



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**SOLUCIÓN AL PROBLEMA DE DIFUSIÓN DOMINADO POR
ADVECCIÓN MEDIANTE FORMULAS DE GREEN GENERALIZADAS**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

MIGUEL ROBOAN RAMÍREZ VILLA

ASESOR: ISMAEL HERRERA REVILLA

México, D.F.

1986



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA

2 ej.
472

Solución al problema de Difusión dominado por Advección
mediante Fórmulas de Green generalizadas.

Miguel Ramírez Villa.

Trabajo en física.

1986.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Introducción.	1
Capítulo I. Mecánica del Medio Continuo y Fluidos en Medios Porosos	5
1. Cinemática del Medio Continuo.	6
2. Dinámica del Medio Continuo.	14
3. Fluidos en Medios Porosos.	25
Capítulo II. La Aproximación Unificada	46
1. Fórmulas de Green para Dominios Continuos	47
2. Formulas de Green para Dominios Discontinuos	72
Capítulo III. Aplicación de la A. U. al problema de Difusión-Advección	89
1. Problema Dirichlet	
1.1. Tratamiento Completo	89
1.2. Tratamiento Incompleto	107
2. Problema Dirichlet-Neumann	
2.1. Tratamiento Completo	119
2.2. Tratamiento Incompleto	126
Capítulo IV. Resultados.	131
1. Programas	131
2. Resultados	
Tratamiento Completo	
2.1. Caso $\Delta^2 = 0$, ($K = -P/4$)	134
2.2. Caso $\Delta^2 > 0$, ($-P/4 < K < 0$)	154
Tratamiento Incompleto	
2.3. Casos de semidiscutización temporal	159
3. Conclusiones.	163
Apéndices	166
Bibliografía.	193

La ecuación de advección-difusión

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (1)$$

con v, D constantes positivas, surge en la Física al estudiar problemas de difusión y transporte, como por ejemplo en transporte de masa a través de medios porosos saturados, entre otros.

Aunque de aspecto simple, no siempre es posible encontrar la solución analítica dadas unas condiciones iniciales y de frontera. Se han obtenido para este problema diferentes soluciones para diversas condiciones de frontera: Aifai et al. (1956), Ebach-White (1958), Ogata-Banks (1961), Ogata (1970) y otros más.

Sin embargo, cuando las condiciones de frontera impiden la determinación de una solución analítica, se debe recurrir a las soluciones numéricas.

Pero en este caso también se tienen problemas sobre todo cuando la advección domina a la difusión. La ecuación (1) se vuelve difícil de resolver numéricamente, ya que el carácter hiperbólico que toma en este caso da como resultado "oscilaciones espurias cerca de un frente agudo de concentración" (Allen B.M. 1984). Esto sucede tanto en los métodos de Colocación Ortogonal (fig. 1) como en los métodos de Elemento Finito (fig. 2) y de Diferencias Finitas (fig. 3).

Se puede demostrar (Pinder-Gray 1977) que la aparición de estas oscilaciones en los resultados numéricos se debe a la inhabilidad de estos esquemas para propagar con precisión armónicos - de la representación de la solución en Serie de Fourier - de longitudes de onda muy pequeñas. Sin embargo existen casos en los que mediante un método Galerkin - cuando se eligen los valores adecuados de $\Delta x, \Delta t$ para v y D -, se logran magníficos resultados. (Pinder-Gray 1977).

fig. 1.
(Allen, 1984)

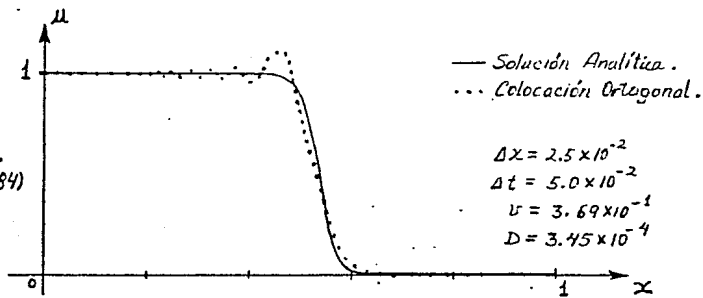


fig. 2.
(Pinder, 1977)

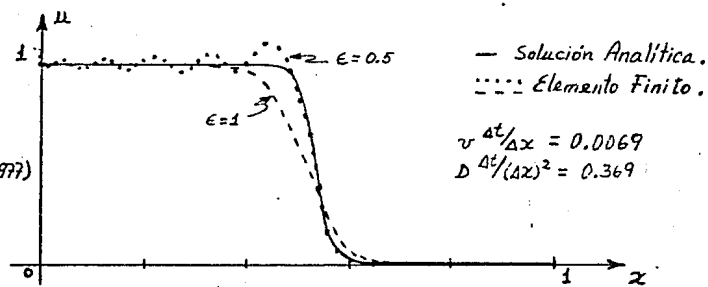
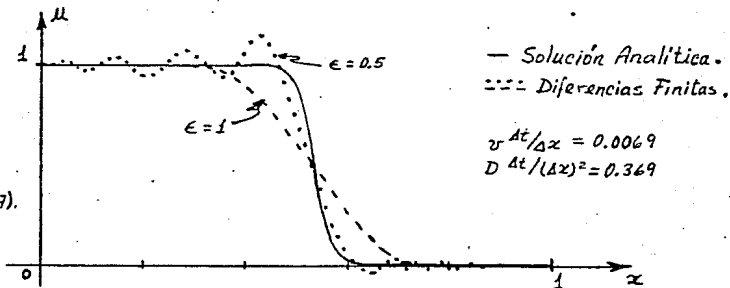


fig. 3.
(Allen, 1984)
(Pinder 1977).



($\epsilon =$ que tan explícito ó implícito en el tiempo es el esquema).

En estos esquemas numéricos, mediante algunas combinaciones, la elección apropiada del intervalo temporal Δt (Jensen-Finlayson 1980), ó bien, al ir cuando los pasos espacial y temporal ($\Delta x, \Delta t$) adecuadamente, se pueden eliminar estas oscilaciones ó bien el abajamiento de la solución numérica del frente real. Esto lleva a tomar valores ($\Delta x, \Delta t$) muy pequeños; lo que da como resul-

tado el tener que resolver una gran cantidad de sistemas de ecuaciones de dimensión grande para modelar todo el proceso, y a un incremento en los errores de redondeo en las operaciones aritméticas involucradas.

En este trabajo se proponen esquemas numéricos diferentes que se obtienen a partir de una fórmula de Green generalizada para la ecuación (1). (Herrera, 1984; Herrera 1985 I, II, III). Brevemente la idea es la siguiente.

A un operador diferencial lineal de cualquier tipo, se le asocia - mediante una metodología llamada "Aproximación Unificada", una fórmula de Green válida para una partición dada en el dominio Ω del problema; por esto se denomina Fórmula de Green generalizada". Para un problema de tipo parabólico como (1), existen dos formas de asociarle esta fórmula de Green. La primera es aplicar la metodología al operador completo (Tratamiento completo) y la segunda es aproximar por Diferencias Finitas a la derivada temporal y aplicar después la metodología ó bien, aplicar la metodología a la parte "espacial" del operador y después aproximar por Diferencias Finitas a la derivada temporal. Estas últimas opciones se denominan Tratamiento Incompleto.

En ambos casos la fórmula de Green obtenida conduce a una fórmula variacional que contiene la información desconocida del problema, i.e. valores de la solución en el interior de los elementos, valores de u y sus derivadas (normales) sobre las interfronteras de la partición - cuando se usa el Tratamiento Completo -, ó sobre los nodos de esta - cuando se usa el Tratamiento Incompleto -, y, los valores de frontera complementarios y fijas del problema. Mediante la elección adecuada de las funciones de peso contenidas en una fórmula de Green, se puede seleccionar la información que se desea. Aquí se eligen de tal forma que se tenga únicamente información de la solución sobre las interfronteras ó sobre los nodos de la partición, según el caso.

Cuando se requiera, se harán algunas aproximaciones de tal forma que finalmente se obtenga un sistema de ecuaciones lineales completo, que al invertirlo dará como resultado valores aproximados de la solución en los nodos de la partición.

Finalmente, este trabajo está estructurado de la siguiente forma: en el primer capítulo se establecen los elementos básicos de la Mecánica del Continuo y de Flujos en medios porosos, que permitan la deducción de la ecuación (1). En el segundo capítulo se exponen los conceptos básicos de la Aproximación Unificada mediante ejemplos sencillos que faciliten su comprensión. En el tercer capítulo se obtienen los diferentes esquemas numéricos que dan los tratamientos completo e incompleto para los problemas

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{P_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

con:

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

$$u(0, t) = 1$$

$$u(1, t) = 1$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{P_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

con:

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

$$u(0, t) = 1$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = 0$$

donde $P_2 =$ Número de Peclet y $0 \leq x \leq 1$, $t > 0$. En el cuarto capítulo se exponen los resultados obtenidos para algunos de estos esquemas.

• Mecánica del Continuo y Fluidos en Medios Porosos.

El problema de Difusión-Advección se sitúa dentro del contexto de la Física Macroscópica; aquí se estudia el movimiento de los cuerpos cuyas magnitudes y comportamiento permitan la aplicación de la Mecánica Clásica. Dentro de este marco general no se toma en cuenta la composición atómica de los cuerpos y se les considera continuos.

En esta mecánica de los cuerpos continuos ó simplemente Mecánica del Continuo, - a diferencia de la mecánica de partículas en que la descripción matemática depende solamente de una variable independiente, el tiempo -, la descripción depende en el caso más general de cuatro variables independientes, tres para las coordenadas espaciales que ocupa el cuerpo y la restante para el tiempo, y en este caso las ecuaciones que rigen el movimiento son ecuaciones diferenciales parciales.

En este capítulo se encuentran en su primera sección "Cinemática del Continuo", las definiciones básicas de propiedades intensivas y extensivas de un cuerpo, de lo que son las descripciones euleriana y lagrangiana del movimiento de este y finalmente se anotan cuatro teoremas matemáticos que permitirán obtener en la siguiente sección "Dinámica del Continuo", - a partir de la Ley de Balance global de una propiedad extensiva -, balances puntuales para la propiedad intensiva asociada. Se determinan los balances de masa, momentum lineal y angular y de energía. En la tercera sección: "Fluidos en Medios Porosos", se establecen las ecuaciones constitutivas de este problema: la Ley de Darcy y la Ley de Fick; con estas ecuaciones se determina - haciendo uso de los balances de la sección anterior -, la ecuación de Difusión-Advección.

1. Cinemática del Medio Continuo.

En mecánica clásica, la cinemática estudia el movimiento sin reparar en las causas que lo originan. En este caso se estudiará el movimiento que ocurre en el espacio físico euclidiano (\mathbb{R}^3) de una porción del medio continuo que se denomina "cuerpo". Dado que las coordenadas se asignan a un punto del espacio, entonces a la fracción del cuerpo que se le asocian coordenadas se le denomina "punto material" o "partícula". Un cuerpo se denotará con la letra B y una partícula con X ; cada partícula X ocupa entonces una posición x en cada tiempo t , en otras palabras, la posición es función de la partícula y del tiempo, lo que se denota en la forma:

$$x = x(X, t) \quad , \quad x = (x_i) \quad i=1,2,3. \quad (1.1)$$

El cuerpo B tendrá las propiedades de la materia. Esta no se puede "crear" o "destruir" y es "impenetrable"; entonces si el volumen inicial de un cuerpo es no nulo, este nunca se anulará o se volverá infinito y dos partículas diferentes nunca ocuparán la misma posición en el mismo instante t . Estas suposiciones indican la existencia de una biyección entre partículas y sus coordenadas, además, la función de posición de las partículas, $x(X, t)$, tendrá derivadas continuas y la matriz jacobiana J cuyos elementos son:

$$J_{ij}(X, t) = \frac{\partial x_i}{\partial X_j}(X, t) \quad i, j=1,2,3.$$

es no singular, es decir: $J = \det J \neq 0$.

En Física, al cuerpo B se le asocian magnitudes o propiedades que se pueden medir y de las que se puede hacer un estudio cuantitativo, lo que permitirá saber como se comportará el cuerpo a medida que transcurre el tiempo. Estas se dividen en dos clases: propiedades Intensivas y propiedades Extensivas.

◦ **Propiedades Intensivas.** Son las que se pueden asociar a todas y cada una de las partículas del cuerpo y se caracterizan mediante un número o un vector, p. ej. temperatura, densidad, velocidad, etc..

Teniendo entonces una propiedad intensiva π - según la mecánica clásica -, existen dos formas de describirla dependiendo de la forma en que se estudie a las partículas del cuerpo, y éstas son:

i). **Descripción Lagrangiana.** Es la utilizada comúnmente en la mecánica clásica; en este caso se sigue el movimiento de la partícula. Entonces dada la partícula X y el instante t , se le asigna el valor de la propiedad π ; esto se denota mediante una función $\Phi(X, t)$ escalar o vectorial.

ii). **Descripción Euleriana.** Es la utilizada cuando las trayectorias que siguen las partículas son muy complejas; en esta se fija la atención en un punto del espacio y a cualquier partícula que pase por ahí en el instante t , se le asigna el valor de la propiedad π en ese punto en el instante t . Esto se denota mediante una función $\Psi(x, t)$ escalar o vectorial.

Las descripciones Lagrangiana y Euleriana son equivalentes y están relacionadas en la forma:

$$\Phi(X, t) = \Psi(x(X, t), t) \quad (1.2)$$

Dada una u otra descripción del movimiento, se puede definir la velocidad correspondiente. En la descripción Lagrangiana, la velocidad se define en la misma forma que en la mecánica clásica, es decir, como la derivada de la posición respecto del tiempo:

$$V(X, t) = \frac{dx}{dt}(X, t) = \dot{x}_t(X, t) \quad (1.3)$$

La velocidad en la descripción Euladiana está relacionada con la anterior en la forma (1.2), esto es:

$$\underline{V}(\underline{x}, t) = \underline{v}(\underline{x}(\underline{x}, t), t) \quad (1.4)$$

donde \underline{v} denota a la velocidad en la descripción Euladiana. De manera análoga se puede definir la derivada lagrangiana o material de cualquier propiedad en la forma:

$$d\Phi/dt(\underline{x}, t) = \Phi_t(\underline{x}, t) \quad (1.5)$$

Denotando a la derivada euladiana de alguna propiedad en la forma $\Psi_t(\underline{x}, t)$, es muy simple obtener una relación entre ambos tipos de derivadas; derivando la relación (1.2):

$$\Phi_t(\underline{x}, t) = \Psi_t(\underline{x}(\underline{x}, t), t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \underline{x}_i}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{x}_i}(\underline{x}(\underline{x}, t), t)$$

$$= \Psi_t(\underline{x}(\underline{x}, t), t) + \underline{V}(\underline{x}, t) \cdot \nabla \Psi(\underline{x}(\underline{x}, t), t)$$

y por (1.4)

$$\Phi_t(\underline{x}, t) = \Psi_t(\underline{x}(\underline{x}, t), t) + \underline{v}(\underline{x}(\underline{x}, t), t) \cdot \nabla \Psi(\underline{x}(\underline{x}, t), t) \quad (1.6)$$

Esta expresión da la derivada lagrangiana en términos de la descripción euladiana (descripción euladiana de la derivada material); denotando a esta por $D_t \Psi$ se tendrá:

$$D_t \Psi = \Psi_t(\underline{x}, t) + \underline{v}(\underline{x}, t) \cdot \nabla \Psi(\underline{x}, t) \quad (1.7)$$

⊙ **Propiedades Extensivas.** Son las que solo se pueden asociar al cuerpo completo, no a cada partícula, y se pueden caracterizar por un escalar o por un vector, p.ej. masa, momentum, etc..

Las propiedades extensivas se pueden obtener a partir

de propiedades intensivas. Siendo B el cuerpo y $B(t)$ la región del espacio ó posición que ocupa en el instante t , entonces

$$\text{Propiedad Extensiva: } E(t) = \int_{B(t)} \Psi(x, t) dx$$

Ejemplos. Dada la densidad $\rho(x, t)$, entonces:

$$\text{Masa: } M(t) = \int_{B(t)} \rho(x, t) dx$$

$$\text{Momentum: } P(t) = \int_{B(t)} \rho(x, t) v(x, t) dx$$

Para obtener más relaciones entre propiedades intensivas y extensivas y otros resultados, es necesario utilizar algunos teoremas del Cálculo Diferencial.

• Teorema de la Divergencia. Sean Ω el volumen limitado por una superficie $\partial\Omega$ y \underline{U} una función vectorial definida en Ω con derivadas continuas, entonces

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} dx = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} dx'$$

donde \underline{n} es el vector unitario normal exterior a la superficie $\partial\Omega$. Cuando la función \underline{U} presenta discontinuidad de primer orden sobre alguna superficie en Ω , el teorema se extiende a la forma:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \underline{U} dx = \int_{\partial\Omega} \underline{U} \cdot \underline{n} dx' - \int_{\Sigma} [\underline{U}] \cdot \underline{n} dx'$$

donde $[\underline{U}]$ es el salto de la función \underline{U} en la superficie $\Sigma \subset \Omega$. □

• Regla de Leibniz. Se utiliza cuando se quiere derivar integrales en las que la región de integración depende del parámetro respecto al cual se deriva. Considérese a $f(x, t)$

una función continua con derivadas continuas y que:

$$I(t) = \int_{\Omega(t)} f(x, t) dx$$

con $\Gamma(t) = \partial\Omega(t)$ la frontera de $\Omega(t)$, \underline{n} el vector normal exterior a esta frontera y \underline{v}_r la velocidad con que se desplazan los puntos sobre $\Gamma(t)$, entonces

$$\frac{dI}{dt} = \int_{\Omega(t)} f_x(x, t) dx + \int_{\Gamma(t)} f(x, t) \underline{v}_r \cdot \underline{n} dx'$$

Si $f(x, t)$ y su derivada presentan discontinuidades de primer orden sobre alguna interfaz, se puede generalizar la expresión anterior. Suponiendo $\Omega(t) = \Omega_1(t) \cup \Omega_2(t)$ como se muestra en la figura 1.1 y aplicando a cada subregión la regla anterior, desdoblando, agrupando y tomando como convención que \underline{n} debe de apuntar de $\Omega_1(t)$ hacia $\Omega_2(t)$, entonces:

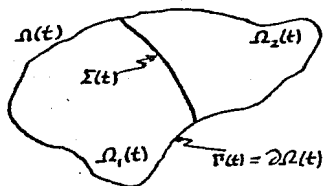


fig. 1.1.

$$\begin{aligned} I_t(t) &= \int_{\Omega(t)} f_x(x, t) dx \\ &+ \int_{\Gamma(t)} f(x, t) \underline{v}_r \cdot \underline{n} dx' \\ &- \int_{\Sigma(t)} [f] \underline{v}_\Sigma \cdot \underline{n} dx' \end{aligned}$$

donde $[f] = f_{\Omega_2}(\underline{z}(t), t) - f_{\Omega_1}(\underline{z}(t), t)$ es el salto de la función en la superficie de discontinuidad $\Sigma(t)$ y \underline{v}_Σ es la velocidad con que se desplazan los puntos en $\Sigma(t)$. \square

• Lema de Dubois-Raymond. Si f es continua en Ω y además su integral sobre cualquier subregión $R \subset \Omega$ se anula, i.e.

$$\int_R f(x) dx = 0, \quad \forall R \subset \Omega.$$

entonces

$$f(x) = 0 \quad \forall x \in \Omega$$

Corolario. Sean f y g continuas en Ω , si

$$\int_R f(x) dx = \int_R g(x) dx \quad \forall R \subset \Omega$$

entonces

$$f = g \quad \forall x \in \Omega$$

Extensión. Si f es una función con una discontinuidad de primer orden en alguna superficie Σ de $R \subset \Omega$ tal que

$$\int_R f(x) dx + \int_{x \in R} [f] dx = 0 \quad \forall R \subset \Omega$$

entonces

$$f = 0, \quad [f] = 0 \quad \forall x \in \Omega.$$

□

Sea $V(t)$ el volumen de un cuerpo B en el instante t , entonces por definición

$$V(t) = \int_{B(t)} dx = \int_B J(x, t) dx$$

derivando, aplicando el teorema de la divergencia y cambiando coordenadas:

$$\begin{aligned} V_c(t) &= \int_{\partial B(t)} v_{\partial B} \cdot n dx' = \int_{B(t)} \nabla \cdot v_{\partial B}(x, t) dx \\ &= \int_B J_c(x, t) \nabla \cdot v_{\partial B}(x(x, t), t) dx \end{aligned}$$

Por otro lado

$$V_c(t) = \int_B J_c(x, t) dx$$

igualando y aplicando Dubois-Raymond:

$$J_z(x, t) = J(x, t) \nabla \cdot \underline{v}_{z\partial\delta}(z(x, t), t)$$

$$\Rightarrow -J_z(x, t) / J(x, t) = \nabla \cdot \underline{v}_{z\partial\delta}(z(x, t), t) \quad (1.8)$$

$\therefore \nabla \cdot \underline{v}_{z\partial\delta}(z(x, t))$ es la representación euleriana de J_z / J .

