, y por lo tanto en general vamos a tener un **método disipativo** con

$$|M| \leq 1$$

por ejemplo si utilizamos

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{\max_m U_m^0}$$

tal que la **condición de Courant** esta garantizada en toda la grilla.

Consideremos

$$U = A$$

y por ahora integraremos usando el **método de Lax** con la condición de borde periódica y la condición inicial

$$A(x, t = 0) = 1 + \exp \left[- \left(\frac{x - \frac{L}{2}}{\sigma} \right)^2 \right]$$

como se observa en la Fig. 19.

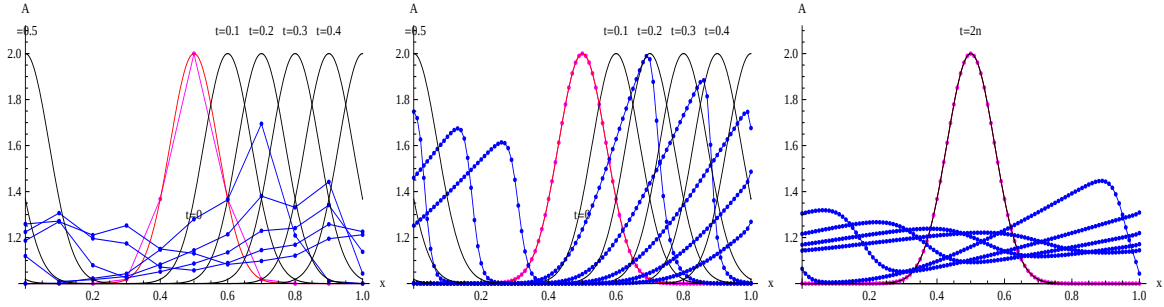


Figura 19: Solución de ecuación no-lineal de convección usando el **método de Lax** con $N = 10$ y $N = 100$ en $t = 0, 1 \times L/c$. (c) Soluciona evaluada en $t = n \times L/c$ ($n = 0, \dots, 100$).

4.3. Método de conservación de flujo

Consideremos el problema de conservación de flujo

$$\frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\partial F(A)}{\partial x} = 0$$

El **método de Lax** es

$$A_m^{n+1} = \frac{1}{2} (A_{m+1}^n + A_{m-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F_{m+1}^n - F_{m-1}^n)$$

En el caso anterior

$$F = \frac{1}{2} A^2$$

Podemos calcular la derivada temporal de

$$B_1 = \int_0^L A(x, t) dx$$

lo cual nos da

$$\frac{dB_1}{dt} = \left[\frac{1}{2} U^2 \right]_0^L$$

Dado que el sistema es periódico, podemos ver que

$$B_1(t) = \text{const}$$

lo cual se da solo en forma aproximada con el **método de integración de Lax** como se puede observar en la Fig. 20.

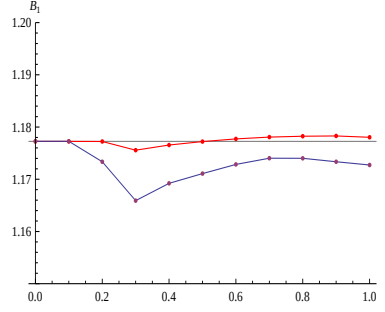


Figura 20: Evaluación de $B_1(t)$ para $N = 10$ (azul) y $N = 100$ (rojo).

4.4. Características hacia atrás

La ecuación

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U(x, t) \frac{\partial A}{\partial x} = g(x, t)$$

Puede ser resuelta por el método de las características definidas por la curva

$$\frac{dr(\lambda)}{dt} = U(r(\lambda), \tau(\lambda))$$

$$\frac{d\tau(\lambda)}{dt} = 1$$

de esto obtenemos para $A(\lambda) = A(r(\lambda), \tau(\lambda))$

$$\frac{dA(\lambda)}{d\lambda} = \frac{\partial A}{\partial r} \frac{dr}{d\lambda} + \frac{\partial A}{\partial \tau} \frac{d\tau}{d\lambda} = g(r(\lambda), \tau(\lambda))$$