Generalizando, dada una propiedad intensiva Π en su representación euleriana $\Psi(z, t)$, la propiedad extensiva correspondiente se obtiene en la forma

$$E(t) = \int_{B(t)} \Psi(z, t) dz \quad (1.9)$$

La representación lagrangiana de una propiedad extensiva se obtiene fácilmente

$$\begin{aligned} E(t) &= \int_B \Psi(z(x, t), t) J(x, t) dx \\ &= \int_B \Phi(x, t) J(x, t) dx \end{aligned} \quad (1.10)$$

Ahora es posible obtener la derivada temporal de una propiedad extensiva. Suponiendo que $\Psi(z, t)$ y sus derivadas son continuas, entonces:

$$E_t(t) = \int_{B(t)} \Psi_t(z, t) dz + \int_{\partial B(t)} \Psi(z, t) \underline{v}_{z\partial\delta}(z, t) \cdot \underline{n} dz'$$

y por el teorema de la divergencia

$$E_t(t) = \int_{B(t)} \{ \Psi_t + \nabla \cdot (\Psi \underline{v}_{z\partial\delta}) \} dz \quad (1.11)$$

También se puede obtener (1.11) a partir de la representación (1.10). Suponiendo que $\Phi(x, t)$ y $J(x, t)$ y sus derivadas son continuas, entonces:

$$E_c(t) = \int_B \{ \Phi_c(x,t) J(x,t) + \Phi(x,t) J_c(x,t) \} dx$$

$$= \int_B \{ \Phi_c(x,t) + \Phi(x,t) J_c(x,t) / J(x,t) \} J(x,t) dx$$

v regresando a la representación euleriana utilizando (1.2) y teniendo en cuenta (1.7) y (1.8)

$$E_c(t) = \int_{B(t)} \{ \Psi_c(x,t) + \psi(x,t) \cdot \nabla \Psi(x,t) + \Psi(x,t) \nabla \cdot \psi(x,t) \} dx$$

$$= \int_{B(t)} \{ \Psi_c + \nabla \cdot (\Psi \psi) \} dx$$

A partir de esta relación se puede obtener el principio de conservación de masa. Siendo $\Psi(x,t)$ la propiedad intensiva "densidad de masa" $\rho(x,t)$, la masa total se obtiene fácilmente:

$$M(t) = \int_{B(t)} \rho(x,t) dx$$

$$\Rightarrow M_c(t) = \int_{B(t)} \{ \rho_c + \nabla \cdot (\rho \psi) \} dx$$

si $M_c(t) = 0$ entonces

$$\rho_c + \nabla \cdot (\rho \psi) = 0 \quad (1.12)$$

Si la propiedad intensiva tiene una discontinuidad de primer orden en alguna superficie $\Sigma(t) \subset B(t)$, entonces la derivada de la propiedad extensiva asociada será:

$$E_c(t) = \int_{B(t)} \Psi_c(x,t) dx + \int_{\partial B(t)} \Psi(x,t) \psi_{\partial B}(x,t) \cdot \underline{n} dx - \int_{\Sigma(t)} [\Psi] \underline{v}_{\Sigma} \cdot \underline{n} dx$$

Utilizando el teorema de la divergencia para $f = \Psi \psi$:

$$\int_{B(t)} \nabla \cdot (\Psi \psi) dx = \int_{\partial B(t)} \Psi \psi \cdot \underline{n} dx' - \int_{\Sigma(t)} [\Psi \psi] \cdot \underline{n} dx''$$

$$\Rightarrow \int_{\partial B(t)} \Psi \psi \cdot \underline{n} dx' = \int_{B(t)} \nabla \cdot (\Psi \psi) dx + \int_{\Sigma(t)} [\Psi \psi] \cdot \underline{n} dx''$$

donde v representa la velocidad de las partículas de $B(t)$ y por continuidad

$$v_{\partial B} = v \Big|_{\partial B}, \quad v_x = v \Big|_x$$

entonces substituyendo en la expresión anterior se tendría que

$$E_t(t) = \int_{B(t)} \{ \Psi_t(x,t) + \nabla \cdot (\Psi v) \} dx + \int_{\Sigma(t)} [\Psi (v - v_x)] \cdot n dx' \quad (1.13)$$

Si $\Psi_t + \nabla \cdot (\Psi v) = \Psi_t + v \cdot \nabla \Psi + \Psi \nabla \cdot v = D_t \Psi + \Psi \nabla \cdot v$
entonces

$$E_t(t) = \int_{B(t)} \{ D_t \Psi + \Psi \nabla \cdot v \} dx + \int_{\Sigma(t)} [\Psi (v - v_x)] \cdot n dx' \quad (1.14)$$

2. Dinámica del Medio Continuo.

Al igual que en la mecánica de partículas, la dinámica del continuo relaciona el movimiento de los cuerpos con las causas que los producen, esto es, con las fuerzas aplicadas sobre los cuerpos. En la mecánica se establecen leyes fundamentales del movimiento (leyes de Newton), y se definen magnitudes físicas (momentum, energía, etc.) que unidas a las leyes fundamentales permitirán conocer el movimiento de la partícula conociendo la fuerza que actúa sobre ella.

En la mecánica del Continuo se hace algo parecido; se han establecido propiedades intensivas (puntuales) y propiedades extensivas (globales), y a través de estas se definirán magnitudes físicas, se establecerán leyes fundamentales y se tendrán principios de conservación. Hay que tener en cuenta que toda magnitud física que se define en la mecánica del continuo, debe ser tal que esté asociada a todo el cuerpo, en otras palabras, estas deberán ser propiedades extensivas. Por ejemplo el momentum lineal:

$$\tilde{M}_x = \int_{B(t)} \rho v dx$$

no es posible definir solo el momento lineal de una fracción del cuerpo ó de cada partícula de este. Sin embargo, por lo visto en la sección anterior es posible determinar relaciones asociadas a esta magnitud que se cumplen puntualmente. Del mismo modo que en la mecánica de partículas, los cambios que experimentan las magnitudes físicas definidas (p.ej. la propiedad extensiva *momentum lineal*) a medida que transcurre el tiempo, estarán relacionadas con las causas (fuerzas) que producen estos cambios.

En general, dada una propiedad intensiva π y su representación euladiana $\Psi(x, t)$, se le puede asociar la propiedad extensiva

$$E(t) = \int_{B(t)} \Psi(x, t) dx$$

entonces, el cambio que experimenta esta propiedad extensiva a medida que transcurre el tiempo será igual a la influencia total ejercida sobre el cuerpo, lo que se puede expresar en la forma:

$$E_c(t) = \frac{d}{dt} \int_{B(t)} \Psi dx = \int_{\partial B(t)} \underline{\xi} \cdot \underline{n} d\underline{x}' + \int_{B(t)} g dx \quad (2.1)$$

donde la integral de superficie contendrá a los "estímulos" ejercidos en la dirección normal a la superficie que delimita al cuerpo, y la integral de volumen contendrá a los "estímulos" ejercidos sobre todo el cuerpo. Estos estímulos se tendrán que reflejar en los valores de la representación euladiana $\Psi(x, t)$ de la propiedad intensiva π . En general, a $\underline{\xi}$ se le denomina "flujo de Ψ a través de la frontera del cuerpo", y a g el "suministro desde el exterior de Ψ ".

La ecuación (2.1), se denomina Ley de Balance cuando se cumple en toda porción del cuerpo B .

Utilizando los resultados matemáticos de la sección anterior, es posible obtener - a partir de estos balances globales ó totales -, ecuaciones que dan un balance local ó puntual, en otras palabras, una forma diferencial para una "Ley General de Balance". Así para un

caso general, substituyendo (1.13) en (2.1) :

$$\int_{B(t)} \{\psi_t + \nabla \cdot (\chi \psi)\} d\bar{x} + \int_{\Sigma(t)} \{\psi(\bar{v} \cdot \underline{n}_2)\} \cdot \underline{n} d\bar{x}'' - \int_{\partial B(t)} \underline{\xi} \cdot \underline{n} d\bar{x}' - \int_{B(t)} g d\bar{x} = 0$$

Utilizando el teorema de la divergencia generalizado para discontinuidades, se tendrá que:

$$\int_{B(t)} \{\psi_t + \nabla \cdot (\chi \psi) - \nabla \cdot \underline{\xi} - g\} d\bar{x} - \int_{\Sigma(t)} \{\psi(\bar{v} \cdot \underline{n}_2) - \underline{\xi}\} \cdot \underline{n} d\bar{x}'' = 0$$

y por el lema de Dubois-Raymond :

$$\begin{aligned} \psi_t + \nabla \cdot (\chi \psi) - \nabla \cdot \underline{\xi} - g &= 0 & \text{sobre } B(t) & \quad (a) \\ [\psi(\bar{v} \cdot \underline{n}_2) - \underline{\xi}] \cdot \underline{n} &= 0 & \text{sobre } \Sigma(t) & \quad (b) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Al igual que en la mecánica de partículas donde se establecen principios (o' leyes) de conservación de masa, momentum, energía, etc., en la mecánica del continuo se establecen Leyes de Balance para estas magnitudes físicas.

• Balance de Masa.

Tomando la densidad de masa como propiedad intensiva, la masa total del cuerpo está dada por la expresión

$$M(t) = \int_{B(t)} \rho(\bar{x}, t) d\bar{x}$$

entonces el cambio de la masa respecto al tiempo será igual a la masa total que entra a través de la frontera del cuerpo (por unidad de tiempo), más la masa que se gana o pierde dentro del cuerpo debido a la existencia de una fuente o un sumidero. Esto se expresa en la forma:

$$\dot{M}_t(t) = \int_{\partial B(t)} \underline{\xi} \cdot \underline{n} d\bar{x}' + \int_{B(t)} g d\bar{x} \quad (2.3)$$

donde $\underline{\xi}$ es un vector que se denomina "flujo de masa a través

de la frontera (x) , y g es la generación (ó pérdida) de masa por unidad de volumen. Entonces aplicando (2.2):

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) - \nabla \cdot \underline{\underline{\xi}} - g = 0 \quad \text{en } B(t) \quad (a) \quad (2.4)$$

$$[\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_x) - \underline{\underline{\xi}}] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma(t) \quad (b)$$

• Balance de Momentum Lineal.

El momentum lineal de un cuerpo B en un cierto instante t , se define como:

$$\underline{M}_L(t) = \int_{B(t)} \rho \mathbf{v} \, dx$$

con ρ = densidad de masa, \mathbf{v} = velocidad euleriana y al igual que en la mecánica de partículas, la variación del momentum lineal respecto al tiempo es igual a la fuerza total aplicada sobre este, tanto en su superficie como en los puntos interiores; esto se puede expresar en la forma:

$$d\underline{M}_L/dt = \underline{F}_{tot.} = \int_{B(t)} \mathbf{g} \, dx + \int_{\partial B(t)} \mathbf{T} \cdot d\underline{x}' \quad (2.5)$$

donde \mathbf{T} denota a las fuerzas que ejerce el exterior directamente sobre la superficie del cuerpo, también llamadas "tracciones", (fuerza por unidad de superficie), y \mathbf{g} denota a las fuerzas ejercidas desde el exterior sobre los puntos interiores de este, también llamadas

(*) Haciendo un análisis dimensional de la ecuación (2.3), se encuentra fácilmente que $[\underline{\underline{\xi}}] = \text{masa}/\text{área} \cdot \text{tiempo}$, que son las unidades de un flujo. Por lo tanto, $\underline{\underline{\xi}}$ se puede interpretar como un vector cuyas componentes (ξ_x, ξ_y, ξ_z) indican lo que fluye ó entra al cuerpo en un punto de la frontera de este en las direcciones x, y, z , respectivamente.

"fuerzas de cuerpo" (fuerza por unidad de volumen).

Observación. La tracción \mathbf{T} puede incidir en un punto de la superficie $\partial B(t)$ en cualquier dirección. El vector \mathbf{T} se puede descomponer en la dirección normal y en el plano tangente a la superficie. De estas componentes solo la componente normal se puede determinar en forma única (fig. 2.1); las componentes de la proyección sobre el plano normal pueden tener cualesquiera valores, dependiendo del sistema de vectores base que se tomen en este plano.

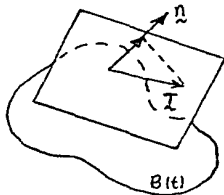


fig. 2.1.

Se puede entonces demostrar algo muy importante (Ver Apéndice G.):

"El vector de tracción depende en forma lineal del vector normal a la superficie $\partial B(t)$ en un punto", en otras palabras, "existe una transformación lineal que mapea al vector normal a la superficie en un punto, en la tracción ejercida en ese punto".

Representando a esta transformación lineal mediante una matriz $\underline{\underline{\xi}}$ entonces

$$\mathbf{T} = \underline{\underline{\xi}} \cdot \mathbf{n} \quad (2.6)$$

donde los elementos de esta matriz son las componentes de lo que se denomina "Tensor de Esfuerzos". Tomando entonces a $\Psi = \rho \mathbf{v}$, $\mathbf{T} = \underline{\underline{\xi}} \cdot \mathbf{n}$ y a $\mathbf{g} = \rho \mathbf{b}$, con \mathbf{b} denotando "fuerza por unidad de masa", las ecuaciones de balance locales para el momentum lineal son:

$$(\rho \mathbf{v})_t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla \cdot \underline{\underline{\xi}} - \rho \mathbf{b} = 0 \quad \text{en } B(t) \quad (a)$$

$$[\rho \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \underline{\underline{\nu}}) - \underline{\underline{\xi}}] \cdot \underline{\underline{\nu}} = 0 \quad \text{en } \Sigma(t) \quad (b)$$

(2.7)

donde $\underline{v} \underline{v}$ representa el producto tensorial de dos vectores, y $\nabla \cdot \underline{z}$, $\nabla \cdot (\rho \underline{v} \underline{v})$ las divergencias de dos tensores, que será igual a vectores, cuyos componentes se calculan en la forma:

$$(\nabla \cdot \underline{z})_i = \partial_{\alpha j} z_{ij} / \partial x_j, \quad z_{ij} \text{ elementos de } \underline{z}$$

$$\nabla \cdot (\rho \underline{v} \underline{v})_i = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i), \quad \rho v_j v_i \text{ elemento de } \rho \underline{v} \underline{v} \quad i, j = 1, 2, 3$$

con la convención de suma para índices repetidos. En el caso en que la masa se conserva, i.e., si

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \underline{v}) = 0$$

entonces $\rho(\underline{v}_t + \underline{v} \nabla \cdot \underline{v}) - \nabla \cdot \underline{z} - \rho \underline{b} = 0 \quad (a)$

o bien $\rho D_t \underline{v} - \nabla \cdot \underline{z} - \rho \underline{b} = 0 \quad (b) \quad (2.8)$

y con el salto $[\rho \underline{v} (\underline{v} - \underline{v}_x) - \underline{z}] \cdot \underline{n} = 0 \quad (c)$

Las ecuaciones (2.8) se conocen como "Primera Ley de Cauchy de la Mecánica del Continuo". Las ecuaciones (2.7) y (2.8) se cumplen independientemente de la naturaleza del medio continuo que se considere, en particular se cumplen para sólidos y líquidos. La diferencia entre las ecuaciones asociadas a unos ó a otros será la forma en que se defina el tensor de esfuerzos y que como se verá más adelante, siempre será un tensor simétrico.

• Balance de Momentum Angular.

El momentum angular de un cuerpo B en un instante t se define - respecto a un cierto origen -, en la forma

$$\underline{M}_a(t) = \int_{B(t)} \underline{x} \times (\rho \underline{v}) d\underline{x} \quad (2.9)$$

y como en la mecánica de partículas, el cambio del momentum an-

gular respecto al tiempo es igual a la torca producida por la fuerza total aplicada al cuerpo, lo que se expresa en la forma:

$$\frac{dM_a}{dt}(t) = \int_{B(t)} \underline{x} \times \underline{q} \, d\bar{x} + \int_{\partial B(t)} \underline{x} \times \underline{I} \, d\bar{x} \quad (2.10)$$

en donde la integral de volumen contiene la torca total que producen las fuerzas de cuerpo y la integral de superficie contiene a la torca total que produce la tracción. Al igual que en el balance de momentum lineal sean $\underline{q} = \rho \underline{b}$ y $\underline{I} = \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{n}$, entonces:

$$\frac{dM_a}{dt}(t) = \int_{B(t)} \underline{x} \times (\rho \underline{b}) \, d\bar{x} + \int_{\partial B(t)} (\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}}) \cdot \underline{n} \, d\bar{x} \quad (2.11)$$

donde la componente (i, j) del tensor que resulta del "producto exterior" $(\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}})$ de un vector por un tensor, está definida en la forma (ver Apéndice G):

$$(\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}})_{ij} = \epsilon_{irk} x_r \tau_{kj} \quad i, j, k, r = 1, 2, 3.$$

con τ_{kj} elementos de la matriz $\underline{\underline{\tau}}$, x_r componentes del vector \underline{x} y

$$\epsilon_{irk} = \begin{cases} 1, & \text{si la permutación en el orden de los índices es par.} \\ 0, & \text{si hay dos ó más índices con el mismo valor.} \\ -1, & \text{si la permutación en el orden de los índices es impar.} \end{cases}$$

teniendo en cuenta que $\epsilon_{123} = 1$.

Entonces tomando $\Psi(\underline{x}, t) = \underline{x} \times (\rho \underline{v})$ y aplicando (2.2) se tendrá que:

$$(\underline{x} \times (\rho \underline{v}))_i + \nabla \cdot (\underline{x} \times (\rho \underline{v}) \underline{v}) - \nabla \cdot (\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}}) - \underline{x} \times (\rho \underline{b}) = 0$$

desarrollando y agrupando convenientemente se llegará a las ecuaciones:

$$\underline{x} \times D_i(\rho \underline{v}) + \underline{x} \times (\rho \underline{v}) \cdot \nabla \underline{v} - \nabla \cdot (\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}}) = 0 \quad \text{en } B(t) \quad (a). \quad (2.12)$$

$$((\underline{x} \times (\rho \underline{v})) \cdot \underline{v} - \underline{x} \times \underline{\underline{\tau}}) \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{en } \Sigma(t) \quad (b).$$

Teniendo en cuenta que (ver Apéndice G.)

$$(\underline{x} \times p \underline{x})(\underline{v} - \underline{v}_z) - \underline{x} \times \underline{\xi} \cdot \underline{n} = \underline{x} \times ([p \underline{v}(\underline{v} - \underline{v}_z) - \underline{\xi}] \cdot \underline{n}) \quad (2.13)$$

y si se cumple (2.7)b., entonces (2.12)b. se satisface necesariamente; por lo tanto, no es necesario tener en cuenta esta ecuación.

Trabajando ahora la ecuación (2.12)a. se puede encontrar una propiedad interesante del tensor de esfuerzos. Tómese a este como un arreglo de tres vectores columna:

$$\underline{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$$

entonces:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\underline{x} \times \underline{\xi}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\underline{x} \times \xi_j) = \underline{x} \times \frac{\partial \xi_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \underline{x}}{\partial x_j} \times \xi_j \\ &= \underline{x} \times \frac{\partial \xi_j}{\partial x_j} + \hat{e}_j \times \xi_j \end{aligned}$$

donde \hat{e}_j es el vector base unitario en la dirección x_j . Sustituyendo en (2.12)a. y agrupando adecuadamente, se tiene que

$$\underline{x} \times (D_i(p \underline{v})) + p \underline{v} \nabla \cdot \underline{v} - \nabla \cdot \underline{\xi} - p \underline{b}_i - \hat{e}_j \times \xi_j = 0$$

Suponiendo que se satisface la ecuación de balance local del momentum lineal (2.7)a., entonces:

$$\hat{e}_j \times \xi_j = 0$$

$$\Rightarrow (\tau_{32} - \tau_{23}, \tau_{13} - \tau_{31}, \tau_{21} - \tau_{12}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \tau_{32} = \tau_{23}, \tau_{13} = \tau_{31}, \tau_{21} = \tau_{12}$$

Por lo tanto, la validez de los balances locales de momentum lineal y angular obliga a que el tensor de esfuerzos sea simétrico.

Nota. Los principales resultados de los anteriores balances se pueden agrupar en un teorema fundamental para la mecánica del continuo, conocido como Teorema de Cauchy ó de Existencia del Esfuerzo que textualmente dice (Gurtin, 1971):

"Sea (I, b) un sistema de fuerzas para B (tracciones y fuerzas de cuerpo) durante un movimiento. Entonces una condición necesaria y suficiente para que los leyes de balance de momentum (lineal y angular) se satisfagan es que exista un campo tensorial espacial $\underline{\underline{\tau}}$ (llamado Esfuerzo de Cauchy) tal que:

- (a). Para cada vector unitario n : $I(n) = \underline{\underline{\tau}} \cdot n$.
- (b). $\underline{\underline{\tau}}$ es simétrico.
- (c). $\underline{\underline{\tau}}$ satisface la ecuación de movimiento

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} + b = \rho D_t v "$$

□

En este enfoque es evidente por los desarrollos anteriores, que la existencia del campo tensorial $\underline{\underline{\tau}}$ con las características (a), (b) y (c) es una condición necesaria cuando se satisfacen los balances de momentum; (a) y (c) se cumplen si se satisface el balance de momentum lineal y la masa se conserva, y (b) se cumple si se satisface el balance de momentum angular.

Se puede demostrar (Gurtin 1971) que la existencia del campo tensorial $\underline{\underline{\tau}}$ con las características (a), (b) y (c) es una condición suficiente para que se cumplan los balances de momentum lineal y angular.

• Balance de Energía.

Toda la discusión precedente ha sido puramente mecánica, es decir, no se ha tomado en cuenta la interacción entre procesos térmicos y mecánicos. Estos procesos están relacionados dentro del concepto de Energía. La energía total asociada a un cuerpo B se define como la suma de la energía debida al movimiento del cuerpo o energía cinética y de la energía que contiene el cuerpo en si mismo o energía interna, esto es

$$E(t) = \int_{B(t)} \rho (U + \frac{1}{2} v^2) dx \quad (2.14)$$

donde U denota la energía interna por unidad de masa, v la velocidad euleriana y ρ la densidad de masa.

Nuevamente, el cambio en el tiempo de la energía total del cuerpo B será igual a la energía que en forma de calor fluye a través de la superficie de este mas, la energía que en forma de calor se gana o pierde dentro del cuerpo, mas - por el Teorema del Trabajo y la Energía de la mecánica clásica -, el trabajo que efectúan las tracciones sobre la superficie del cuerpo y mas el trabajo que efectúan las fuerzas de cuerpo en el interior de este. Lo anterior se escribe en la forma:

$$E_t(t) = \int_{B(t)} \rho (Q + b \cdot v) dx + \int_{\partial B(t)} (q \cdot n + T \cdot n) dx \quad (2.15)$$

donde Q denota las fuentes de calor en B por unidad de masa, $q \cdot n$ el flujo de calor^(*) a través de la superficie de B en la dirección normal por unidad de área y unidad de tiempo, $b \cdot v$ el trabajo que efectúan las fuerzas de cuerpo por unidad de masa y unidad de tiempo y $T \cdot n$ el trabajo que efectúan las tracciones por unidad de área y de tiempo.

(*) q es el vector de "flujo de calor" (q_x, q_y, q_z) cuyas componentes son el calor que fluye en las direcciones x, y, z , respectivamente.

Derivando (2.14)

$$E_c(t) = \int_{B(t)} \frac{d}{dt} (\rho(U + v^2/2)) dx + \int_{\partial B(t)} \rho(U + v^2/2) v \cdot n dx - \int_{\Sigma(t)} (\rho(U + v^2/2)) v_x \cdot n dx \quad (2.16)$$

igualando (2.15) y (2.16) teniendo en cuenta que

$$T \cdot v = (\underline{z} \cdot n) \cdot v = (\underline{z}^T \cdot v) \cdot n = (\underline{z} \cdot v) \cdot n \quad (2.17)$$

y utilizando el Teorema de la divergencia se tendrá que:

$$\int_{B(t)} \frac{d}{dt} (\rho(U + v^2/2)) dx + \int_{B(t)} \nabla \cdot (\rho(U + v^2/2) v) dx + \int_{\Sigma(t)} \rho(U + v^2/2) v \cdot n dx - \int_{\Sigma(t)} \rho(U + v^2/2) v_x \cdot n dx = \int_{B(t)} (\rho(Q + b \cdot v)) dx + \int_{B(t)} \nabla \cdot (\rho(Q + \underline{z} \cdot v)) dx + \int_{\Sigma(t)} (\rho(Q + \underline{z} \cdot v)) \cdot n dx$$

agrupando adecuadamente:

$$\int_{B(t)} \left\{ \frac{d}{dt} (\rho(U + v^2/2)) + \nabla \cdot (\rho(U + v^2/2) v) - \rho(Q + b \cdot v) - \nabla \cdot (\rho(Q + \underline{z} \cdot v)) \right\} dx + \int_{\Sigma(t)} \left\{ \rho(U + v^2/2) (v - v_x) - (\rho(Q + \underline{z} \cdot v)) \right\} \cdot n dx = 0$$

y por Dubois-Raymond:

$$\frac{d}{dt} (\rho(U + v^2/2)) + \nabla \cdot (\rho(U + v^2/2) v) - \rho(Q + b \cdot v) - \nabla \cdot (\rho(Q + \underline{z} \cdot v)) = 0 \quad (2.18)$$
$$[\rho(U + v^2/2) (v - v_x) - (\rho(Q + \underline{z} \cdot v))] \cdot n = 0$$

Utilizando la derivada lagrangiana ó material:

$$D_t (\rho(U + v^2/2)) + \rho(U + v^2/2) \nabla \cdot v - \nabla \cdot (\rho(Q + \underline{z} \cdot v)) - \rho(Q + b \cdot v) = 0 \quad (a)$$

$$[\rho(U + v^2/2) (v - v_x) - (\rho(Q + \underline{z} \cdot v))] \cdot n = 0 \quad (b) \quad (2.19)$$

Si la masa se conserva ($P_t + \nabla \cdot (P\underline{v}) = 0$), entonces (2.19)a. queda en la forma

$$\rho D_t (U + v^2/2) - \nabla \cdot (\underline{q} + \underline{z} \cdot \underline{v}) - \rho (Q + \underline{b} \cdot \underline{v}) = 0 \quad (2.20)$$

teniendo en cuenta que $\rho D_t (v^2/2) = \rho \underline{v} \cdot (D_t \underline{v})$ y por (2.8)b (conservación de momentum lineal):

$$\rho \underline{v} \cdot (D_t \underline{v}) = \underline{v} \cdot (\nabla \cdot \underline{z} + \rho \underline{b})$$

(2.20) se simplifica, quedando

$$\rho D_t U - \underline{z} : \nabla \underline{v} - \nabla \cdot \underline{q} - \rho Q = 0 \quad (2.21)$$

con $\underline{z} : \nabla \underline{v} = z_{ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i}$ ($i, j = 1, 2, 3$) y donde $\rho D_t U$ representa la rapidez de cambio de la energía interna, $\nabla \cdot \underline{q}$ el flujo de calor por unidad de volumen, $\underline{z} : \nabla \underline{v}$ calentamiento por compresión y disipación, y ρQ las fuentes de calor.

3. Fluidos en Medios Porosos.

Como se mencionó anteriormente, las balances globales se cumplen independientemente de la naturaleza del medio continuo, es decir, son válidas tanto para sólidos como para fluidos y se pueden aplicar a problemas de elasticidad, fluidos viscosos, a problemas de transporte y difusión, etc. Combinando estas leyes de balance con las leyes que gobiernan a estos problemas, se pueden obtener las ecuaciones diferenciales parciales que los rigen.

Las leyes que rigen a cada problema en particular - determinadas experimental o matemáticamente - deberán estar formuladas de tal forma que indiquen como dependen \underline{z} y \underline{q} (ver (2.2)) de las propiedades intensivas del problema. Las expresiones matemáticas de estas leyes se denominan "Ecuaciones Constitutivas".

Una vez establecida la ecuación diferencial parcial que rige al problema, se intenta resolverla, para con esta solución poder predecir su comportamiento. Es claro que para poder hacer esto es necesario que el modelo sea completo, i.e. que se tengan el mismo número de ecuaciones y de incógnitas y que el problema esté bien planteado, esto es, que se tengan las condiciones iniciales y de frontera tales que el problema posea una y solo una solución.

En este trabajo se ataca un problema que surge en flujo de fluidos a través de medios porosos; este es el de transporte de una sustancia disuelta en un medio poroso saturado homogéneo e isotrópico.

¿Que problema real puede dar origen a algo semejante?

Desde la educación elemental es bien conocido el siguiente proceso: el sol evapora el agua de los ríos, lagos, del mar, de la tierra húmeda, etc.; este vapor asciende, se condensa y forma "nubes". Cuando las pequeñas gotas que forman a estas nubes son lo suficientemente pesadas, se precipitan hacia el suelo en forma de lluvia, el agua vuelve a acumularse en ríos y lagos, parte es absorbida por el suelo y viaja a través de este "medio poroso" y se acumula en depósitos subterráneos o sale por alguna parte al exterior y nuevamente se repite este ciclo. Esta "circulación" continua entre atmósfera y tierra se conoce como "Ciclo Hidrológico".

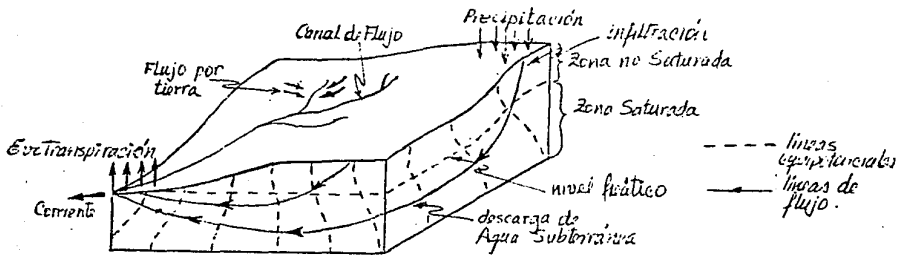


fig. 3.1 (Cherry 1979).

Como se puede observar (fig.3.1), la infiltración del agua a través del "medio poroso" se efectúa por la atracción de la gravedad sobre ésta. Para simplificar el tratamiento cuantitativo de este proceso, se considera el dispositivo que se muestra en la fig.3.2, un cilindro de sección transversal A relleno de algún "medio poroso" (p.ej. arena), con entrada y salida iguales en los extremos de éste.

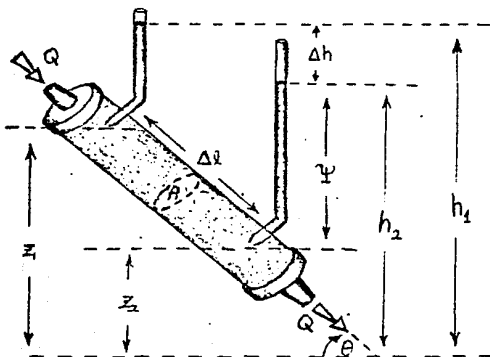


fig.3.2. (Cherry 1979).

Supóngase que entra agua al cilindro a una razón Q y que el medio poroso está saturado, de tal forma que el agua sale por el otro extremo del cilindro a la misma razón Q . El cilindro - que se encuentra a una inclinación θ -, tiene dos manómetros separados una distancia Δl cuyas lecturas y posiciones se toman respecto a un cierto nivel -arbitrario- $z=0$. La

cantidad de agua que atraviesa la sección transversal A por unidad de tiempo, se denomina "Descarga Específica" y se define como

$$v = Q/A \quad (3.1)$$

con $[Q]=l^3/T$, $[A]=l^2$ y $[v]=l/T$. Experimentalmente se encuentra que:

$$v \sim -\Delta h \quad \text{con } \Delta l = \text{cte.}$$

y que

$$v \sim 1/\Delta l \quad \text{con } -\Delta h = \text{cte.}$$

Introduciendo una constante K de proporcionalidad se tendrá que

que en el límite es:

$$v = -K \frac{dh}{dl}$$

$$v = -K \frac{dh}{dl}$$

(3.2).

Iguando las ecuaciones (3.1) y (3.2) se encuentra que

(Ley de Darcy) $Q = -KA \frac{dh}{dl}$ (3.3)

Aquí, h se denomina "carga hidráulica" y dh/dl "gradiente hidráulico". La constante K depende del material que forma al medio poroso y del fluido que atraviesa a este; K se conoce como "Conductividad Hidráulica", $[K] = l/T$.

Hay que hacer notar que la "Ley de Darcy" es válida para todo valor de θ , incluso cuando el flujo es "contra la gravedad". Esta es una ley empírica, respaldada por la evidencia experimental y que es fundamental en el estudio de flujos a través de medios porosos.

Sin embargo, estos flujos en otra escala son bastante más complicados. Las partículas individuales del fluido tienen asociadas velocidades y trayectorias "microscópicas" diferentes en cada instante. Una descripción "exacta" debe proporcionar los valores de estas velocidades y trayectorias, lo que es realmente imposible. La Ley de

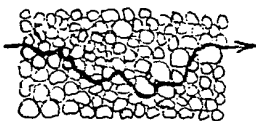


fig. 3.3

Darcy describe correctamente al fenómeno desde el punto de vista microscópico, en el que no importa la "estructura" del medio poroso; físicamente, la aproximación de Darcy reemplaza la estructura granular del medio poroso por un medio continuo representativo al que se pueden asociar parámetros "macroscópicos" medibles, que dan descripciones promedio del comportamiento "microscópico real". En esta forma se estudiarán aquí los flujos a través de medios porosos.

En este caso, considerando que el flujo es inotacional, se

implica la existencia de un potencial del cual se pueda obtener el campo de velocidades del fluido. Recordando, "un potencial es una cantidad física medible en cada punto del sistema que fluye, cuyas propiedades son tales que el flujo siempre ocurre de las regiones en las que esa cantidad tiene valores más grandes, hacia aquellas regiones en las que los valores de esta son más pequeños, sin importar la dirección en el espacio". En flujos no rotacionales, principalmente dos factores pueden hacer que fluyan: la atracción de la gravedad y/o la presión ejercida sobre el fluido.

Es sencillo demostrar (Apéndice G.) que el potencial y estas magnitudes se relacionan en la llamada "Ecuación de Bernoulli":

$$\Phi = gz + \frac{1}{2} v^2 + \frac{1}{\rho} (p - p_0) \quad (3.4)$$

donde Φ representa el potencial del campo de velocidades, g la aceleración de la gravedad, v la velocidad euleriana del fluido y p la presión en este. Como en un medio poroso el fluido se desplaza muy lentamente, entonces $v \approx 0$, con esto (3.4) queda:

$$\Phi = gz + \frac{1}{\rho} (p - p_0) \quad (3.5)$$

lo que significa que en este caso el flujo se produce por atracción gravitacional y por diferencia de presiones, como se dijo anteriormente. El hecho de que $v \approx 0$ permite utilizar las ecuaciones de la hidrostática, en este caso la presión está dada por la expresión (ver fig. 4.2):

$$p = \rho g h + p_a = \rho g (h - z) + p_a, \quad p_a = \text{presión atmosférica.} \quad (3.6)$$

substituyendo en la ecuación anterior y haciendo $p_a = p_0$, se llega a que

$$\boxed{\Phi = gh} \quad (3.7)$$

Esta igualdad indica que el potencial en cualquier punto es proporcional a la carga hidráulica, conocer una es conocer a la otra. Por lo tanto en este caso, la carga hidráulica h es por sí misma un potencial y según la definición es una cantidad física medible, y el flujo ocurrirá de los lugares donde es mayor hacia los lugares donde es menor.

En la deducción de la Ley de Darcy se introdujo una constante de proporcionalidad, K . Experimentalmente puede verificarse que conservando constante el gradiente hidráulico $\Delta h/\Delta x$ y variando el medio poroso y/o el fluido que viaja a través de él, el valor de la K varía. El valor de esta constante y su dependencia de los parámetros que caracterizan al medio y al fluido solo se pueden determinar experimentalmente. ¿Cómo es esta dependencia? En un medio poroso ideal (p. ej. bolitas de diámetro d) se encuentra que para diferentes fluidos:

$$v \sim d^2 \quad (d = \text{diámetro de las "partículas" del medio poroso}).$$

$$v \sim \rho g \quad (\rho = \text{densidad del fluido, } g = \text{aceleración de la gravedad}).$$

$$v \sim 1/\mu \quad (\mu = \text{viscosidad dinámica del fluido}).$$

Introduciendo otra constante de proporcionalidad, $-c$, se puede dar otra versión de la Ley de Darcy:

$$v = -c \frac{\rho g}{\mu} \frac{dh}{dx} \quad (3.8)$$

Esta nueva constante c deberá incluir propiedades del medio no consideradas. En un medio poroso "más real" estas son: distribución del tamaño de los granos, esféricidad del grano, como se encuentran agrupados, etc. Comparando (3.2) y (3.8):

$$K = cd^2\rho g/\mu$$

Agrupando las propiedades exclusivas del medio poroso en una sola constante: $k = cd^2$, se tendrá que:

$$K = k \rho g / \mu$$

guardando la Ley de Darcy:

$$v = -k \rho g / \mu \frac{dh}{dl} \quad (3.9)$$

La constante k se conoce como Permeabilidad Intrínseca o Permeabilidad Específica, pero comúnmente se conoce solo como permeabilidad del medio. No es difícil comprobar que $[k] = l^2$. Dado que el valor de k es relativamente pequeño para ser expresado en m^2 o cm^2 , se define una nueva unidad: el darcy, cuyo valor es:

$$1 \text{ darcy} = 9.87 \times 10^{-9} \text{ cm}^2$$

Físicamente, 1 darcy es la permeabilidad que se tiene a una descarga específica de 1 cm^3/seg de un fluido con una viscosidad relativa de 1 cp.^(*) bajo un gradiente hidráulico que hace al término $\rho g \frac{dh}{dl} = 1 \text{ atm./cm}$.

Todo lo anterior es válido para medios porosos homogéneos e isotrópicos, esto es, para aquellos medios cuyas propiedades son las mismas en todo punto y toda dirección. Pero en general, los problemas reales involucran medios porosos no homogéneos (heterogéneos) y no isotrópicos (anisotrópicos). No obstante, es posible utilizar la Ley de Darcy en estos casos reflejando estas características en la parte correspondiente al medio, esto es, en la conductividad hidráulica K . ¿En que forma?... simplemente suponiendo que el valor de esta depende del punto ($K = K[x, y, z]$) y/o de la dirección ($K = K[\alpha, \beta, \gamma]$ con α, β, γ los cosenos directores que dan la dirección que se sigue en el medio y que contiene al punto (x, y, z)).

Pero, ¿Que clase de matemático es la conductividad hidráulica K ?

^(*) Poise = unidad de viscosidad, $[p] = \frac{masa}{longitud \cdot tiempo}$. 1 cp. = 1p/100.

No es difícil aceptar que en el caso unidimensional, la conductividad hidráulica es -en el caso más complejo-, una función del punto, lo que en la Ley de Darcy se expresa en la forma:

$$v = -K(x) \frac{dh}{dx}$$

Considérese ahora un medio heterogéneo y anisotrópico tridimensional. La Ley de Darcy en una cierta dirección \hat{r} dada en función de sus cosenos directores: $\hat{r} = (\cos \alpha, \cos \beta, \cos \delta)$, se puede expresar en la forma:

$$\begin{aligned} \vec{v}_r &= -K_r \frac{dh}{dr} \hat{r} = -K_r (\nabla h \cdot \hat{r}) \hat{r} \\ &= -K_r \left(\cos \alpha \frac{\partial h}{\partial x} + \cos \beta \frac{\partial h}{\partial y} + \cos \delta \frac{\partial h}{\partial z} \right) \hat{r} \end{aligned}$$

Las componentes del vector velocidad serán

$$v_x = -K_r \left(\cos \alpha \frac{\partial h}{\partial x} + \cos \beta \frac{\partial h}{\partial y} + \cos \delta \frac{\partial h}{\partial z} \right) \cos \alpha$$

$$v_y = -K_r \left(\cos \alpha \frac{\partial h}{\partial x} + \cos \beta \frac{\partial h}{\partial y} + \cos \delta \frac{\partial h}{\partial z} \right) \cos \beta$$

$$v_z = -K_r \left(\cos \alpha \frac{\partial h}{\partial x} + \cos \beta \frac{\partial h}{\partial y} + \cos \delta \frac{\partial h}{\partial z} \right) \cos \delta$$

Denotando $K_x = K_r \cos \alpha$, $K_y = K_r \cos \beta$, $K_z = K_r \cos \delta$, y

$$K_{xx} = K_x \cos \alpha$$

$$K_{yx} = K_y \cos \alpha$$

$$K_{zx} = K_z \cos \alpha$$

$$K_{xy} = K_x \cos \beta$$

$$K_{yy} = K_y \cos \beta$$

$$K_{zy} = K_z \cos \beta$$

$$K_{xz} = K_x \cos \delta$$

$$K_{yz} = K_y \cos \delta$$

$$K_{zz} = K_z \cos \delta$$

(Nótese que $K_{xy} = K_{yx}$, $K_{xz} = K_{zx}$, $K_{yz} = K_{zy}$). Con esta notación y escribiendo todo como un producto de matrices:

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial h / \partial x \\ \partial h / \partial y \\ \partial h / \partial z \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

ó en forma compacta:

$$\vec{v}_r = - [K_r] \cdot \nabla h$$

Aquí, las K 's son funciones del punto. En la práctica, el conjunto de funciones $K_{i,j}$ resultan ser las componentes de un tensor de rango dos, simétrico; $[K_r]$ se denomina entonces "Tensor de Conductividad Hidráulica". Por propiedades de las matrices reales y simétricas, existe un sistema coordinado ortogonal en el cual la matriz $[K_r]$ es diagonal; en este sistema coordinado la Ley de Darcy tendrá la forma simple

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \partial h / \partial x \\ \partial h / \partial y \\ \partial h / \partial z \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Es un resultado importante el que exista un sistema coordinado en el cual el tensor de conductividad hidráulica es "diagonal", ya que basta con especificar tres componentes para describir las propiedades del medio. Así, un medio homogéneo e isotrópico se expresa tomando $K_{xx} = K_{yy} = K_{zz} = \text{cte}$, en tanto que un medio homogéneo y anisotrópico se expresa tomando $K_{xx} = C_1$, $K_{yy} = C_2$, $K_{zz} = C_3$ y $C_1 \neq C_2 \neq C_3$. Las direcciones en que se especifican estas componentes se denominan "Direcciones Principales de Anisotropía".