Supongamos ahora que queremos integrar ambas ecuaciones desde $x(t)$ hasta $x(t + \Delta t)$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + U(x(t), t) \Delta t$$

$$A[x(t + \Delta t), t + \Delta t] = A[x(t), t] + g[x(t), t] \Delta t$$

Notemos que si $x(t)$ corresponde a un elemento de la grilla x_m , este se desplazo a $x(t + \Delta t)$ que ya no corresponde necesariamente a un punto en la grilla. A nosotros nos interesa obtener

$$A_m^{n+1} = A[x_m, t + \Delta t]$$

en la grilla. Para volver a nuestra grilla hay dos alternativas:

1. Integrar un elemento de la grilla $x(t) = x_m$ hacia adelante y luego interpolar (elementos finitos móviles). Este método será descrito más adelante
2. Buscar un elemento $x(t) = \bar{x}$ que se propaga a un elemento de la grilla $x(t + \Delta t) = x_m$ en $t + \Delta t$

En este ultimo caso tenemos

$$\begin{aligned} x_m &= \bar{x} + U(\bar{x}, t)\Delta t \\ A[x_m, t + \Delta t] &= A[\bar{x}, t] + g[\bar{x}, t]\Delta t \end{aligned}$$

y por lo tanto tenemos que interpolar $A[\bar{x}, t]$, con la definición

$$\bar{x} = x_m - U(\bar{x}, t)\Delta t$$

Esta ultima relación generalmente se resuelve por iteración a partir de $\bar{x}^{(0)} \approx x_i$ hasta que converja

$$\bar{x}^{(k+1)} = x_m - U(\bar{x}^{(k)}, t)\Delta t$$

Una vez que tenemos esta solución, podemos evaluar

$$A[x_m, t + \Delta t] = A_m^{n+1} = A[\bar{x}, t] + g[\bar{x}, t]\Delta t$$

Este es el método mas usado en las grandes simulaciones, por ejemplo de clima o tiempo.

4.5. Características hacia adelante: Moving finite elements

El método de **elementos finitos móviles** consiste en usar integrar de $t \rightarrow t + \Delta t$ a partir de un elemento de la grilla

$$\begin{aligned} x_m(t + \Delta t) &= x_m + U(x_m, t)\Delta t \\ A[x_m(t + \Delta t), t + \Delta t] &= A[x_m, t] + g[x_m, t]\Delta t \end{aligned}$$

El problema esta en que $x(t + \Delta t)$ no va a coincidir con un elemento de la grilla y por lo general tenemos que preocuparnos de interpolar a partir de los elementos $x_m(t + \Delta t)$ usando los métodos de interpolación ya mencionados. Esto implica que no podemos permitir que 2 elementos adyacentes de la grilla se crucen, y por lo tanto la **condición de Courant** es

$$\Delta t < \frac{1}{2} \min_m \frac{\Delta x}{\|U_m^n\|}$$

En más dimensiones

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U_x(x, z, t)\partial A/\partial x + U_z(x, z, t)\partial A/\partial z = f(x, z, t)$$

podemos definir las características

$$\begin{aligned}\frac{dr_x}{d\lambda} &= U_x(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda)) \\ \frac{dr_z}{d\lambda} &= U_z(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda)) \\ \frac{d\tau}{d\lambda} &= 1\end{aligned}$$

Por lo tanto para $A(\lambda) = A(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda))$ tenemos

$$\frac{dA}{d\lambda} = \frac{\partial A}{\partial \lambda} + U_x(\lambda)\partial A/\partial r_x + U_z(\lambda)\partial A/\partial r_z = g(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda))$$

Por lo tanto tenemos que integrar de $t \rightarrow t + \Delta t$, $r_x(t) = x \rightarrow r_x$, $r_z(t) = z \rightarrow r_z$, usando **elemento finitos móviles**

$$\begin{aligned}A(r_x, r_z, t + \Delta t) &= A(x, z, t) + \int_t^{t+\Delta t} g(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda))d\lambda \\ r_x(t + \Delta t) &= x + \int_t^{t+\Delta t} U_x(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda))d\lambda \\ r_z(t + \Delta t) &= z + \int_t^{t+\Delta t} U_z(r_x(\lambda), r_z(\lambda), \tau(\lambda))d\lambda\end{aligned}$$

que a primer orden pueden ser escritos como

$$\begin{aligned}A(r_x, r_z, t + \Delta t) &= A(x, z, t) + g(x, z, t)\Delta t \\ r_x(t + \Delta t) &= x + U_x(x, z, t)\Delta t \\ r_z(t + \Delta t) &= z + U_z(x, z, t)\Delta t\end{aligned}$$