Tomando la Ley de Darcy en una cierta dirección \hat{r} , es inmediato que

$$v_r = -K_r \frac{\partial h}{\partial r} \implies \frac{\partial h}{\partial r} = -v_r / K_r$$

y proyectando sobre los ejes principales de anisotropía se tendrá que

$$\begin{aligned} v_x &= v_r \cos \alpha \\ v_y &= v_r \cos \beta \\ v_z &= v_r \cos \gamma \end{aligned}$$

Substituyendo en (3.11) se encuentra que:

$$\begin{aligned} \partial h / \partial x &= -v_r \cos \alpha / K_{xx} \\ \partial h / \partial y &= -v_r \cos \beta / K_{yy} \\ \partial h / \partial z &= -v_r \cos \gamma / K_{zz} \end{aligned}$$

Utilizando la expresión de la derivada direccional

$$\partial h / \partial r = \cos \alpha \partial h / \partial x + \cos \beta \partial h / \partial y + \cos \gamma \partial h / \partial z$$

se encuentran fácilmente que

$$1/K_r = \cos^2 \alpha / K_{xx} + \cos^2 \beta / K_{yy} + \cos^2 \gamma / K_{zz}$$

Si $\cos \alpha = x/r$, $\cos \beta = y/r$, $\cos \gamma = z/r$, se llega finalmente a la ecuación

$$x^2/K_{xx} + y^2/K_{yy} + z^2/K_{zz} = r^2/K_r \quad (3.12)$$

Esta es la ecuación de un elipsoide y en general sus semiejes son diferentes entre sí, $\sqrt{K_{xx}} \neq \sqrt{K_{yy}} \neq \sqrt{K_{zz}}$ (expresión equivalente de anisotropía del medio), por lo tanto hay un semieje mayor y uno menor. Físicamente esto significa que existe una dirección en que la anisotropía es máxima y otra en la que es mínima y que son perpendiculares. La ecuación (3.12) se conoce como "Elipsoide de Conductividad Hidráulica".

Ahora bien, si un medio poroso ocupa un cierto volumen no todo lo ocupa el material sólido; existen "huecos" por donde puede pasar el fluido. Se define entonces la "Porosidad" del medio como la razón entre el volumen de los huecos intergranulares (V_v) y el volumen total de la muestra (V_t), esto es:

$$E = V_v / V_t \quad (3.13)$$

Porosidad y permeabilidad están relacionadas; experimentalmente se puede determinar esta dependencia. En la mayoría de

los casos esta relación es una proporción directa, pero existen excepciones.

Para deducir las ecuaciones de movimiento se tienen que aplicar las ecuaciones (2.2). En éstas, está contenida v ó velocidad de las partículas, pero aquí no se trabaja con la velocidad de las partículas, la Ley de Darcy involucra una velocidad promedio para el desplazamiento de toda partícula del fluido, muy diferente a la velocidad real de cada una de ellas. La velocidad real de cada una de las partículas es - como se dijo anteriormente -, imposible de determinar, pero, se puede definir una "velocidad real promedio" en una sección transversal al flujo, como la razón entre lo que fluye por los poros y el "área" de la sección transversal de éstos:

$$\bar{v}_1 = Q/A_1 \quad (3.14)$$

donde Q vuelve a ser la descarga específica. Así como se definió una porosidad volumétrica, se puede definir una porosidad "a-real" como

$$\epsilon_A = A_v/A \quad (3.15)$$

con A_v área de la sección transversal de los huecos y A el área total de la sección transversal. Con esta definición:

$$v_1 = Q/\epsilon_A$$

Teniendo N secciones transversales más, se puede proceder de la misma forma. El promedio de todas estas velocidades será:

$$\bar{v} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q/\epsilon_{A_i}$$

Como la descarga específica se mantiene constante, entonces por (3.1)

$$\bar{v} = v \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\epsilon_{A_i}}$$

Si N es suficientemente grande ($N \rightarrow \infty$) se obtiene la porosidad volumétrica:

$$1/\epsilon = \lim_{N \rightarrow \infty} 1/N \sum_{i=1}^N 1/\epsilon_{A_i}$$

entonces en general

$$\hat{v} = \bar{v}/\epsilon \quad (3.17)$$

donde \bar{v} es el valor medio de las velocidades reales promedio y \hat{v} la velocidad de Darcy.

Al tomar las ecuaciones (3.2), se está reemplazando al medio poroso por un medio continuo equivalente. Se adopta como densidad en esta representación macroscópica a

$$\rho' = \rho \epsilon \quad (3.18)$$

donde ρ es la densidad del fluido, y como velocidad \bar{v} de las partículas que lo forman a \hat{v} . Esto es conveniente ya que al tomar como propiedad intensiva $\Psi = \rho \epsilon$, se puede incorporar fácilmente en las ecuaciones (2.2) a la velocidad de Darcy, representación macroscópica de las velocidades reales microscópicas de las partículas del fluido, equivalente a un promedio de estas.

Así $\Psi = \rho \epsilon$ y substituyendo en (2.2) se encuentra que:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \nabla \cdot (\rho \hat{v}) - \nabla \cdot \underline{\tau} - q = 0$$

$$[\rho \epsilon (\hat{v} - \underline{u}_x) - \underline{\tau}] \cdot \underline{n} = 0$$

Suponiendo que no se tienen discontinuidades en la velocidad del fluido en el medio poroso ($\hat{v} = \underline{u}_x$), que no entra o sale masa de este ($\underline{z} = 0$) y que no hay fuentes ni sumideros dentro de él ($q = 0$) se trabaja entonces únicamente con la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} (P\epsilon) + \nabla \cdot (P\vec{v}) = 0 \quad (3.19)$$

A nivel microscópico (Bear 1972), la porosidad depende de la forma en que están agrupados los gránulos, su forma, la distribución en cuanto a tamaños, etc.. Estas características pueden variar por diferentes causas; una podría ser una compresión de todo el medio, otra podría ser un cambio en la velocidad del fluido. También se puede variar la densidad del fluido, por ejemplo destruyendo alguna sustancia en él o también, por compresión del medio poroso. Todos estos estímulos producen un cambio en la presión del fluido, cambio que se puede medir aunque sea mínimo.

Suponiendo que P y ϵ son funciones de la presión y aplicando la regla de la cadena:

$$\frac{\partial}{\partial t} (P\epsilon) = P \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \epsilon \frac{\partial P}{\partial t} = P \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial p} + \epsilon \frac{\partial P}{\partial p} \right) \frac{\partial p}{\partial t}$$

Definiendo $\alpha = \frac{\partial \epsilon}{\partial p}$, $\beta = \frac{1}{P} \frac{\partial P}{\partial p}$, donde físicamente α representa la compresibilidad del medio poroso y β la compresibilidad del fluido, con esto

$$\frac{\partial}{\partial t} (P\epsilon) = P(\alpha + \epsilon\beta) \frac{\partial p}{\partial t}$$

La magnitud $S_s = P(\alpha + \epsilon\beta)$ se conoce como "almacenamiento específico". Si el fluido es homogéneo y como $v \neq 0$, entonces se puede aplicar la relación hidrostática (3.5) para determinar el valor de la carga hidráulica con un cambio adecuado de nivel de referencia, así

$$p = \rho g h$$

Si en esta relación se considera que P no varía en el tiempo, es inmediato que

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \rho g \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3.20)$$

Substituyendo (3.10) y (3.20) en (3.19) se encuentra que

$$S_s \rho \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho [K] \cdot \nabla h) = 0 \quad (3.21)$$

Si la densidad no es función del punto

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot ([K] \cdot \nabla h) = 0 \quad (3.22)$$

y para un medio homogéneo e isotrópico

$$S_s / K \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla^2 h = 0 \quad (3.23)$$

Estas son las ecuaciones de movimiento para flujos en medios porosos cuando se considera que lo único que se desplaza es el fluido. La solución de estas ecuaciones de difusión dará el valor de la carga hidráulica ó potencial de flujo -según (3.6)-, en función de la posición y del tiempo. Con esto y utilizando la Ley de Darcy se puede determinar el movimiento promedio del fluido.

Pero, ¿Qué sucede cuando en el fluido se disuelve alguna substancia?. ¿Como se propaga este soluto a través del medio poroso?.

Cuando se introduce un soluto en un fluido que se mueve en un medio poroso, la experiencia muestra que este se difunde o dispersa a medida que transcurre el tiempo. En un fluido en movimiento las partículas del soluto son arrastradas por el fluido a través del medio poroso; este fenómeno se conoce como "Estrucción".

Por lo las partículas del soluto también se difunden en toda dirección debido al movimiento de tipo aleatorio que experimentan (movimiento browniano), a fuerzas externas que actúan sobre el fluido, a variaciones en las propiedades del líquido tales como densidad y viscosidad y a la "mezcla mecánica" de las partículas del soluto debida al movimiento del fluido, entre otras causas. Este fenómeno

se conoce como "Difusión Hidrodinámica" y es un resultado macroscópico (observable y medible) de estos movimientos microscópicos individuales de las partículas.

Para facilitar el estudio cuantitativo de estos procesos se define la concentración del soluto como

$$\text{(concentración del soluto)} \quad c = \text{masa del soluto} / \text{volumen de la solución}$$

Al introducir un soluto en un líquido, la experiencia muestra que las partículas del soluto se difunden hacia las regiones en las que su concentración es más baja, y esta difusión es mayor cuando esta diferencia es más grande y viceversa. En otras palabras, la corriente de difusión en una dirección \hat{r} , i.e. la masa de soluto por unidad de tiempo y por unidad de área que atraviesa una superficie perpendicular a esta corriente, es proporcional a su derivada en esa dirección, esto es:

$$\begin{aligned} J_{\hat{r}} &= -(D_{\hat{r}} \frac{\partial c}{\partial r}) \hat{r} & (3.24) \\ &= -(D_{\hat{r}} (\nabla c) \cdot \hat{r}) \hat{r} \end{aligned}$$

donde $D_{\hat{r}}$ es un coeficiente que depende de las propiedades del soluto y del fluido, y con el signo (-) se indica que la corriente fluye hacia el lado del decrecimiento de la concentración. La ecuación (3.24) se conoce como "Ley de Fick" y es de hecho una primera aproximación para este proceso, cuando la velocidad de difusión es lo suficientemente pequeña como para pasar por alto potencias del gradiente de concentración (Landau - Lifschitz 1970.).

Al igual que la Ley de Darcy, tomando $\hat{r} = (\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma)$ se puede expresar la Ley de Fick como el producto de una matriz simétrica por el vector gradiente de la concentración, esto es:

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial c / \partial x \\ \partial c / \partial y \\ \partial c / \partial z \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

ó bien

$$J_{\vec{r}} = - [D] \cdot \nabla c$$

Por propiedades de las matrices reales y simétricas, existe un sistema ortogonal en el cual la matriz es diagonal, es decir (cambian-
do de la notación):

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial c / \partial x \\ \partial c / \partial y \\ \partial c / \partial z \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

En este caso - al igual que para la Ley de Darcy -, es su-
ficiente especificar los valores de los coeficientes de dispersión a lo lar-
go de estas direcciones. Esta forma empírica para cuantificar la
dispersión hidrodinámica lleva a un resultado interesante, que se
obtuvo antes para la Ley de Darcy, la existencia de un elipsoide de
dispersividad hidrodinámica, lo que físicamente significa la existen-
cia de una dirección en la que la dispersividad es máxima y otra
en la que es mínima y que son ortogonales entre sí.

Las ecuaciones de movimiento para un soluto se obtienen
nuevamente a partir de las ecuaciones (2.2), tomando como pro-
piedad intensiva a la concentración del soluto:

$$\psi = c$$

y como flujo de la propiedad intensiva a través de la frontera
al negativo de la Ley de Fick, (en la deducción de (2.2) se tomó
a $\vec{\xi}$ "apuntando" hacia afuera de la región, para converger aquí es-
ta convención y que $\vec{\xi}$ represente a la difusión del soluto hacia aden-
tro de la región, se toma el negativo de la Ley de Fick):

$$\bar{c} = [D] \cdot \nabla c$$

Substituyendo en (2.2) y considerando que no existen discontinuidades en la región de flujo, se tendrá la ecuación

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{v}) - \nabla \cdot ([D] \nabla c) + g = 0 \quad (3.27)$$

cuya solución dará la concentración del soluto como una función de la posición y del tiempo, lo que permite conocer su movimiento. En este caso \mathbf{v} es la velocidad con que arrastra el fluido a las partículas del soluto y que se supone es igual al valor medio de las velocidades reales promedio, que se obtiene de la velocidad de Darcy \bar{v} utilizando (3.17).

En un medio homogéneo e isotrópico ($[D]$ es un escalar por la matriz identidad), con flujo homogéneo ($\mathbf{v} = \text{cte.}$) y con un soluto no reactivo ($g = 0$ i.e. que no se "crea" o "destruye" soluto por reacciones químicas, en otras palabras, no hay fuentes ni sumideros), la ecuación (3.27) toma la forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c - D \nabla^2 c = 0 \quad (3.28)$$

y por simplicidad, en lugar de estudiar el proceso en una dirección arbitraria, efectuando una rotación adecuada del sistema coordenado de tal forma que la dirección en que se realiza el proceso sea paralela a uno de los ejes, entonces la ecuación (3.28) se reduce a la forma unidimensional

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (3.29)$$

Mediante el cambio de variables

$$\begin{cases} x' = x/l \\ t' = vt/l \end{cases}$$

se puede introducir una magnitud que relaciona a la velocidad de advección v y al coeficiente de dispersión D . Esta magnitud se conoce como número de Péclet y se define como

$$P_e = vL/D \quad (3.30)$$

donde L representa el diámetro promedio de las partículas del medio poroso. Con esto (3.29) queda:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{1}{P_e} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0 \quad (3.31)$$

Cuando P_e es pequeño significa entonces que el transporte del soluto se debe principalmente al proceso de difusión, esto sucede cuando la velocidad promedio con que se desplaza el fluido es muy pequeña o bien, cuando comparativamente con v el coeficiente de dispersión D es muy grande.

Si P_e es grande esto significa que el transporte del soluto se debe principalmente al proceso de advección, esto sucede cuando la velocidad promedio con que se desplaza el fluido a través del medio poroso es muy grande respecto al coeficiente de dispersión.

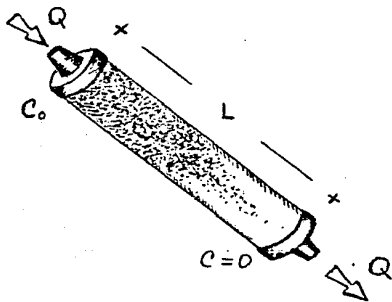


fig. 3.5

Mediante experimentos sencillos se puede ver el significado físico de la ecuación (3.31) y el comportamiento de su solución (Cheng 1979). Tómese el dispositivo que se muestra en la fig.3.5 con un flujo constante en un medio poroso saturado homogéneo e iso-

tropico. En él, por un extremo se introduce uniformemente un soluto a una concentración fija C_0 y por el otro extremo se permite su salida; inicialmente la concentración dentro del dispositivo es igual a cero.

Observación. Todo lo anterior junto con las ecuaciones (2.2) y los balances de masa, momentum y energía, fueron obtenidos para el caso general en que el cuerpo se mueve y se deforma a medida que transcurre el tiempo. ¿Cómo se aplicarían estas ecuaciones para seguir el comportamiento de alguna propiedad intensiva (p.ej. la concentración) en un cuerpo que ocupa la misma región a medida que transcurre el tiempo?

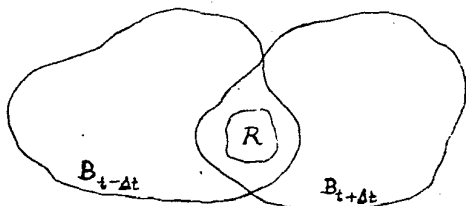


fig. 3.6

Se puede visualizar la región en cuestión como un volumen de control R (Gurtin 1981) fijo en el espacio dentro de un cuerpo $B(t)$ que si se mueve y deforma a medida que transcurre el tiempo, que lo contiene el tiempo suficiente como para que

se desarrolle el proceso completo (fig. 3.6) y para el cual si es válido todo lo obtenido anteriormente. En consecuencia siendo que en todo punto interior de este cuerpo $B(t)$ es válido todo lo anterior, lo será también para el volumen de control R , quedando solo por especificar el comportamiento sobre la frontera del volumen R , lo que se hace por medio de las condiciones de frontera del problema.

Se observará que a medida que transcurre el tiempo, el soluto se propaga dentro del dispositivo arrastrado por el fluido y por la diferencia de concentraciones. Se puede representar gráficamente el estado inicial ($t=0$) de la concentración relativa (%)

dentro del tubo mediante una función escalón (fig. 3.7).

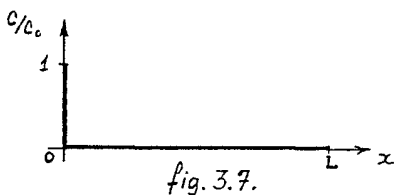


fig. 3.7.

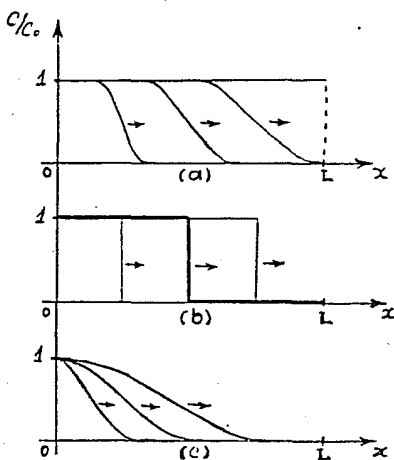


fig. 3.8.

A medida que transcurre el tiempo, el soluto va avanzando y la concentración aumenta (fig. 3.8a.) hasta saturar completamente el dispositivo. Se puede apreciar que al transcurrir el tiempo e irse saturando el medio, el frente de concentración se va espaciando a medida que avanza.

Esto se debe al proceso de difusión que hace que algunas partículas avancen con una velocidad mayor ó menor que la velocidad real promedio v . Si la difusión no existiera (caso ideal), la concentración del soluto en el dispositivo se comportaría como una función escalón que avanza con la velocidad v a medida que transcurre el tiempo (fig. 3.8b.).

En el caso contrario, si la advección no existiera, la concentración del soluto se comportaría como un frente que se espesa ó abre (fig. 3.8c.).

Entonces cuando el número de Péclet es grande (domina la advección) el frente de concentración es semejante a la función escalón (fig. 3.9a.), pero cuando el número Pe es pequeño (domina la difusión), entonces el frente avanza espaciándose (fig. 3.9b.).

En este trabajo se modela matemáticamente al problema con condiciones de frontera

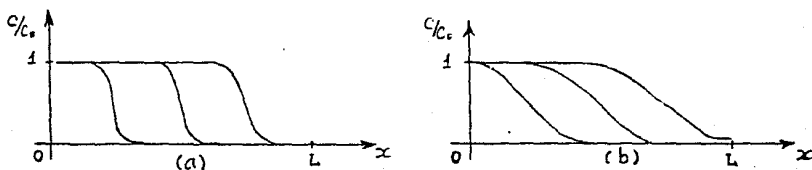


fig. 3.9

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0$$

$$c(x, 0) = 0$$

$$c(0, t) = 1$$

$$c(1, t) = 1$$

(c = concentración relativa).

que representa el caso en que el dispositivo de la fig. 3.5 tiene la misma concentración en ambos extremos; y el problema

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0$$

$$c(x, 0) = 0$$

$$c(0, t) = 1$$

$$\frac{\partial c}{\partial x}(1, t) = 1$$

(c = concentración relativa).

que representa al caso expuesto.

• La Aproximación Unificada.

La Aproximación Unificada es un esquema desarrollado recientemente (Hessen 1984, Herrera 1985 I-III) que además de incluir dentro de su formulación abstracta a los métodos de Diferencias Finitas, Elemento Finito y métodos de Frontera, puede dar por sí mismo esquemas numéricos difíciles. Este esquema es aplicable a cualquier tipo de operador lineal, simétrico o no simétrico y tanto a problemas estacionarios como a problemas transitorios. La versatilidad y generalidad de este esquema se apoya en la posibilidad de obtener en forma sistemática una fórmula de Green generalizada a campos discontinuos para cada problema. Es a partir de esta fórmula que se pueden obtener los esquemas numéricos incluso para aquellos problemas en los que la solución de la ecuación diferencial presenta discontinuidades a lo largo de alguna interfaz.

Con el propósito de lograr esta generalización se evita —hasta donde es posible— la utilización del Cálculo de Variaciones y del Análisis Funcional y se caracterizan abstractamente (algebraicamente) relaciones entre los miembros de una fórmula de Green simple.

En este capítulo se exponen las ideas fundamentales de esta metodología con ejemplos para su mejor comprensión; se evita el hacer demostraciones ya que se pueden encontrar en las referencias. En la primera sección se da la metodología para obtener fórmulas de Green para dominios continuos y en la segunda sección está la metodología para obtener estas fórmulas en dominios discontinuos.

1. Fórmulas de Green para dominios continuos.

Es conocida por sus muchas aplicaciones en Física la fórmula de Green para el operador de Laplace:

$$\int_{\Omega} (\nabla v \nabla u - u \nabla^2 v) dV = \int_{\partial \Omega} (\nabla v \cdot \underline{n} - u \nabla v) \cdot \underline{n} ds \quad (1.1)$$

donde $\partial \Omega$ es la superficie que delimita al volumen "continuo" Ω (fig. 1.1)

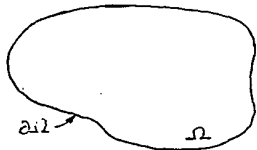


fig. 1.1

y las funciones $u, v \in C^2$. Surgen entonces dos preguntas: ¿Se puede extender la fórmula anterior para operadores diferenciales lineales L arbitrarios? ¿Se puede extender esta fórmula de Green al caso en que se tenga una partición del dominio Ω ? En esta sección se contesta la primera pregunta, la segunda en la siguiente sección.

Hay que recordar que la fórmula de Green (1.1) es un ejemplo clásico de la integración por partes de una integral múltiple. Teniendo en cuenta esto se puede intentar generalizar (1.1). Si en vez del operador ∇^2 se tiene otro operador lineal L , se puede definir un cierto operador P tal que se asemeje a la expresión

$$\int_{\Omega} \nabla v \nabla u dV$$

es claro entonces que este operador se puede definir en la forma

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} \nabla v \nabla u dV \quad (1.2)$$

donde v es un elemento de un espacio apropiado de funciones. Integrando ahora por partes hasta que el operador L deje de "actuar" sobre u , se tendrá una expresión de la forma:

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} \sigma Lu dV = R[u, v] + \int_{\Omega} L^* v dV$$

donde R es una "funcional bilineal" y L^* es el operador lineal adjunto de L . Denotando a la integral del lado derecho mediante un operador Q^* :

$$\langle Q^*u, v \rangle = \int_{\Omega} u L^* v \, dV \quad (1.3)$$

se tendrá la expresión

$$\begin{aligned} \langle Pu, v \rangle - \langle Q^*u, v \rangle &= \int_{\Omega} \{v Lu - u L^* v\} dV \\ &= R[u, v] \end{aligned}$$

que se asemejará a la fórmula de Green (1.1) si la funcional bilineal R contiene exclusivamente "terminos de frontera", es decir, integrales sobre la frontera de Ω de productos de u, v y sus derivadas normales de orden menor que el orden del operador de L . En el caso de un problema con valores en la frontera

$$\begin{aligned} Lu &= f & \text{en } \Omega \\ \delta u &= g & \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1.4)$$

agrupando los terminos de $R[u, v]$ que contienen a los valores de frontera prescritos δu , agrupando los terminos de $R[u, v]$ que contienen a los valores de frontera complementarios $\delta^* u$ en tal forma que

$$R[u, v] = R_1[\delta u, v] + R_2[\delta^* u, v] \quad (1.5)$$

y denotando a estas dos nuevas funcionales mediante operadores de "frontera" B y C^* tales que

$$\begin{aligned} \langle Bu, v \rangle &= R_1[\delta u, v] \\ \langle C^*u, v \rangle &= R_2[\delta^* u, v] \end{aligned} \quad (1.6)$$

entonces la relación

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Q^*u, v \rangle = \langle Bu, v \rangle - \langle C^*u, v \rangle \quad (1.7)$$

será una fórmula de Green para el operador L sobre el dominio Ω si se cumplen ciertas relaciones entre subespacios del dominio de estos operadores^(*) (GIERA 1984, GIERA 1985 I). A continuación se formalizan los conceptos antes expuestos.

- Notación y nociones preliminares.

Sean \mathcal{F} el campo de los números reales o complejos, D un espacio lineal de funciones escalares sobre el campo \mathcal{F} y D^* el espacio dual de D i.e. el espacio de las funcionales lineales de $D \rightarrow \mathcal{F}$.

Dada $v \in D$, el valor de la funcional $\alpha \in D^*$ aplicado a v ($\alpha(v)$), será un elemento del campo \mathcal{F} , esto se denota en la forma

$$\alpha(v) = \langle \alpha, v \rangle \in \mathcal{F} \quad (1.8)$$

Con P se denotará a un operador $P: D \rightarrow D^*$ tal que a cada función escalar $u \in D$ le asocia una funcional lineal $Pu \in D^*$, funcional que puede aplicarse a su vez a otra función escalar $v \in D$ y asociarle un elemento del campo \mathcal{F} , esto se denota en la forma

$$\langle Pu, v \rangle = \langle P, u, v \rangle \in \mathcal{F} \quad (1.9)$$

Esta es la clase de operadores con que trabaja la Aproximación Unificada. Por la forma en que se definen, existe una biyección entre este tipo de operadores y las funcionales bilineales

$$\beta: D \otimes D \rightarrow \mathcal{F}$$

donde $D \otimes D$ es el espacio de los pares $\{u, v\}$ tales que $u \in D$ y $v \in D$; es decir:

^(*) Si la explicación anterior no fue clara, ver el Apéndice \mathcal{H} en donde se trabaja un problema sencillo con todo detalle.

$$\beta(u, v) = \langle Pu, v \rangle \quad (1.10)$$

lo que significa que se puede definir el operador P dando la correspondiente funcional bilineal β . A través de esta biyección se puede asociar un operador $P^*: D \rightarrow D^*$ a la funcional bilineal transpuesta y que estará relacionado con el operador P en la forma

$$\langle P^*u, v \rangle = \beta^*(u, v) = \beta(v, u) = \langle Pv, u \rangle \quad (1.11)$$

donde β^* es el transpuesto de β y P^* se denomina el transpuesto de P .

Finalmente, dado $P: D \rightarrow D^*$, $N_p \subset D$ denota al subespacio tal que a sus elementos el operador P les asocia la funcional nula; es decir:

$$N_p = \{u \in D \mid Pu = 0\}$$

• Conceptos Básicos.

Como se apuntó anteriormente, la validez de una relación entre operadores como fórmula de Green, descansa en las cualidades de ciertos subespacios contenidos en el dominio de estos operadores. A continuación se dan una serie de definiciones y teoremas que proporcionarán el fundamento necesario para poder construir fórmulas de Green asociadas a problemas con valores en la frontera.

Definición 1.1. Se dice que los operadores $P: D \rightarrow D^*$ y $Q: D \rightarrow D^*$ pueden "variarse independientemente" si para cada $U \in D$ y $V \in D$ existe $u \in D$ tal que

$$Pu = PV \quad \text{y} \quad Qu = QV$$

□

Esta es una analogía con problemas de valores en la frontera; en estos se busca u tal que simultáneamente se satisfagan la ecuación diferencial con condiciones en la frontera (1.4). En esta definición

- Traducido al lenguaje operadores -, se pide que P y Q , asociados a (1.4) sean tales que cada uno haya correspondido a la función u la misma funcional que asocian a dos funciones diferentes U, V por esta-blecidas, respectivamente. Esta condición es entonces equivalente a la existencia de la solución del problema (1.4).

Esta definición se puede expresar en otras formas equivalentes, de las cuales algunas serán muy útiles posteriormente; estas alternativas se enumeran en el siguiente Teorema (Hewner 1984, Hewner 1985 I):

Teorema 1.1. Sean $P: D \rightarrow D^*$, $Q: D \rightarrow D^*$ operadores. Entonces las si-guientes proposiciones son equivalentes:

(i). P y Q pueden ser variados independientemente.

(ii). Para cada $V \in D$, existe $u \in D$ tal que $Pu = PV$ y $Qu = 0$.

(iii). Para cada $V \in D$ existe $u \in D$ tal que $Pu = 0$ y $Qu = QV$.

(iv). $D = N_P + N_Q$ (i.e. $\forall u \in D \exists n_1 \in N_P$ y $n_2 \in N_Q$ $\forall u = n_1 + n_2$).

(v). Para cada $u \in D$ existe $u_1 \in D$ y $u_2 \in D$ tales que
 $u = u_1 + u_2$ y $Pu = Pu_1$, $Qu = Qu_2$.

□

Este teorema relaciona la condición entre operadores para que exista la solución del problema (i), con las propiedades de los nullos de estos, (iv); la equivalencia entre estas condiciones asegura el cumplimiento de todas si se demuestra que se cumple alguna de ellas. Por ejemplo, se tiene el problema

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= f & \text{en } \Omega \\ u &= g & \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1.12)$$

al que se asocian los operadores

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV \quad \langle Qu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} \, ds \quad (1.13)$$

Se sabe en Ecuaciones Diferenciales Parciales que existe solución única al problema con valores en la frontera (1.12), entonces - dado que las definiciones (1.13) son válidas $\forall v \in D$, se puede ver que haciendo

$$\langle Pu, v \rangle = \langle f, v \rangle \quad \langle Bv, v \rangle = \langle g, v \rangle$$

entonces existirá $u \in D$ tal que

$$\langle Pu, v \rangle = \langle Pu, v \rangle \quad \text{y} \quad \langle Bu, v \rangle = \langle Bv, v \rangle$$

de donde $Pu = PV$ y $Bu = BV$, por lo tanto los operadores P y B definidos en (1.13) pueden ser variadas independientemente y en consecuencia por el teorema 1.1 : $D = N_P + N_B$.

También es posible proceder en la forma inversa, i.e. demostrar que $D = N_P + N_B$ y concluir por el teorema 1.1 que los operadores P y B varían independientemente.

Se tiene nuevamente el problema (1.12). En Ecuaciones Diferenciales Parciales es posible expresar a la solución u de la ecuación de Poisson como la suma de la solución general de la ecuación de Laplace mas una solución particular de la ecuación de Poisson; esta solución particular se puede escoger tal que satisfaga condiciones de frontera homogéneas, de tal forma que las condiciones de frontera del problema se impongan a la solución general de la ecuación homogénea. Esto se expresa en la forma

$$u = u_1 + u_2$$

con $\nabla^2 u_1 = 0$ en Ω y $u_2 = 0$ en $\partial\Omega$. Definiendo a los operadores P y B asociados a (1.12) en la forma (1.13), los nulos de estos operadores serán:

$$N_P = \{u \in D \mid \nabla^2 u = 0 \text{ en } \Omega\}$$

$$N_B = \{u \in D \mid u = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

y es inmediato que $u_1 \in N_P$ y $u_2 \in N_B$

$$\therefore D = N_P + N_B$$

y en consecuencia P y B pueden ser variadas independientemente.

Como se puede ver, el Teorema 1.1 da los primeros pasos en lo que se denomina la "caracterización abstracta a través de subespacios de una fórmula de Green". Dado que los operadores en una fórmula de Green se suman (ver 1.7) es importante ver las propiedades de sus núcleos en este caso. Para esto es necesaria la siguiente

Definición 1.2. Sean $R: D \rightarrow D^*$, $R_1: D \rightarrow D^*$, $R_2: D \rightarrow D^*$ operadores. Se dice que R_1 y R_2 descomponen a R cuando se cumple que:

(i). $R = R_1 + R_2$

(ii). R_1 y R_2 pueden ser variadas independientemente

(iii). R_1^* y R_2^* pueden ser variadas independientemente.

□

Es posible demostrar lo siguiente (Hessera 1984)

Proposición 1.1. Sean R_1 y R_2 operadores que descomponen a R . Entonces

$$N_R = N_{R_1} \cap N_{R_2}$$

$$N_{R^*} = N_{R_1^*} \cap N_{R_2^*}$$

□

La definición y proposición anteriores formalizan lo que se cumple en toda fórmula de Green. Por ejemplo, tómese la fórmula de Green (1.1):

$$\int_{\Omega} (v \nabla^2 u - u \nabla^2 v) dV = \int_{\partial\Omega} (u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n}) dS$$

Como se apuntó anteriormente, se puede expresar a (1.1) en la forma equivalente (1.7)

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Q^*u, v \rangle = \langle Bu, v \rangle - \langle C^*u, v \rangle$$

con P y B dados en la forma (1.13) y

$$\langle Q^*u, v \rangle = \int_{\Omega} u \nabla v \, dV \quad \langle C^*u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} v \frac{\partial u}{\partial n} \, ds \quad (1.14)$$

Es relativamente simple ver que esta fórmula de Green satisface las condiciones de la Definición 1.2. En otras palabras, es óbvio que B y C^* son tales que:

$$R = P - Q^* = B + (-C^*)$$

y es posible demostrar (Hewner 1984) que B y C^* , B^* y C varían independientemente. Por lo tanto los operadores B y C^* descomponen al operador R . También es muy simple comprobar que se cumple la Proposición 1.1, esto es que

$$N_R = \{u \in D \mid u = \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\} = N_B \cap N_{C^*}$$

$$N_{R^*} = \{v \in D \mid v = \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\} = N_{B^*} \cap N_C$$

Como puede verse, las fórmulas de Green son un caso especial de este tipo de descomposiciones. Una forma equivalente para la Proposición 1.1 es la siguiente. (Hewner 1985).

Proposición 1.2. Supóngase que R_1 y R_2 descomponen a R . Entonces

(i). $\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall u \in N_{R_1}$ y $v \in N_{R_2}$ ó $\forall u \in N_{R_2}$ y $v \in N_{R_1}^*$.

(ii). $N_{R_1} \supset N_R$ y $N_{R_2}^* \supset N_{R^*}$ ó $N_{R_2} \supset N_R$ y $N_{R_1}^* \supset N_{R^*}$.

(iii). $D = N_{R_1} + N_{R_2} = N_{R_1}^* + N_{R_2}^*$. □

Por lo visto hasta ahora, las propiedades de los núcleos de los operadores asociados a un problema con valores en la frontera, determinan si estos operadores son los "adecuados" para el problema.

Por lo tanto, la formulación abstracta de una fórmula de Green se puede hacer utilizando estos núcleos de los operadores, lo que además proporciona una gran generalidad y flexibilidad a esta en la práctica. Para lograr esta formulación abstracta, es necesario establecer ciertas propiedades entre subespacios de D relacionados con las descomposiciones introducidas en la Definición 1.2., de las cuales las fórmulas de Green son un caso especial.

Definición 1.3. Sean $I_1, I_2 \subset D$ dos subespacios lineales. Entonces

(i). $\{I_1, I_2\}$ es un par de subespacios conjugados para el operador R si

$$\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall u \in I_1, \text{ y } v \in I_2$$

(ii). $\{I_1, I_2\}$ es un par de subespacios conjugados regulares para el operador R si además

$$I_1 \supset N_R \quad \text{y} \quad I_2 \supset N_R^*$$

(iii). $\{I_1, I_2\}$ es un par de subespacios conjugados completamente regulares si además de (i) y (ii) se cumple que

$$\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall v \in I_2 \Rightarrow u \in I_1,$$

$$\text{y} \quad \langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall u \in I_1 \Rightarrow v \in I_2$$

□

Notando la similitud entre (i) y (ii) de la Definición 1.3. y la Proposición 1.2., es claro que $\{N_R, N_R^*\}$ y $\{N_R^*, N_R\}$ son ambos un par de subespacios conjugados regulares para el operador R .

Definición 1.4. Sean $\{I_{11}, I_{22}\}$ y $\{I_{12}, I_{21}\}$ dos pares de subespacios conjugados regulares para R . Entonces estos pares son una descomposición canónica del espacio D con respecto a R si

$$D = I_{11} + I_{12} = I_{21} + I_{22}$$

□

Nuevamente por (iii) de la Proposición 1.2, es fácil comprobar que si R_1 y R_2 descomponen a R entonces los pares $\{N_{R_1}, N_{R_2}^*\}$, $\{N_{R_2}^*, N_{R_1}\}$ son una descomposición canónica del espacio D con respecto a R . En este caso, por (iv) del Teorema 1.1, existen elementos $u_{ij} \in I_{ij}$, $i, j = 1, 2$, tales que

$$u = u_{11} + u_{12} = u_{21} + u_{22} \quad \forall u \in D.$$

Haciendo $I_{11} = N_{R_2}$, $I_{12} = N_{R_1}$, $I_{21} = N_{R_2}^*$, $I_{22} = N_{R_1}^*$ y utilizando la Definición 1.3, se puede demostrar fácilmente que

$$\langle R_1 u, v \rangle = \langle R u_{11}, v_{21} \rangle \quad \langle R_2 u, v \rangle = \langle R u_{12}, v_{22} \rangle \quad \forall u, v \in D.$$

Estas relaciones serán muy útiles como se verá en el siguiente

Teorema 1.2. Sean $\{I_{11}, I_{22}\}$ y $\{I_{12}, I_{21}\}$ una descomposición canónica de D respecto a R . Entonces existe un par único de operadores $R_1: D \rightarrow D^*$ y $R_2: D \rightarrow D^*$ que descomponen al operador R y tales que

$$I_{11} = N_{R_2} \quad I_{22} = N_{R_1}^*$$

$$I_{12} = N_{R_1} \quad I_{21} = N_{R_2}^*$$

y que están definidos en la forma:

$$\langle R_1 u, v \rangle = \langle R u_{11}, v_{21} \rangle \quad \langle R_2 u, v \rangle = \langle R u_{12}, v_{22} \rangle$$

□

(La demostración está en literatura 1985 I)

Observación. Por medio del Teorema 1.2 se proporciona una forma alternativa abstracta, pero sistemática para obtener la descomposición de un cierto operador R que se supone conocido.

Más explícitamente, dado el problema con valores en la frontera (1.4) y definido el operador P , es posible - integrando por partes a P - determinar directamente a los operadores Q^* y $R = B - C^*$ tales que la relación

$$\langle (P-B)u, v \rangle = \langle (B-C^*)u, v \rangle$$

es una fórmula de Green para el problema (1.4). Como se apuntó anteriormente, se puede determinar la forma del operador B agrupando a los valores de frontera del problema y C^* agrupando los valores de frontera complementarios, pero hay que tener en cuenta que existe una infinidad de formas de hacer esta separación que cumplen con la condición de que al ser sumados dan como resultado al operador R ; en otras palabras, B y C^* no están determinados en forma única cuando se trata de encontrarlos directamente.

Por ejemplo, tomese la fórmula de Green (1.1) asociada al problema

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= f & \text{en } \Omega \\ u + \frac{\partial u}{\partial n} &= g & \text{en } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1.15)$$

Para agrupar en $\langle Bu, v \rangle$ a las condiciones prescritas, es necesario factorizar de alguna forma a $u + \frac{\partial u}{\partial n}$ del residual

$$\langle Ru, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left(u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) ds$$

Sumando y restando los términos uv , $\frac{\partial u}{\partial n} \frac{\partial v}{\partial n}$ en R , se tendrá que:

$$\int_{\partial\Omega} \left(u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right) ds = - \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(v - \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds - \int_{\partial\Omega} \left(uv - \frac{\partial u}{\partial n} \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds$$

entonces se pueden elegir B y C^* en la forma

$$\langle Bu, v \rangle = - \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(v - \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds \quad \langle C^* u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left(u v - \frac{\partial u}{\partial n} \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds \quad (1.16)$$

Pero agrupando y factorizando de manera diferente, se pueden elegir B y C^* en la forma:

$$\langle Bu, v \rangle = -\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(v - \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds \quad \langle C^* u, v \rangle = -\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} \left(u - \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(v + \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds \quad (1.17)$$

y es claro que en ambos casos: $\langle Ru, v \rangle = \langle (B - C^*)u, v \rangle$.

En cambio el Teorema 1.2 asegura que existe un por único de operadores B y C^* (R_1 y R_2) que descomponen a $R = P - Q^*$, tales que sus nulos son una descomposición canónica del espacio de funciones, i.e. $D = N_B + N_{C^*}$. Por lo tanto, aunque en la práctica se puede proceder en forma directa y determinar a B y C^* "arbitrariamente", es mejor tener un criterio para encontrar en forma única a los operadores que descomponen a R . Además, trabajar los problemas en esta forma será indispensable para construir la metodología que indique como obtener fórmulas de Green para dominios discontinuos.

Hasta ahora se han dado conceptos básicos para la concretización abstracta de una fórmula de Green, y se ha ejemplificado su validez para fórmulas de Green "simples". Sin embargo, no se ha dicho a nivel de operadores, que es lo que se va a entender por una fórmula de Green.

Solo de observar los ejemplos que se han dado, se puede decir que la relación (1.7) es una fórmula de Green para (1.4) en Ω si $R = B - C^*$ son "terminos de frontera", i.e. que los operadores B y C^* estén definidos en la frontera $\partial\Omega$ de Ω . Este concepto intuitivo pero básico dentro de la Aproximación Unificada se formaliza mas adelante. Para lograr esto se procede a establecer conceptos útiles para este propósito.

Definición 1.5. Sean $P: D \rightarrow D^*$, $B: D \rightarrow D^*$ operadores. Se dice entonces que B es un operador de frontera para P si

$$\langle Pu, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_{B^*} \Rightarrow Pu = 0$$

□

Utilizando esta definición se puede comprobar fácilmente si un operador B asociado a las condiciones del problema (1.4) es el "adecuado" para el operador P definido para (1.4). Por ejemplo, se tiene el problema (1.12).