Por lo tanto, el punto inicial en la grilla (x_i, y_j) se mueve a la posición (r_x, r_z) en $t + \Delta t$, mientras que A evoluciona a $A(r_x, r_z, t + \Delta t)$. Dado que estamos interesados en $A(x_i, y_j, t + \Delta t)$ podemos interpolar en el punto (x_i, y_j) usando los valores en (r_x, r_z) .

Por lo general la **condición de Courant** requiere

$$\Delta t < 0,5 * \min_{i,j} \frac{\Delta x}{\|U_{i,j}\|}$$

donde U representa todas las velocidades naturales del sistema.

4.6. Fast Fourier Transform

Condiciones de borde periódicas

5. Ecuación de Burgers

La ecuación de Burgers es

$$\frac{\partial A}{\partial t} + A \frac{\partial A}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$$

Esta ecuación tiene una solución que se propaga

$$A(x, t) = \frac{f_2 + f_1 e^{\kappa(t-ct)}}{1 + e^{\kappa(t-ct)}}$$

donde

$$c = \frac{1}{2} (f_1 + f_2) \quad \kappa = \frac{1}{2\nu} (f_2 - f_1) > 0$$

y

$$f_1 = A(-\infty, 0) \quad f_2 = A(+\infty, 0)$$

Numéricamente, esta ecuación se puede ahora integrar por el **método de Lax**, **método de línea** o un **método conservativo**

$$\begin{aligned} A_m^{n+1} &= A_m^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{(A^2)_{m+1/2}^n - (A^2)_{m-1/2}^n}{2} + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\nu_{m+1/2}^n \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)_{m+1/2} - \nu_{m-1/2}^n \left(\frac{\partial A}{\partial x} \right)_{m-1/2} \right] \\ &= A_m^n - \frac{\Delta t}{8\Delta x} \left[(A_{m+1}^n + A_m^n)^2 - (A_m^n + A_{m-1}^n)^2 \right] \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \left[(\nu_{m+1}^n + \nu_m^n) (A_{m+1}^n - A_m^n) - (\nu_m^n + \nu_{m-1}^n) (A_m^n - A_{m-1}^n) \right] \end{aligned}$$

donde hemos usando

$$A_{m+1/2}^n = \frac{A_{m+1}^n + A_m^n}{2}$$

La solución se muestra en la Fig. 21, la cual claramente falla cuando el frente se acerca a $x = L$.

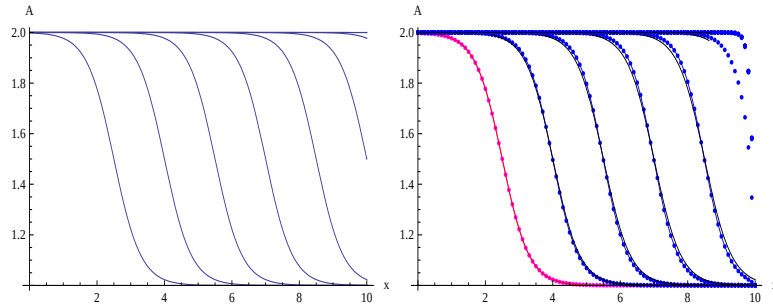


Figura 21: (a) Solución analítica. (b) Solución numérica con $N = 100$ y $\Delta t = \Delta x^2/2\nu$.