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= f & \text{en } \Omega \\ u &= g & \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

$$\text{Sean } \langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV \quad \langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} u v \, ds$$

Tómese $D = C^2(\bar{\Omega})$, suponiendo que

$$\int_{\Omega} v \nabla^2 u = 0 \quad \forall v \in N_{B^*} = \{v \in D \mid v = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

entonces se tiene que demostrar que:

$$Pu = 0, \text{ i.e. } u \in N_P = \{u \in D \mid \nabla^2 u = 0 \text{ en } \Omega\}$$

Suponiendo que el nulo de B^* es singular (ó degenerado), i.e. que $B^*v = 0$ para elementos $v \in D$ tales que $v \neq 0$, entonces tomando $v \neq 0$ en Ω se puede demostrar por reducción al absurdo que

$$\int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV = 0 \Rightarrow \nabla^2 u = 0 \text{ en } \Omega$$

Supóngase que $\nabla^2 u \neq 0$ en alguna vecindad $M \subset \Omega$ y que

$$\int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV = 0$$

entonces $\nabla^2 u > 0$ ó $\nabla^2 u < 0$ en M . Se puede tomar $\nabla^2 u \sim 1 - \frac{r^2}{r_m^2} > 0$ ($-(1 - \frac{r^2}{r_m^2})$ si es negativo) con $r_m =$ radio de la vecindad M (fig 1.2).

Por el Teorema del Valor Medio para integrales existen $v(x_m) \neq 0$ y $\epsilon > 0$ (ó $\epsilon < 0$) tales que:

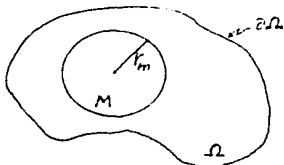


fig 1.2

$$\int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV = v(x_m) \int_M \nabla^2 u \, dV \\ = v(x_m) \neq 0 \quad \forall$$

Entonces:

$$\int_{\Omega} \nabla^2 u \, dV = 0 \Rightarrow \nabla^2 u = 0 \text{ en } \Omega \quad \forall v \in N_{B^*}$$

Por lo tanto, B es un operador de frontera para P . Del mismo modo se puede demostrar que

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial \Omega} u \left(\frac{\partial v}{\partial n} + \alpha v \right) ds \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

es un operador de frontera para P , en tanto que

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\Omega} uv \, dV$$

no lo es.

Definición 1.6. Los operadores $P: D \rightarrow D^*$ y $Q: D \rightarrow D^*$ se dice que son adjuntos formales cuando $R = P - Q^*$ es un operador de frontera para P , mientras R^* es un operador de frontera para Q , es decir:

$$\langle Pu, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_{P, Q^*} \Rightarrow Pu = 0 \quad (u \in N_P)$$

$$\text{y} \quad \langle Qu, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_{P^*, Q} \Rightarrow Qu = 0 \quad (u \in N_Q)$$

□

En esta definición se formaliza la "idea intuitiva" de que en una fórmula de Green, R debe contener exclusivamente "términos de frontera", lo que en el lenguaje de los operadores significa que R y R^* deben ser operadores de frontera para los operadores P y Q asociados al operador diferencial, respectivamente.

Lo que se va a entender por una fórmula de Green está dentro de la siguiente

Definición 1.7. Sean los operadores $P: D \rightarrow D^*$ y $Q: D \rightarrow D^*$ adjuntos formales. Entonces la relación

$$P - B = Q^* - C^*$$

es una fórmula de Green "débil" o en un sentido débil, cuando:

$$\langle Bu, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_C \Rightarrow Bu = 0 \quad (C^* \text{ es operador de frontera para } B)$$

$$\langle B^*u, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_{C^*} \Rightarrow B^*u = 0 \quad (C \text{ es operador de frontera para } B^*)$$

$$\langle C^*u, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_{B^*} \Rightarrow C^*u = 0 \quad (B \text{ es operador de frontera para } C^*)$$

$$\langle Cu, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_B \Rightarrow Cu = 0 \quad (B^* \text{ es operador de frontera para } C)$$

Si los operadores B y C^* además des componen al operador $R = P - Q^*$ entonces se tendrá una fórmula de Green "fuerte" o en un sentido fuerte. □

Aplicando esta definición se podrá determinar si los operadores P y Q^* , B y C^* asociados a un problema con valores en la frontera pertenecen a una fórmula de Green. Por ejemplo, se tiene el problema (1.12)

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= f & \text{en } \Omega \\ u &= g & \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

al que se asocian los operadores

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV \quad \langle Q^*u, v \rangle = \int_{\Omega} u \nabla^2 v \, dV \quad (1.18)$$

y como espacio de funciones admisibles: $D = \{u \mid u \in C^2(\Omega), u \in C^1(\partial\Omega)\}$.

Dados B y C^* se procede a ver cuando se tiene una fórmula de Green "fuerte" o "débil".

• Caso 1. Sean: $\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} ds$ $\langle C^*u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} v \frac{\partial u}{\partial n} ds$

Para ver si estos operadores pertenecen a una fórmula de Green, se tiene que demostrar que B y C^* , B^* y C son operadores de frontera uno del otro. Primero se verifica si C^* es un operador de frontera para B . Aplicando la Definición 1.5 tomando $v \in N_C = \{v \in D \mid v=0 \text{ en } \partial\Omega\}$, se tiene que demostrar que:

$$\int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} ds = 0 \quad \forall v \in N_C.$$

Suponiendo que N_C es degenerado, entonces existe $v \in N_C$, $v \neq 0$ en Ω tal que $Cv=0$; tomando $v \neq 0$ en Ω tal que $\frac{\partial v}{\partial n} \neq 0$ en $\partial\Omega$, no es difícil demostrar que

$$\int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} ds = 0 \Leftrightarrow u=0 \text{ en } \partial\Omega \Rightarrow u \in N_B = \{u \in D \mid u=0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

Entonces C^* es un operador de frontera para B . En forma análoga se demuestra que B es operador de frontera para C^* y que C y B^* son operadores de frontera uno del otro. Además, como se vio anteriormente, B y $-C^*$ descomponen a $R = P - Q^*$. Por lo tanto la relación

$$\langle (P-B)u, v \rangle = \langle (Q^*-C^*)u, v \rangle$$

es una fórmula de Green "fuerte".

• Caso 2. Sean: $\langle Bu, v \rangle = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (u + \frac{\partial u}{\partial n})(v + \frac{\partial v}{\partial n}) ds$

$$\langle C^*u, v \rangle = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (u - \frac{\partial u}{\partial n})(v - \frac{\partial v}{\partial n}) ds$$

Tomando $v \in N_C = \{v \in D \mid v - \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$ se debe demostrar que:

$$\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (u + \frac{\partial u}{\partial n})(v + \frac{\partial v}{\partial n}) ds = 0$$

Suponiendo que N_C es degenerado, entonces sea $v \neq 0$ en Ω tal

que $v - \partial v / \partial n = 0$ en $\partial\Omega$ pero que $v + \partial v / \partial n \neq 0$ en $\partial\Omega$ (en forma equivalente, $v - \partial v / \partial n = 0 \Rightarrow v + \partial v / \partial n = 2 \partial v / \partial n$, entonces tomase v tal que $\partial v / \partial n \neq 0$ en $\partial\Omega$); no es difícil demostrar que

$$\frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (u + \frac{\partial u}{\partial n})(v + \frac{\partial v}{\partial n}) ds = 0 \Leftrightarrow u + \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega.$$

$$\Rightarrow u \in N_B = \{u \in D \mid u + \partial u / \partial n = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

Entonces C^* es un operador de frontera para B . Del mismo modo se demuestra que B es operador de frontera para C^* y que B^* y C son operadores de frontera uno del otro. También es posible demostrar que $B y - C^*$ descomponen a R , i.e. $R = B - C^*$ donde

$$\langle Ru, v \rangle = \int_{\partial\Omega} (u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n}) ds$$

y que $\{B, C^*\}$ y $\{B^*, C\}$ varían independientemente ($N_R = N_B + N_{C^*}$, $N_{R^*} = N_{B^*} + N_C$). Por lo tanto, $\langle (B - C^*)u, v \rangle = \langle (B^* - C)u, v \rangle$ es una fórmula de Green "fuerte".

• Caso 3. Sean $\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} uv ds$ $\langle C^*u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} \frac{\partial v}{\partial n} ds$

Nuevamente se va a demostrar que C^* es operador de frontera para B . Tomando $v \in N_C = \{v \in D \mid \partial v / \partial n = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$ se debe de mostrar que

$$\int_{\partial\Omega} uv ds = 0 \Leftrightarrow u = 0 \text{ en } \partial\Omega \Rightarrow u \in N_B.$$

lo que es inmediato tomando $v \in N_C$ (que se supone degenerado) tal que $v \neq 0$ en Ω y $\partial v / \partial n = 0$ en $\partial\Omega$. Del mismo modo se demuestra que C es operador de frontera para B^* y que B^* y C son operadores de frontera uno del otro. Pero en este caso $B y - C^*$ no descomponen a $R = B - C^*$, donde R es la misma del caso 2, aunque se cumple que $\{B, C^*\}$ y $\{B^*, C\}$ varían independientemente, i.e. $N_R = N_B + N_{C^*}$, $N_{R^*} = N_{B^*} + N_C$. Por lo tanto, la acción $\langle (B - C^*)u, v \rangle = \langle (B^* - C)u, v \rangle$

es una fórmula de Green "débil".

• Caso 4. Sean $\langle B u, v \rangle = \int_{\partial \Omega} u v ds$ $\langle C^* u, v \rangle = \int_{\partial \Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} ds$

Se procede a verificar si

$$\langle B^* u, v \rangle = 0 \quad \forall v \in N_{C^*} \Rightarrow B^* u = 0 \quad (u \in N_{B^*})$$

Tomando $v \in N_{C^*} = \{v \in D \mid v = 0 \text{ en } \partial \Omega\}$ que se supone degenerado, es evidente que

$$\langle B^* u, v \rangle = \int_{\partial \Omega} u v ds \quad \forall v \in N_{C^*}$$

lo que se cumple $\forall u \in D$, en especial para $u \in N_{B^*}$, ya que $v = 0$ en $\partial \Omega$. Por lo tanto, C no es operador de frontera para B^* . Como se deben cumplir las cuatro condiciones de la Definición 2.7, entonces la relación $\langle (P-B)u, v \rangle = \langle (Q^*-C^*)u, v \rangle$ no es una fórmula de Green.

Es posible demostrar (Bebera 1985 I.) que para una fórmula de Green (fuerte o débil) se cumple que

Proposición 1.3. Cuando la relación $P-B = Q^*-C^*$ es una fórmula de Green (fuerte o débil) entonces se cumple que:

- (i). $N_R = N_B + N_{C^*}$, $N_{R^*} = N_{B^*} + N_C$
- (ii) B y C^* son operadores de frontera para P .
- (iii) C y B^* son operadores de frontera para Q .

Es sencillo comprobar utilizando las "técnicas" dadas en las

diferentes ejemplos vistos hasta ahora, que lo anterior se cumple para los casos 1, 2 y 3. Pero más importante que comprobar lo anterior, lo es el hecho de que ya se puede establecer -teniendo el concepto abstracto de una fórmula de Green-, el concepto abstracto de una fórmula de Green. Utilizando los conceptos establecidos se puede dar la siguiente

Definición 1.8. Una fórmula de Green abstracta en un sentido "fuente" para $P: D \rightarrow D^*$, es una descomposición canónica de D con respecto a $R = P - Q^*$.

□

Queda por establecer la relación entre fórmulas de Green y su caracterización abstracta. Esto se hace en el siguiente

Teorema 1.3. Existe una correspondencia uno-a-uno entre fórmulas de Green "fuente" y fórmulas de Green abstractas en un sentido "fuente". Cuando la relación $P - B = Q^* - C^*$ es una fórmula de Green "fuente", la correspondiente fórmula de Green abstracta $\{I_{11}, I_{22}\}$, $\{I_{12}, I_{21}\}$ está dada en la forma

$$\begin{aligned} I_{11} &= N_C^* & I_{22} &= N_B^* \\ I_{12} &= N_B & I_{21} &= N_C \end{aligned}$$

Recíprocamente, cuando la fórmula de Green abstracta en un sentido fuente $\{I_{11}, I_{22}\}$, $\{I_{12}, I_{21}\}$ está dada, entonces

$$\langle Bu, v \rangle = \langle R U_{11}, v_{21} \rangle \quad \langle Cu, v \rangle = -\langle R v_{12}, U_{22} \rangle$$

con $U_{ij}, v_{ij} \in I_{ij}$, $ij = 1, 2$.

□

Este teorema es un caso particular del Teorema 1.2; hay que tener en cuenta que las fórmulas de Green son casos particulares de las descomposiciones introducidas en las Definiciones 1.2 y 1.4.

Algo similar se puede decir para fórmulas de Green "debiles", pero aquí no se trabajarán. Un ejemplo sencillo ayudará a entender el mecanismo del teorema anterior y sus implicaciones.

Tómase nuevamente el problema (1.12)

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= f & \text{en } \Omega \\ u &= g & \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

Sea $\langle Ru, v \rangle = \int_{\Omega} v \nabla^2 u \, dV$

Integrando por partes se obtiene que

$$\langle Qu, v \rangle = \int_{\Omega} u \nabla^2 v \, dV \quad \text{y} \quad \langle Ru, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left\{ u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right\} ds$$

Sean $\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} ds$ $\langle C^*u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} v \frac{\partial u}{\partial n} ds$ (1.19)

donde por convención en B se agrupan los términos que contienen a las condiciones de frontera dadas en el problema, y en C^* a los que contienen a las condiciones complementarias. En este caso, como es un problema Dirichlet, en B se tiene a $u|_{\partial\Omega}$ y en C^* a $\frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega}$. Conociendo esta información - si el problema lo requiere -, se puede encontrar el valor de cualquier combinación lineal $\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial n}$ (forma general de las condiciones de frontera para operadores de 2° orden).

Haciendo una analogía con un espacio vectorial, $\{u, \frac{\partial u}{\partial n}\}$ son vectores que forman una base para el "espacio" de condiciones de frontera, en otras palabras, toda condición de frontera se puede expresar como una combinación lineal de esta base.

También se puede proceder a la inversa, esto es, que si en vez de $\frac{\partial u}{\partial n}$ las condiciones de frontera complementarias fueran por ejemplo $u + \frac{\partial u}{\partial n}$, entonces para este caso

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} u \left(v + \frac{\partial v}{\partial n} \right) ds \quad \langle C^* u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} v \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) ds \quad (1.20)$$

y es inmediato que se cumple que $A = B - C^*$. Conociendo este valor $(u + \frac{\partial u}{\partial n})$ se puede determinar $\frac{\partial u}{\partial n}$ ya que se conoce u en Ω . Nuevamente haciendo una analogía con espacios vectoriales, no es difícil comprobar que u y $u + \frac{\partial u}{\partial n}$ forman también una base de este "espacio" de condiciones de frontera. Por lo tanto, se puede elegir al operador C^* de tal modo que contenga a las condiciones de frontera complementarias que por alguna causa requiera el problema u otra que se considere conveniente, y esto es posible por que como se apuntó anteriormente, B y C^* no están determinados en forma única para un problema con valores en la frontera. Este hecho se explica fácilmente haciendo la analogía con espacios vectoriales y utilizando el Teorema 1.3.

Dadas las condiciones de frontera del problema (contenidos en B) es inmediato determinar el nulo de B , N_B , como el conjunto de funciones que las anulan. Estas condiciones determinan el "primer" vector base; utilizando un sistema cartesiano ortogonal en el que se coloca a u en el eje de las abscisas y a $\frac{\partial u}{\partial n}$ en el eje de las ordenadas, se pueden representar estos vectores. Por la elección anterior es claro que $\{u, \frac{\partial u}{\partial n}\}$ forman una base ortogonal en tanto que el conjunto $\{u, u + \frac{\partial u}{\partial n}\}$ no es base ortogonal.

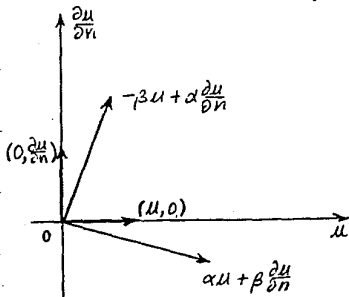


fig 1.4

Entonces asociado a las condiciones u en Ω está el par ordenado $(u, 0)$ (fig. 1.4). Por la forma en que está definido B^* , como el transpuesto de B , el nulo de B^* , N_{B^*} , se elige como el conjunto de funciones que anulan a las condiciones de frontera, en otras palabras, N_{B^*} es el complemento ortogonal de N_B . En este caso, N_{B^*} son las funciones tales que $\frac{\partial u}{\partial n} \equiv 0$,

que se pueden representar asociándole el par ordenado $(0, 2u/pn)$ (fig. 1.4).

El nulo de C^* , N_{C^*} , es el conjunto de funciones que anulan a las condiciones de frontera complementarias ó complemento algebraico de las condiciones de frontera. Como se dijo anteriormente, existe la posibilidad de elegir las arbitrariamente; por la analogía con un espacio vectorial bidimensional, esto es equivalente a la propiedad de que dos vectores cualesquiera no paralelos (linealmente independientes) forman una base. Por lo tanto en este caso, cualquier condición de la forma $\alpha u + \beta 2u/pn$ con $\beta \neq 0$ formará una base junto con $u|_{\partial\Omega}$ (fig. 1.4) i.e. será un complemento algebraico para $u|_{\partial\Omega}$. Un caso particular sería elegir un complemento algebraico que sea ortogonal a $(u|_{\partial\Omega}, 0)$ tomando $\alpha = 0$, como se hizo en (1.18); otro caso particular sería el dado en (1.19) donde $\alpha = 1, \beta = 1$.

Esta es la razón por la que es posible elegir sin problemas a B y C^* libremente en una fórmula de Green, pero hay que resaltar un pequeño detalle. Obtenida una fórmula de Green para algún problema y determinados convenientemente B y C^* , estos por construcción, descomponen al operador $R = P - Q^*$, y la relación $P - B = Q^* - C^*$ siempre será una fórmula de Green "fuerte", consecuentemente la descomposición canónica $\{N_B, N_{C^*}\}, \{N_{B^*}, N_C\}$ será una fórmula de Green abstracta en un sentido "fuerte". Sin embargo, proceder una forma inversa no produce los mismos resultados, en otras palabras, que eligiendo arbitrariamente a los subespacios $\{N_B, N_{C^*}\}, \{N_{B^*}, N_C\}$ y determinados B y C^* utilizando el Teorema 1.3, estos pueden no descomponer a $R = P - Q^*$, en consecuencia se obtendrá una fórmula de Green "débil" y por lo tanto, aunque estos nulos descompongan al espacio de funciones, i.e.

$$D = N_B + N_{C^*} = N_{B^*} + N_C$$

no serán una descomposición canónica del espacio D respecto a $R = P - Q^*$, lo que significa que $\{N_B, N_{C^*}\}, \{N_{B^*}, N_C\}$ no es una fórmula de Green abstracta en un sentido "fuerte".

Entonces, aunque existe la libertad de escoger cualquier complemento algebraico, por ahora se elegirá al que de fórmulas de Green "fuertes", que como se veía en la práctica, será el complemento algebraico ortogonal a las condiciones de frontera.

Finalmente, el polo de C -transportado de C^* , será el conjunto de funciones que anulan al complemento ortogonal del complemento algebraico de las condiciones de frontera. Estas se eligen ortogonalizando al vector coordenado (α, β) del mismo modo que se hace en Geometría Analítica; en este caso el vector ortogonal se elige como $(-\beta, \alpha)$ con lo que N_C queda definido por las funciones que satisfacen $-\mu + \alpha \frac{\partial \mu}{\partial n} = 0$.

Una vez elegidos $\{N_B, N_{C^*}\}$, $\{N_{B^*}, N_C\}$, queda por ilustrar como se pueden determinar los operadores B y C^* correspondientes. Primero se tratará de obtener a los operadores de frontera (1.17) y después se ilustrará el caso en que se obtienen fórmulas de Green "débiles" al elegir arbitrariamente los polos.

$$\text{Sean: } I_{12} = N_B = \{u \in D \mid u + \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

$$I_{22} = N_{B^*} = \{v \in D \mid v - \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

$$I_{11} = N_{C^*} = \{u \in D \mid u - \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

$$I_{21} = N_C = \{v \in D \mid v + \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

Se determinará primero al operador B utilizando

$$\langle BU, v \rangle = \langle R U_{11}, v_{21} \rangle = \int_{\partial\Omega} \{ \mu_{11} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - v_{21} \frac{\partial \mu_{11}}{\partial n} \} ds$$

$$\text{donde } \begin{array}{l} \mu_{11} \in N_{C^*} \Rightarrow \mu_{11} - \frac{\partial \mu_{11}}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega \\ \mu_{21} \in N_C \Rightarrow \mu_{21} + \frac{\partial \mu_{21}}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega \end{array}$$

$$\text{Tómese } \begin{array}{l} u = \mu_{11} + \mu_{12} \text{ con } \mu_{12} \in N_B \Rightarrow \mu_{12} + \frac{\partial \mu_{12}}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega \\ v = v_{21} + v_{22} \text{ con } v_{22} \in N_{B^*} \Rightarrow v_{22} - \frac{\partial v_{22}}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega \end{array}$$

Se deben factorizar los valores de frontera prescritos $u + \partial u / \partial n$.
Primero se intenta factorizar u y $\partial u / \partial n$ por separado, sumando y restando los términos apropiados.

$$\begin{aligned} \langle Bu, v \rangle &= \int_{\partial\Omega} \left\{ \mu_{11} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} + \mu_{12} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - \mu_{12} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - v_{21} \frac{\partial u_{11}}{\partial n} \right\} ds \\ &= \int_{\partial\Omega} \left\{ \mu \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - \mu_{12} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - v_{21} \frac{\partial u_{11}}{\partial n} - v_{21} \frac{\partial u_{12}}{\partial n} + v_{21} \frac{\partial u_{12}}{\partial n} \right\} ds \\ &= \int_{\partial\Omega} \left\{ \mu \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - \mu_{12} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - v_{21} \frac{\partial u}{\partial n} + v_{21} \frac{\partial u_{12}}{\partial n} \right\} ds \end{aligned}$$

Ahora se intentará factorizar $u + \partial u / \partial n$. Teniendo en cuenta que $v_{21} = -\partial v_{21} / \partial n$, $\mu_{12} = \partial u_{12} / \partial n$ entonces:

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left\{ \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - \mu_{12} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} + v_{21} \frac{\partial u_{12}}{\partial n} \right\} ds$$

No es difícil comprobar que $v_{21} \frac{\partial u_{12}}{\partial n} - \mu_{12} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} = 0$, entonces

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \frac{\partial v_{21}}{\partial n} ds \quad (1.21)$$

Se intenta ahora factorizar $\frac{\partial v}{\partial n}$ sumando un cero adecuado, en este caso si $v_{22} - \partial v_{22} / \partial n = 0$ entonces:

$$\begin{aligned} \langle Bu, v \rangle &= \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial v_{21}}{\partial n} - v_{22} + \frac{\partial v_{22}}{\partial n} \right) ds \\ &= \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial n} - v_{22} \right) ds \end{aligned}$$

Se intenta ahora obtener v ; recordando que $v = v_{21} + v_{22}$:

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial n} - v \right) ds + \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) v_{21} ds$$

pero $v_{21} + \partial v_{21} / \partial n = 0 \Rightarrow v_{21} = -\partial v_{21} / \partial n$, con esto

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial n} - v \right) ds - \int_{\partial\Omega} \left(u + \frac{\partial u}{\partial n} \right) v_{21} ds$$

y por (1.21):

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} (u + \frac{\partial u}{\partial n}) (\frac{\partial v}{\partial n} - v) ds - \langle Bu, v \rangle$$

$$\therefore \langle Bu, v \rangle = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (u + \frac{\partial u}{\partial n}) (\frac{\partial v}{\partial n} - v) ds$$

De igual forma se obtiene que

$$\langle Cu, v \rangle = - \langle Rv_{12}, u_{22} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle C^*u, v \rangle = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (v + \frac{\partial v}{\partial n}) (\frac{\partial u}{\partial n} - u) ds$$

Sean ahora:

$$I_{12} = N_B = \{u \in D \mid u = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

$$I_{22} = N_{B^*} = \{v \in D \mid \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

$$I_{11} = N_{C^*} = \{u \in D \mid u + \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

$$I_{21} = N_C = \{v \in D \mid -v + \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ en } \partial\Omega\}$$

Haciendo lo mismo que en el ejemplo anterior, no es difícil comprobar que utilizando

$$\langle Bu, v \rangle = \langle Ru_{11}, v_{21} \rangle = \int_{\partial\Omega} \{u_{11} \frac{\partial v_{21}}{\partial n} - v_{21} \frac{\partial u_{11}}{\partial n}\} ds$$

se obtendrá que

$$\langle Bu, v \rangle = 2 \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial n} ds$$

en tanto que utilizando

$$\langle Cu, v \rangle = - \langle Rv_{12}, u_{22} \rangle = - \int_{\partial\Omega} \{u_{22} \frac{\partial v_{12}}{\partial n} - v_{12} \frac{\partial u_{22}}{\partial n}\} ds$$

se obtendrá que

$$\langle C^*u, v \rangle = - \int_{\partial\Omega} (u + \frac{\partial u}{\partial n}) (v - \frac{\partial v}{\partial n}) ds$$

Es fácil comprobar que $R \neq B - C^*$, entonces B y C^* no descomponen a $R = P - Q^*$ en el problema (1.12) aunque B y C^* cumplen las cuatro condiciones de la definición 1.7. Por lo tanto, la relación $P - B = Q^* - C^*$ es una fórmula de Green "débil" para P y Q^* dados en (1.16).

2. Fórmulas de Green para dominios discontinuos.

Una vez establecida la metodología para obtener fórmulas de Green asociadas a problemas con valores en la frontera sobre dominios continuos, se procede a exponer la metodología para obtener estas fórmulas cuando el problema está definido sobre un dominio discontinuo, que será de hecho una generalización de la primera. La forma directa de obtenerlas es la siguiente.

Se divide al dominio Ω en dos subdominios (por simplicidad) Ω_1, Ω_2 tales que:

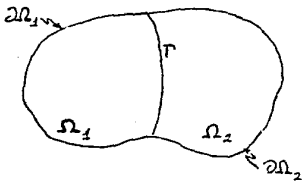


fig 2.1.

$$\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$$

$$\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$$

$$\partial\Omega = (\partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2) - \Gamma$$

$$\partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2 = \Gamma$$

Es posible extender la fórmula (1.7) para este dominio discontinuo. Es claro que en este caso

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} v \Delta u \, dV = \int_{\Omega_1} v \Delta u \, dV + \int_{\Omega_2} v \Delta u \, dV$$

Integrando por partes cada integral y agrupando adecuadamente los "términos de frontera" resultantes, se tendrá la expresión

$$\langle Pu, v \rangle = R_{\Omega_1}(u, v) + R_{\Omega_2}(u, v) + \langle Q^*u, v \rangle$$

donde
$$\langle Q^*u, v \rangle = \int_{\Omega} u \Delta^* v \, dV = \int_{\Omega_1} u \Delta^* v \, dV + \int_{\Omega_2} u \Delta^* v \, dV$$

$R_{2n}[u, v]$ es una funcional bilineal que contiene a las integrales sobre la frontera $\partial\Omega$ de u, v y sus derivadas y $R_n[u, v]$ es otra funcional bilineal que contiene a las integrales sobre la interfase Γ de u, v y sus derivadas. En el caso de un problema con rebotes en la frontera y saltos prescritos de la solución y/o sus derivadas (de orden menor que el orden de L) en la interfase Γ :

$$\begin{aligned} Lu &= f & \text{en } \Omega \\ \gamma u &= g & \text{en } \partial\Omega \\ [u] &= j_\Gamma & \text{en } \Gamma \\ \left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma &= k_\Gamma & \text{en } \Gamma \end{aligned} \quad (2.1)$$

se puede nuevamente descomponer a la funcional bilineal R_{2n} en la misma forma en que se hizo para el dominio continuo: agrupando valores de frontera prescritos y complementarios y denotándolos mediante los operadores "de frontera" B y C^* , entonces se tendrá que:

$$(\langle Pu, v \rangle - \langle Q^*u, v \rangle) - (\langle Bu, v \rangle - \langle C^*u, v \rangle) = R_n[u, v]$$

Es posible también - después de hacer un poco de álgebra -, descomponer a la funcional bilineal R_n en la forma

$$R_n[u, v] = R_1[u, v] + R_2[u, v]$$

donde la funcional R_1 contiene a los saltos de u y sus derivadas y S_2 a los promedios de u y sus derivadas sobre Γ ; denotando a estas nuevas funcionales mediante operadores de salto J y promedio K^* en la forma

$$\begin{aligned} \langle Ju, v \rangle &= S_1[u, v] \\ \langle K^*u, v \rangle &= -S_2[u, v] \end{aligned}$$

se tendrá entonces la relación

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Bu, v \rangle - \langle Ju, v \rangle = \langle Q^*u, v \rangle - \langle C^*u, v \rangle - \langle K^*u, v \rangle \quad (2.2)$$

que será una fórmula de Green sobre el dominio discontinuo Ω si se cumplen ciertas relaciones entre subespacios de los dominios de estos operadores, (Heuser 1984, Heuser 1985 I). Una vez está establecida esta fórmula de Green general y teniendo en cuenta que por (2.1):

$$\langle Pu, v \rangle = \langle f, v \rangle = \int_{\Omega} v f \, dV$$

$$\langle Bu, v \rangle = \langle g, v \rangle = \int_{\partial\Omega} g v \, dV \quad (2.3)$$

$$\langle Ju, v \rangle = \langle j, v \rangle = \int_{\Gamma} j v \, dV$$

se puede obtener un "principio variacional" que contiene la información que se desconoce del problema, esto es:

$$\langle Q^*u, v \rangle - \langle C^*u, v \rangle - \langle K^*u, v \rangle = \langle f, v \rangle - \langle g, v \rangle - \langle j, v \rangle \quad (2.4)$$

donde $\langle Q^*u, v \rangle$ contiene la información de u en el interior del dominio Ω , $\langle C^*u, v \rangle$ la información de u en la frontera $\partial\Omega$ y $\langle K^*u, v \rangle$ la información de u en la interfrontera Γ . En el caso muy frecuente en que u es continua sobre Γ entonces $\langle j, v \rangle = 0$ y el principio variacional se reduce un poco, pero mantiene las mismas características.

Como se puede ver el proceso no es muy complicado para operadores L sencillos, sin embargo, cuando el operador L es complicado el procedimiento anterior resulta bastante engorroso, sobre todo cuando la región Ω se divide en más subregiones por lo que es probable cometer errores durante el proceso.^(*) La Aproximación Multiplicada proporciona la metodología para obtener estas fórmulas. Aquí se hará el tratamiento para un dominio dividido en dos partes, la generalización a una partición más grande es inmediata (Heuser 1985 II).

(*) Si el proceso anterior no quedó claro, ver el Apéndice H en el que se trabaja un problema particular en detalle.

Dividase al dominio Ω en dos partes Ω_I, Ω_{II} (fig. 2.2) tales



fig. 2-2

$$\Omega = \Omega_I \cup \Omega_{II}$$

$$\Omega_I \cap \Omega_{II} = \emptyset$$

$$\partial\Omega = \partial\Omega'_I \cup \partial\Omega'_{II}$$

Se toma como espacio de funciones admisibles a la suma directa

$$D = D_I \oplus D_{II}$$

donde $D_I = \{u: \Omega_I \rightarrow \mathbb{R}\}$, $D_{II} = \{u: \Omega_{II} \rightarrow \mathbb{R}\}$.

Entonces $u \in D$ será el par ordenado $u = \{u_I, u_{II}\}$; $u_I \in D_I, u_{II} \in D_{II}$.

Sea el problema con valores en la frontera y saltos de $u, \partial u / \partial n, \dots$ prescritos en Γ :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= f & \text{en } \Omega = \Omega_I \cup \Omega_{II} \\ \alpha_I u &= g_I & \text{en } \partial\Omega'_I \\ \alpha_{II} u &= g_{II} & \text{en } \partial\Omega'_{II} \\ \alpha_I u_I - \alpha_{II} u_{II} &= j_1 & \text{en } \Gamma \\ \beta_I \frac{\partial u_I}{\partial n} - \beta_{II} \frac{\partial u_{II}}{\partial n} &= j_2 & \text{en } \Gamma \\ & \vdots & \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para este problema también se define al operador P en la forma

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} v \mathcal{L}u \, dV$$

Por propiedades de la integral y por la forma de los elementos del espacio de funciones se encuentra que

$$\begin{aligned} \langle Pu, v \rangle &= \int_{\Omega_I} v \mathcal{L}u \, dV + \int_{\Omega_{II}} v \mathcal{L}u \, dV \\ &= \int_{\Omega_I} v \mathcal{L}u_I \, dV + \int_{\Omega_{II}} v \mathcal{L}u_{II} \, dV = \langle P_I u_I, v_I \rangle + \langle P_{II} u_{II}, v_{II} \rangle \end{aligned}$$

Se ha descompuesto el problema sobre el dominio discontinuo en la suma de dos problemas sobre dominios continuos. Entonces por lo visto en la sección anterior

$$\langle (P_I - Q_I^*)u_I, v_I \rangle + \langle (P_{II} - Q_{II}^*)u_{II}, v_{II} \rangle = \langle R_I u_I, v_I \rangle + \langle R_{II} u_{II}, v_{II} \rangle$$

donde R_I contiene integrales de términos definidos sobre la frontera de Ω_I , $\partial\Omega_I = \partial\Omega_I' \cup T$, y R_{II} sobre la frontera de Ω_{II} , $\partial\Omega_{II} = \partial\Omega_{II}' \cup T$.

Nuevamente, por propiedades de la integral, se pueden separar los términos sobre las fronteras exteriores $\partial\Omega_I'$ y $\partial\Omega_{II}'$ definiendo los respectivos operadores B y C^* , de los términos sobre la interfaz T . Con esto y abusando de la notación:

$$\begin{aligned} \langle (P_I - Q_I^*)u_I, v_I \rangle + \langle (P_{II} - Q_{II}^*)u_{II}, v_{II} \rangle &= \langle (B_I - C_I^*)u_I, v_I \rangle + \langle (B_{II} - C_{II}^*)u_{II}, v_{II} \rangle \\ &+ \langle R_I u_I, v_I \rangle + \langle R_{II} u_{II}, v_{II} \rangle \end{aligned}$$

donde las funcionales "residuales" R_I y R_{II} contienen los términos sobre la interfaz T . ($R_I: D_I \rightarrow D_I^*$, $R_{II}: D_{II} \rightarrow D_{II}^*$). Por propiedades de la integral, se puede agrupar a todos los operadores en la forma:

$$Q^* = Q_I^* + Q_{II}^*, \quad B = B_I + B_{II}, \quad C^* = C_I^* + C_{II}^*, \quad R = R_I + R_{II}$$

y utilizando la forma de los elementos del espacio de funciones, se tendrá la expresión:

$$\langle (P - Q^*)u, v \rangle - \langle (B - C^*)u, v \rangle = \langle Ru, v \rangle$$

ó bien

$$\langle (P - B)u, v \rangle - \langle (Q^* - C^*)u, v \rangle = \langle Ru, v \rangle$$

Denotando $\hat{P} = P - B$ y $\hat{Q}^* = Q^* - C^*$, queda una expresión similar a la que se tiene en problemas sobre dominios continuos:

$$\langle \hat{P}u, v \rangle - \langle \hat{Q}^*u, v \rangle = \langle Ru, v \rangle$$

Aplicando entonces los conceptos establecidos para este tipo de problemas, se buscarán los subespacios que son una descomposición canónica del espacio D respecto a R y que constituirán una fórmula de Green abstracta y finalmente, la metodología para obtener a los operadores que descomponen a R .

Aunque la función solución y sus derivadas presentan una discontinuidad a lo largo de la interfaz T , esta satisface la ecuación diferencial en las regiones Ω_I, Ω_{II} , esto implica que en ellas la función y sus derivadas (hasta un cierto orden) deberán ser continuas, en otras palabras, el espacio de funciones admisibles se puede tomar -siendo n el orden del operador L -, como:

$$D = \{u = \{u_I, u_{II}\} \mid u_I \in C^n(\Omega_I), u_{II} \in C^n(\Omega_{II})\}$$

Pero en el tratamiento del problema (2.5) se restringe la atención al subespacio $S \subset D$ de las funciones que satisfacen las condiciones de salto en (2.5) y dentro de este subespacio se supone que está la solución del problema. En la Aproximación Unificada se dice que los elementos $u = \{u_I, u_{II}\} \in S$ son "lisos" y que u_{II} es una "extensión lisa" (ó continua) de u_I en tanto que u_I es una "extensión lisa" (ó continua) de u_{II} . La razón es la caracterización que se le da al subespacio S , como se indica en la siguiente.

Definición 2.1. Un subespacio lineal $S \subset D$ se dice que es una selección de lisura si cada $u_I \in D_I$ posee al menos una extensión lisa (ó continua) $u_{II} \in D_{II}$ y cada $u_{II} \in D_{II}$ posee al menos una extensión lisa (ó continua) $u_I \in D_I$.

□

Si se cumple esta definición en un problema dado, se comprueba que se está trabajando dentro del espacio de funciones "apropiado" respecto a las condiciones de salto del problema. En otras palabras, viendo al problema (2.5) como dos problemas con valores en la frontera, la definición anterior es equivalente al hecho de que exista al menos una

solución (pero pueden existir una infinidad) para el problema (ver (2.5)):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u_I &= f && \text{en } \Omega_I \\ u_I &= \beta_I/\alpha_I + \alpha_I/\alpha_I u_I && \text{en } \Gamma \quad (\alpha_I \neq 0) \\ \partial u_I/\partial n &= \beta_I/\beta_I + \beta_I/\beta_I \partial u_I/\partial n && \text{en } \Gamma \quad (\beta_I \neq 0) \end{aligned}$$

y para el problema

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u_{II} &= f && \text{en } \Omega_{II} \\ u_{II} &= \beta_{II}/\alpha_{II} + \alpha_{II}/\alpha_{II} u_{II} && \text{en } \Gamma \quad (\alpha_{II} \neq 0) \\ \partial u_{II}/\partial n &= \beta_{II}/\beta_{II} + \beta_{II}/\beta_{II} \partial u_{II}/\partial n && \text{en } \Gamma \quad (\beta_{II} \neq 0) \end{aligned}$$

soluciones a las que posteriormente se les va a imponer el resto de condiciones de frontera $\beta_I u_I = g_I$ y $\beta_{II} u_{II} = g_{II}$ respectivamente, y en el caso de que (2.5) sea un problema bien planteado, se determinarán soluciones únicas u_I y u_{II} tales que $u = \{u_I, u_{II}\}$ es la solución del problema (2.5).

Para lograr una descomposición canónica en este tipo de problemas, es necesario definir un complemento algebraico "apropiado" para S , esto es, un subespacio $M \subset D$ tal que por principio de cuentas $D = S + M$. Para esto se introduce un mapeo $\bar{\sigma}: D \rightarrow D$ definido para cada $u \in D$ en la forma:

$$\bar{\sigma}u = \{u_I, -u_{II}\}$$

y que tiene las siguientes propiedades:

$$\bar{\sigma} \cdot \bar{\sigma} = \bar{\sigma}^2 = 1$$

$$\langle Ru, v \rangle = \langle R\bar{\sigma}u, \bar{\sigma}v \rangle$$

$$N_R = \bar{\sigma}(N_{R^*}), \quad N_{R^*} = \bar{\sigma}(N_R)$$

Tómese a M como la imagen de S al aplicarle $\bar{\sigma}: D \rightarrow D$:

$$M = \tau(S)$$

Por definición, es claro que si S es una relación de ligadura M también lo es. Pero hay algo más importante que esto. Sea

$$u = \{\mu_x, \mu_x\} \in D$$

y tomase $\{\mu_x', \mu_x'\} \in D$ tal que $\{\mu_x, \mu_x'\} \in S$ y $\{\mu_x, \mu_x'\} \in S$, i.e., μ_x' es una extensión continua de μ_x y μ_x' es una extensión continua de μ_x . Es obvio que

$$\begin{aligned} \bar{u} = \{\mu_x, \mu_x'\} &= \frac{1}{2} \{\mu_x + \mu_x', \mu_x + \mu_x'\} \\ &+ \frac{1}{2} \{\mu_x - \mu_x', \mu_x - \mu_x'\} \end{aligned}$$

Se define al promedio de u y u' como

$$\bar{u} = \frac{1}{2} (u + u') = \frac{1}{2} \{\mu_x' + \mu_x, \mu_x' + \mu_x\}$$

y al salto de u respecto a u' como

$$[u] = u' - u = \{\mu_x' - \mu_x, \mu_x' - \mu_x\}$$

$$\text{Con esta designación: } u = \bar{u} - \frac{1}{2} [u] \quad (2.6)$$

Es claro -por propiedades de los subespacios lineales-, que:

$$\{\mu_x, \mu_x\} \in S \text{ y } \{\mu_x, \mu_x'\} \in S \Rightarrow \bar{u} \in S$$

y teniendo en cuenta que $\{\mu_x', \mu_x'\} \in S$ y $\{-\mu_x, -\mu_x'\} \in S$ entonces:

$$\tau\{\mu_x', \mu_x'\} = \{\mu_x', -\mu_x'\} \in M$$

$$\tau\{-\mu_x, -\mu_x'\} = \{-\mu_x, \mu_x'\} \in M$$

Dado que $M \subset D$ es también un subespacio lineal, entonces

$$\{\mu'_1, -\mu'_2\} + \{-\mu'_1, \mu'_2\} \in M$$

$$\Rightarrow \{\mu'_1 - \mu'_2, \mu'_2 - \mu'_1\} = \{u\} \in M$$

$$\therefore \forall u \in D \exists_n \hat{u} \in S \text{ y } [u] \in M \quad \exists \mu = \hat{u} - \frac{1}{2}[u]$$

En otras palabras, cuando S es una relación de ligera y $M = \mathcal{L}(S)$ entonces

$$D = S + M$$

Como se dijo anteriormente, se está buscando una descomposición canónica del espacio de funciones D tal que esta sea una fórmula de Green abstracta para \hat{P} respecto a R . Por lo que se acaba de ver y por analogía con el tratamiento a problemas en dominios continuos, es obvio que se tienen que establecer parejas de subespacios $\{S_1, S_2\}$, $\{M_1, M_2\}$ que cumplan con los requisitos de la Definición 1.4, esto es que

$$D = S_1 + M_1 = S_2 + M_2 \quad (2.7)$$

y que sean los núcleos de los operadores que descomponen a R y de los conjugados de estos, lo que significa que todo elemento $u \in D$ se puede expresar en las formas equivalentes

$$u = \mu_1 - \nu_1 = \mu_2 - \nu_2 \quad (2.8)$$

donde $\mu_1 \in S_1$, $\nu_1 \in M_1$, $\mu_2 \in S_2$ y $\nu_2 \in M_2$. Se establecen ahora las condiciones necesarias sobre $\{S_1, S_2\}$, $\{M_1, M_2\}$.