5.1. Condiciones de Borde libre y método de características

La solución analítica representa una solución en todo el espacio (sin bordes), lo que implicaría implementar **condiciones de borde libres** (Lagrangianas)

$$\frac{\partial A}{\partial t} + A \frac{\partial A}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$$

La cual podemos implementar usando características hacia adelante en el ultimo elemento de la grilla

$$x_N(t + \Delta t) = \begin{cases} x_N + A_N^n \Delta t & A_N^n > 0 \\ x_N & A_N^n < 0 \end{cases}$$

y

$$\bar{A} = A(x_N(t + \Delta t), t + \Delta t) = A(x_N, t) + \nu \Delta t \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}(x_N, t) = A_N^n + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} (A_N^n + A_{N-2} - 2A_{N-1})$$

lo que garantiza que el frente no rebote (cuando $A < 0$) y siga derecho. Podemos interpola a la grilla usando una interpolación lineal

$$A_N^n = A_{N-1}^n + \Delta x \frac{\bar{A} - A_{N-1}^n}{x_N(t + \Delta t) - (L - \Delta x)}$$

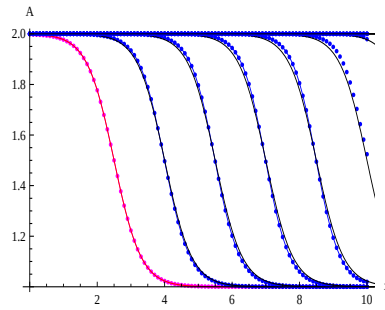


Figura 22: Solución numérica con $N = 100$ y $\Delta t = \Delta x^2/2\nu$ y condiciones de borde de salida.

Notemos que en principio se puede construir un código en base a **características** en todo el espacio, pero esto requeriría interpolar la función en todo el espacio, por ejemplo usando una **spline**. También notemos que hemos evaluado la segunda derivada en x_N como igual a la segunda derivada en x_{N-1} , lo cual no es una buena aproximación. Es viable construir mejores descriptores de la segunda derivada en el borde usando, por ejemplo, un polinomio de interpolación de grado 3.

5.2. Método Pseudo espectral

condiciones de borde periódica

anti aliasing (matar 1/3 highest modes)

5.3. Splitting de los operadores

6. Ecuación de ondas

La ecuación de onda escalar

$$\nabla^2 A - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = -4\pi f(x, t)$$

se puede discretizar en forma análoga a la anterior. Por ejemplo en 1D tenemos

$$A_m^{n+1} = 2A_m^n - A_m^{n-1} + \frac{c^2 \Delta t^2}{\Delta x^2} (A_{m+1}^n - 2A_m^n + A_{m-1}^n) + 4\pi \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(x_i, t) dt$$

donde la integral se puede aproximar como

$$4\pi \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(x_i, t) dt \approx \Delta t f_m^n$$

o incluso como

$$4\pi \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} f(x_i, t) dt \approx \frac{1}{2} \Delta t (f_m^n + f_m^{n+1})$$

Notemos que A_m^n depende de la función 2 instantes anteriores, esto es A_m^{n-1} y A_m^{n-2} , lo que complica el inicial la simulación. Las condiciones iniciales son

$$A(x, t=0) = g(x) \quad A_t(x, t=0) = h(x)$$

las cuales permiten implementar

$$A_m^0 = g(m\Delta x) = g_m \quad m = 0, \dots, N$$

y también

$$A_m^{-1} = A_m^0 - \Delta t h_m \quad m = 0, \dots, N$$

Es posible también implementar una derivada inicial centrada en forma consistente con la discretización de la ecuación de onda.

La generalización a 2 y 3 dimensiones se puede hacer de la misma forma.

Se debe tener cuidado con la especificación de las condiciones de borde, las cuales nuevamente pueden ser

1. condiciones sobre la función

$$A(x=0, t) = f_1(t) \quad A(x=L, t) = f_2(t)$$

2. condiciones sobre la derivada

$$\frac{\partial A}{\partial x}(x=0, t) = g_1(t) \qquad \frac{\partial A}{\partial x}(x=L, t) = g_2(t)$$

3. condiciones periódicas

$$A(x=0, t) = A(x=L, t)$$

4. condiciones libres (Lagrangianas)

$$\frac{\partial A}{\partial t} + c \frac{\partial A}{\partial x} = 0$$

Para que la ecuación sea numéricamente estable, es importante considerar cierta relación entre Δx y Δt , para la ecuación de ondas sin fuentes. Comenzamos con una perturbación de la forma

$$A_m^n = M^n e^{ikm\Delta x}$$

y con la definición

$$r = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$$

da origen a la ecuación

$$M^2 = 2M - 1 + 2r^2 M(\cos \alpha - 1)$$

para M y $\alpha = 2k\Delta x$. Es importante notar que

$$|M| = 1$$

con $r \leq 1$ para todos los valores de α ya que

$$(1 + r^2(1 - \cos \alpha)^2) < 1$$

y por lo tanto, la solución es estable. Esto tiene sentido, ya que esto significa que debe calcular con más rápido que la propagación de la onda. No nos podemos mover delante de la onda.

6.1. Interferencia y difracción

7. Fluidos 1D y 2D

- derivación navier-stokes
- turbulencia

8. Ecuación de Shrodinger

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi$$

9. guías de onda

9.1. problema del valor propio

10. Modelos simples de magnetización

Como vimos abajo, la energía de una colección de N spins puede ser escrita como

$$H = \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{s}_i + \sum_{i,j} J_{i,j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j$$

con H como la energía o el Hamiltoniano y J como la interacción entre los spins, el cual es en general una interacción de dipolo que decae como r^{-3} . Usando un rango corto de interacción dando solamente a los vecinos más cercanos contribución, tenemos

$$\mathbf{M}(h, \{s_i\}) = \frac{\int e^{-\beta H} \sum_i \mathbf{s}_i dx dp}{\int e^{-\beta H} dx dp}$$

Esta formula puede generar interesantes dinámicas, transiciones de fase, etc. La transición de fase no se convierte hasta que vamos en dimensiones más altas (el modelo en dos dimensiones *ising* de Onsager). Usando una aproximación mala del campo en una dimensión en “equilibrio” según la mecánica estadística, tenemos

$$H = \sum_i (\mathbf{h} + J \langle \mathbf{s} \rangle) \cdot \mathbf{s}_i = \sum_i (\mathbf{h} + J N \mathbf{M}) \cdot \mathbf{s}_i$$

$$M_z(h, \{s_i\}) = \langle \sum_i s_{z,i} \rangle = \frac{\int e^{-\beta H} \sum_i s_{z,i} dx dp}{\int e^{-\beta H} dx dp} = N \tanh[(h + J N M)\beta]$$

el último resultado es obtenido asumiendo que s_z es discreto y puede tener valores 1,-1. Notemos que este problema implica resolver una ecuación trascendental, el cual se puede resolver por ejemplo usando un método de Newton para encontrar el cero de la función

$$g(M, \beta, b_o) = M - N \tanh[(b_o + J N M)\beta]$$

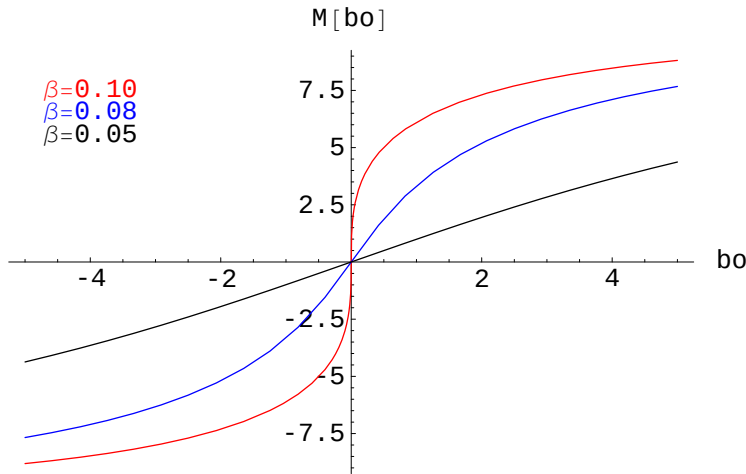


Figura 23: (a) Solución de M_z usando el campo medio en 1-D para diferentes temperaturas, para $N = 10$ y $J = 0,1$

De la Fig. 23a podemos observar el caso de paramagnético con $J > 0$, donde los espines se alinean con el campo. Aquí también observamos una transición de fase exactamente en el límite $\beta \rightarrow 0$. El caso de diamagnético $J < 0$, los espines se alinean con los vecinos. El caso ferromagnético, en el límite $B_o \rightarrow 0$, aun tenemos una magnetización si la temperatura $T < T_c$.

10.1. Método de MonteCarlo

En general tenemos que evaluar la integral de arriba en el equilibrio, consistente con fluctuaciones a cierta temperatura T . Tomemos el Hamiltoniano con $s=1,-1$, y podemos utilizar el método de monte Carlo para encontrar la magnetización en equilibrio con un baño termal. En cada instante t , tenemos la configuración $\{s_I^{(t)}\}$ con interacción vecino mas cercano. Repetir la siguiente receta para cada valor de $\beta = 1/T$ la temperatura

1. Tomar un spin al azar y hacer un flip en $x = \{s_I^{(t)}\}$
2. Calcular la energía $\Delta E = E(y) - E(x)$
3. $X=y$ si $\Delta E \leq 0$ o si $r < \exp(-\beta \Delta E)$, con r un numero al azar
4. Repetir N veces

Podemos entonces calcular la Magnetización $\langle s_I^{(t)} \rangle$ y repetimos para otros valores de T y B , estimando la curva $\mathbf{M}(\mathbf{T}, \mathbf{B})$. Se puede observar una transición de fase en 2D. En la Fig. 23b vemos como se da esta transición de fase para ciertos valores.

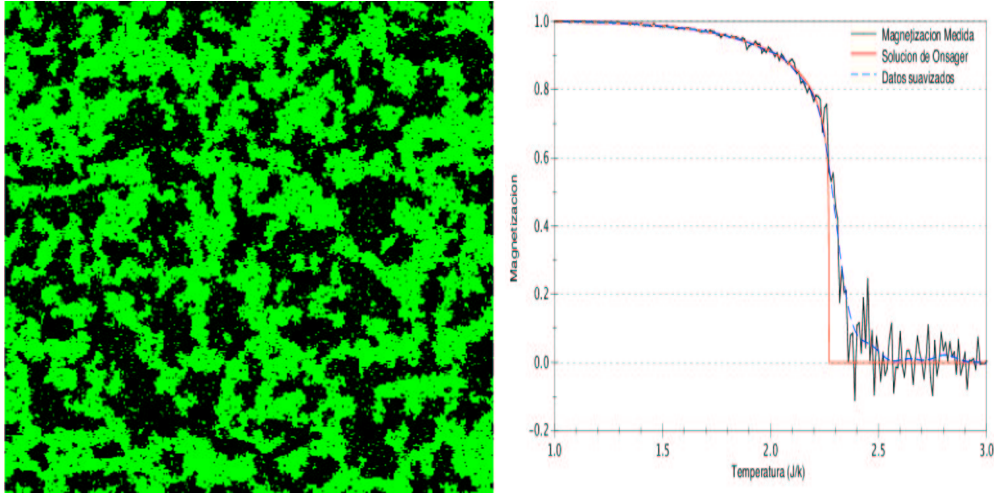


Figura 24: (a)Solución de Monte Carlo para el modelo de Ising (400x400) mostrando dominios claros para $T = 2$. (b)La magnetización como función de la temperatura, mostrando la transición de fase a temperatura finita. Hecho por Paul Blackburn.

10.2. Dinámica de Espines

Hasta ahora hemos trabajado con situaciones en equilibrio, pero también podemos estar interesados en la dinámica de los espines. Para ello podemos asumir un modelo para un espín que puede orientarse en por ejemplo 3 dimensiones. Utilizando la expresión canónica para la evolución de la variable, utilizando el paréntesis de Poisson, tenemos que

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = [\mathbf{S}_i, \mathbf{B}]$$

Esperamos ver cosas interesantes con este modelo, denominado de Heissenberg. Hasta donde yo se este es un problema interesante que puede dar origen a publicaciones.

Para el caso de orientación en 3 dimensiones, tenemos

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = J \sum_j \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j$$

y si usamos interacción con vecinos próximos se puede hacer la simulación. La temperatura se puede forzar desde los bordes.

11. Método de Minimización local

- simplex - Stepest descent - Gradiente conjugada

12. Métodos de minimización global

- algoritmo genético

13. Redes Neuronales