Definición 2.2. El par $\{S_1, S_2\}$ de relaciones de ligera se dice que es conjugado, conjugado regular o conjugado completamente regular si:

(i). $\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall u \in S_1 \quad \text{y} \quad \forall v \in S_2.$

(ii). Si además de (i) se cumple que $S_1 \supset N_R$, $S_2 \supset N_{R^*}$.

(iii). Si se cumplen (i), (ii) y además

$$\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall v \in S_2 \Rightarrow u \in S_1$$

y

$$\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall u \in S_1 \Rightarrow v \in S_2$$

□

Observación. Si $M_1 = \bar{\tau}(S_1)$, $M_2 = \bar{\tau}(S_2)$, entonces se puede demostrar que si $\{S_1, S_2\}$ es un par de relaciones de li-sura conjugado regular, el par $\{M_1, M_2\}$ también lo será.

Una vez definidas las propiedades que deben tener los sub-espacios $\{S_1, S_2\}$, $\{M_1, M_2\}$, es posible ahora establecer - como en dominios continuos -, cuando estos pares son una fórmula de Green abstracta para R y como se relacionan con los núles de los opera-dores que lo descomponen. Esto se hace en el siguiente

Teorema 2.1. Sean $P: D \rightarrow D^*$, $B: D \rightarrow D^*$, $Q: D \rightarrow D^*$ y $C: D \rightarrow D^*$ operadores. Supóngase que

(a). $P=B$ y $Q=C$ son adjuntos formales.

(b). $R = P - B - (Q - C)^*$.

(c). $\{S_1, S_2\}$ es un par de relaciones de li-sura conjugado regular para R .

Entonces:

(i). Los pares $\{S_1, S_2\}$, $\{M_1, M_2\}$ constituyen una fórmula de Green abstracta en un sentido "fuente" para $P-B$.

(ii). La ecuación

$$P-B-J = Q^* - C^* - K^*$$

con $J: D \rightarrow D^*$, $K: D \rightarrow D^*$ operadores, es una fórmula de Green "fuerte" para $P-B$ si

$$\langle Ju, v \rangle = -\frac{1}{2} \langle R[u]_1, \hat{v}_2 \rangle \quad (2.9)$$

$$\langle K^*u, v \rangle = \frac{1}{2} \langle R\hat{u}_1, [v]_2 \rangle$$

donde $\hat{u}_1 = \frac{1}{2}(u_x + u_x^*)$ $\hat{u}_2 = \frac{1}{2}(u_x + u_x^*)$ (2.10)

$$[u]_1 = u_x^* - u_x \quad [u]_2 = u_x^* - u_x$$

(iii). $S_1 = N_J$ $S_2 = N_K$

$$M_1 = N_{K^*} \quad M_2 = N_{J^*}$$

□

Corolario 2.1. Bajo las suposiciones (a), (b) y (c) se encuentra que si $R = R_I + R_{II}$:

$$\langle Ju, v \rangle = -\langle R_{II}[u]_1, \hat{v}_2 \rangle \quad (2.11)a.$$

$$\langle K^*u, v \rangle = \langle R_{II}\hat{u}_1, [v]_2 \rangle$$

donde $[u]_1, [v]_2$ están dados como los negativos de (2.10). O bien

$$\langle Ju, v \rangle = -\langle R_I[u]_1, \hat{v}_2 \rangle \quad (2.11)b.$$

$$\langle K^*u, v \rangle = \langle R_I\hat{u}_1, [v]_2 \rangle$$

donde $\hat{u}_1, \hat{u}_2, [u]_1, [u]_2$ están dados en (2.10).

□

(La demostración se encuentra en Demera 1985 I).

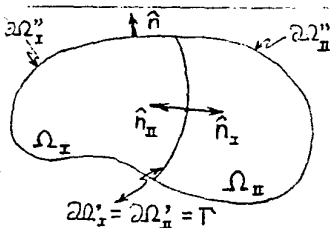


fig 2.3.

El teorema anterior proporciona los elementos para obtener fórmulas de Green "fuertes" sobre dominios discontinuos. Un ejemplo ayudará a entender como funciona esta metodología.

Se tiene el problema con valores en la frontera y saltos prescritos en alguna interfaz:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= \nabla \cdot (A \nabla u) + B \cdot \nabla u + cu = f & \text{en } \Omega = \Omega_I \cup \Omega_{II} \\ u &= g & \text{en } \partial\Omega = \partial\Omega_I'' \cup \partial\Omega_{II}'' \\ [u]_{\Gamma} &= j_1 & \text{en } \Gamma \\ [\partial u / \partial n]_{\Gamma} &= j_2 & \text{en } \Gamma \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde $[\cdot]_{\Gamma}$ se utiliza para denotar el salto de u y $\partial u / \partial n$ en la interfaz Γ , que en general son de la forma:

$$[u]_{\Gamma} = \alpha_{II} u_{II}(\Gamma) - \alpha_I u_I(\Gamma) \quad \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right]_{\Gamma} = \beta_{II} \frac{\partial u_{II}}{\partial n}(\Gamma) - \beta_I \frac{\partial u_I}{\partial n}(\Gamma)$$

y donde \hat{n} puede ser cualquiera entre \hat{n}_I y \hat{n}_{II} (fig. 2.3). Por ahora se supondrá que $\alpha_I = \alpha_{II} = \beta_I = \beta_{II} = 1$. Se define nuevamente al operador P en la forma:

$$\begin{aligned} \langle Pu, v \rangle &= \int_{\Omega} v \mathcal{L}u \, dV = \int_{\Omega_I} v \mathcal{L}u \, dV + \int_{\Omega_{II}} v \mathcal{L}u \, dV \\ &= \int_{\Omega_I} v (\nabla \cdot (A \nabla u) + B \cdot \nabla u + cu) \, dV + \int_{\Omega_{II}} v (\nabla \cdot (A \nabla u) + B \cdot \nabla u + cu) \, dV \end{aligned}$$

Integrando por partes sobre cada subregión y agrupando adecuadamente se encuentra que:

$$\begin{aligned} \langle Pu, v \rangle &= \int_{\Omega_I} u \mathcal{L}^* v \, dV + \int_{\Omega_{II}} u \mathcal{L}^* v \, dV + \int_{\partial\Omega_I''} \{ u (A \frac{\partial v}{\partial n}) - v (A \frac{\partial u}{\partial n}) + uv B \cdot \hat{n} \} \, ds \\ &\quad + \int_{\partial\Omega_{II}''} \{ u (A \frac{\partial v}{\partial n}) - v (A \frac{\partial u}{\partial n}) + uv B \cdot \hat{n} \} \, ds + \end{aligned}$$

$$+ \int_{\partial\Omega_I'} \{u(A\nabla v) - v(A\nabla u) + uvB\} \cdot \hat{n}_I ds$$

$$+ \int_{\partial\Omega_I''} \{u(A\nabla v) - v(A\nabla u) + uvB\} \cdot \hat{n}_I ds$$

donde $L^*v = \nabla \cdot (A\nabla v) - B \cdot \nabla v + Cv$, y se ha supuesto que A , B y C son funciones con las propiedades que permiten hacer lo anterior. Como en dominios continuos, de las integrales sobre $\partial\Omega_I'$ y $\partial\Omega_I''$ se pueden obtener los operadores B y C^* , en este caso:

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial\Omega} [u] (A \frac{\partial v}{\partial n} + v B \cdot \hat{n}) ds$$

$$\langle C^*u, v \rangle = \int_{\partial\Omega} [v] (A \frac{\partial u}{\partial n}) ds$$

En consecuencia, el residuo R está dado por:

$$\langle Ru, v \rangle = \langle R_I u, v \rangle + \langle R_{II} u, v \rangle \quad (2.13)$$

$$= \int_{\partial\Omega_I'} \{u(A\nabla v) - v(A\nabla u) + uvB\} \cdot \hat{n}_I ds + \int_{\partial\Omega_I''} \{u(A\nabla v) - v(A\nabla u) + uvB\} \cdot \hat{n}_I ds$$

Si $\hat{n}_I = -\hat{n}_{II}$, se toma como normal común a \hat{n}_{II} en ambas integrales, haciendo $T = \partial\Omega_I' = \partial\Omega_{II}$ y denotando (u_I, v_I) , (u_{II}, v_{II}) a (u, v) sobre Ω_I y Ω_{II} respectivamente, se tendrá que:

$$\langle Ru, v \rangle = \int_T \{u_{II} (A \frac{\partial v_I}{\partial n} + v_I B \cdot \hat{n}_{II}) - u_I (A \frac{\partial v_{II}}{\partial n} + v_{II} B \cdot \hat{n}_{II}) - A (v_I \frac{\partial u_{II}}{\partial n} - v_{II} \frac{\partial u_I}{\partial n})\} ds$$

Conociendo R es posible determinar las relaciones de laura S_1 y S_2 aplicando (i) de la Definición 2.2:

$$\langle Ru, v \rangle = 0 \quad \forall u \in S_1 \text{ y } v \in S_2$$

En este caso el residual R se anula si

$$u_I = u_{II} \quad \frac{\partial u_{II}}{\partial n} = \frac{\partial u_I}{\partial n}$$

$$v_I = v_{II} \quad A \frac{\partial v_I}{\partial n} + v_I B \cdot \hat{n}_{II} = A \frac{\partial v_{II}}{\partial n} + v_{II} B \cdot \hat{n}_{II}$$

entonces

$$S_1 = \{u \in D \mid u_I = u_{II}, \frac{\partial u_I}{\partial n_I} = \frac{\partial u_{II}}{\partial n_{II}}, \text{ en } \Gamma\}$$

$$S_2 = \{v \in D \mid v_I = v_{II}, A \frac{\partial v_I}{\partial n_I} + v_I B \cdot \hat{n}_I = A \frac{\partial v_{II}}{\partial n_{II}} + v_{II} B \cdot \hat{n}_{II}, \text{ en } \Gamma\}$$

Teniendo en cuenta que $M_1 = \bar{\sigma}(S_1)$, $M_2 = \bar{\sigma}(S_2)$:

$$M_1 = \{u \in D \mid u_I = -u_{II}, \frac{\partial u_I}{\partial n_I} = -\frac{\partial u_{II}}{\partial n_{II}}, \text{ en } \Gamma\}$$

$$M_2 = \{v \in D \mid v_I = -v_{II}, A \frac{\partial v_I}{\partial n_I} + v_I B \cdot \hat{n}_I = -A \frac{\partial v_{II}}{\partial n_{II}} - v_{II} B \cdot \hat{n}_{II}, \text{ en } \Gamma\}$$

y en este caso se comprueba fácilmente lo que se apunta en (iii) del Teorema 2.1, esto es:

$$S_1 = N_J = \{u \in D \mid [u]_\Gamma = \left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma = 0\}$$

$$S_2 = N_K = \{u \in D \mid [u]_\Gamma = \left[A \frac{\partial u}{\partial n} + u B \cdot \hat{n}\right]_\Gamma = 0\}$$

(2.14)

$$M_2 = N_{J^*} = \{u \in D \mid \dot{u}_\Gamma = A \left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma + \dot{u}_\Gamma B \cdot \hat{n} = 0\}$$

$$M_1 = N_{K^*} = \{u \in D \mid \dot{u}_\Gamma = \left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma = 0\}$$

donde: $[u]_\Gamma = u_{II}(\Gamma) - u_I(\Gamma)$, $\left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma = \frac{\partial u_{II}}{\partial n_{II}}(\Gamma) - \frac{\partial u_I}{\partial n_I}(\Gamma)$

$$\dot{u}_\Gamma = \frac{1}{2}(u_{II}(\Gamma) + u_I(\Gamma)), \quad \left[\frac{\partial u}{\partial n}\right]_\Gamma = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_{II}}{\partial n_{II}}(\Gamma) + \frac{\partial u_I}{\partial n_I}(\Gamma)\right)$$

Para determinar J y K^* se pueden utilizar las relaciones (2.9) ó (2.11). Tomando (2.11)b.:

$$\langle J u, v \rangle = -\langle R_I [u]_1, \dot{v}_2 \rangle$$

$$= -\int_{\partial \Omega_2} \{ [u]_1 (A \frac{\partial \dot{v}_2}{\partial n_2}) - \dot{v}_2 (A \frac{\partial [u]_1}{\partial n_1}) + [u]_1 \dot{v}_2 B \cdot \hat{n}_1 \} ds$$

En este caso se toma $[u]_1 = u'_I - u_I$; $\dot{u}_I \in \{u'_I, u_I\} \in S_1$

se tendrá que $u_i = u'_i$, entonces:

$$[u]_1 = u_{\pi} - u_i = [u]_r$$

Aquí $\hat{v}_z = \frac{1}{2} (v'_z + v_z)$, si $\{v_z, v'_z\} \in S_2 \Rightarrow v_z = v'_z$, entonces:

$$\hat{v}_z = \frac{1}{2} (v_z + v_z) = \hat{v}_r$$

Por lo tanto es inmediato que haciendo $\hat{n} = n_x$ y $\Gamma = \partial\Omega'_x$:

$$\langle Ju, v \rangle = - \int_{\Gamma} \{ [u]_r (A \frac{\partial v}{\partial n})_r - \hat{v}_r (A \frac{\partial [u]_r}{\partial n})_r + [u]_r \hat{v}_r B \cdot \hat{n} \} ds$$

Del mismo modo:

$$\langle K^*u, v \rangle = \int_{\Gamma} \{ \hat{u}_r (A \frac{\partial v}{\partial n})_r - [v]_r (A \frac{\partial \hat{u}_r}{\partial n})_r + \hat{u}_r [v]_r B \cdot \hat{n} \} ds$$

Si se utilizan las relaciones (2.11)a

$$\langle Ju, v \rangle = - \langle R_{\pi} [u]_1, \hat{v}_z \rangle$$

$$= - \int_{\partial\Omega'_x} \{ [u]_1 (A \frac{\partial \hat{v}_z}{\partial n})_r - \hat{v}_z (A \frac{\partial [u]_1}{\partial n})_r + [u]_1 \hat{v}_z B \cdot \hat{n}_{\pi} \} ds$$

Entonces: En este caso: $[u]_1 = u_{\pi} - u'_i$, si $\{u'_i, u_{\pi}\} \in S_2 \Rightarrow u'_i = u_{\pi}$

$$[u]_1 = u_{\pi} - u_{\pi} = - [u]_r$$

y si $\hat{v}_z = \frac{1}{2} (v'_z + v_z)$ y $\{v_z, v'_z\} \in S_2 \Rightarrow v_z = v'_z$, entonces:

$$\hat{v}_z = \frac{1}{2} (v_z + v_z) = \hat{v}_r$$

Haciendo $n = -\hat{n}_{\pi}$ y $\Gamma = \partial\Omega'_{\pi}$, se obtiene que:

$$\langle Ju, v \rangle = - \int_{\Gamma} \{ [u]_r (A \frac{\partial v}{\partial n})_r - \hat{v}_r (A \frac{\partial [u]_r}{\partial n})_r + [u]_r \hat{v}_r B \cdot \hat{n} \} ds$$

$$\langle K^*u, v \rangle = \int_{\Gamma} \{ \hat{u}_r (A \frac{\partial v}{\partial n})_r - [v]_r (A \frac{\partial \hat{u}_r}{\partial n})_r + \hat{u}_r [v]_r B \cdot \hat{n} \} ds$$

Finalmente hay que apuntar varias cosas.

- (a). En caso de utilizar las ecuaciones (2.9) para determinar J y K^* , se deben emplear simultáneamente los dos procesos antes citados.
- (b). Por convención, se toma como normal \hat{n} en las integrales de superficie para J y K^* a aquella que apunta del elemento "marcado" con número menor (Ω_I) hacia el elemento "marcado" con un número mayor (Ω_{II}).
- (c). En este problema es fácil comprobar que $S_I = S_{II}$. Sin embargo las ecuaciones (2.9) y (2.11) son aplicables al caso general $S_I \neq S_{II}$, lo que sucede en este problema si se toma a B discontinuo sobre T .
- (d). Es posible evitarse en cierta forma la integración por partes sobre el dominio discontinuo. Dado un problema del tipo (2.12), se puede inicialmente obtener la fórmula de Green "fuerte" para el dominio continuo Ω utilizando la metodología dada. Una vez determinados P , B , Q^* y C^* , el residuo R que se tiene en el dominio discontinuo, i.e. $\hat{R} = (P-B) - (Q^* - C^*)$, se toma como la suma de dos operadores R_I, R_{II} : $R = R_I + R_{II}$, definidos en la forma:

$$\langle R_I u_I, v_I \rangle = \langle R u_I, v_I \rangle \quad \langle R_{II} u_{II}, v_{II} \rangle = \langle R u_{II}, v_{II} \rangle$$

donde R es el residuo que se tiene en el problema sobre el dominio continuo, i.e. $R = B - C^*$, pero la integración se efectúa sobre la interfaz T . Dados R_I y R_{II} en esta forma es posible determinar J y K^* utilizando (2.9) ó (2.11).

- (e). Para condiciones de salto de u y sus derivadas sobre T del tipo general:

$$[u]_T = \alpha_{II} u_{II}(T) - \alpha_I u_I(T), \quad \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right]_T = \beta_{II} \frac{\partial u}{\partial n}(T) - \beta_I \frac{\partial u}{\partial n}(T), \dots \dots \text{etc.}$$

es necesario definir al operador P en una forma especial tal que estas condiciones de salto aparezcan en forma natural dentro del desarrollo. Sin embargo, se puede evitar el definir a P en una forma diferente a la utilizada hasta ahora, dando en forma apropiada las relaciones de lisura del problema.

Al igual que para dominios continuos, el nulo de J, N_T , está determinado por las funciones que anulan a las condiciones de salto del problema. Si $N_T = S_1$, entonces:

$$S_1 = \{u \in D \mid \alpha_x u_x = \alpha_x u_x, \beta_x \frac{\partial u_x}{\partial n} = \beta_x \frac{\partial u_x}{\partial n}, \dots \text{ en } T\}$$

Queda por determinar S_2 . Del mismo modo que para dominios continuos, el complemento algebraico puede ser cualquiera, incluso el mismo S_1 , pero puede suceder que con estos $\{S_1, S_2\}$ no se obtenga una fórmula de Green "fuerza". Se tiene entonces que recurrir entonces a la relación (i) de la Definición 2.2. En el problema (2.12), el residual R se anula -teniendo en cuenta S_1 - , i.e.:

$$\langle Ru, v \rangle = \int_{\Gamma} \left\{ \left[\alpha_x / \alpha_x \left(A \frac{\partial v_x}{\partial n} + v_x B \cdot \hat{n} \right) - \left(A \frac{\partial v_x}{\partial n} + v_x B \cdot \hat{n} \right) \right] u_x - \left[v_x \beta_x / \beta_x - v_x \right] A \frac{\partial u_x}{\partial n} \right\} ds = 0$$

si y solo si

$$\alpha_x \left(A \frac{\partial v_x}{\partial n} + v_x B \cdot \hat{n} \right) = \alpha_x \left(A \frac{\partial v_x}{\partial n} + v_x B \cdot \hat{n} \right)$$

$$\beta_x v_x = \beta_x v_x$$

Por lo tanto:

$$S_2 = \{u \in D \mid \beta_x u_x = \beta_x u_x, \alpha_x \left(A \frac{\partial u_x}{\partial n} + u_x B \cdot \hat{n} \right) = \alpha_x \left(A \frac{\partial u_x}{\partial n} + u_x B \cdot \hat{n} \right) \text{ en } T\}$$

y con estas relaciones de lisura se pueden obtener los operadores de salto y promedio J y K^* en la forma antes vista.

- Aplicación de la Aproximación Unificada al problema de Difusión - Advección.

Establecida la metodología para obtener fórmulas de Green generalizadas (ó sobre dominios discontinuos), se procede a obtener una para el problema de Difusión - Advección

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{R_e} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

para a partir de ella obtener esquemas numéricos que proporcionen soluciones aproximadas de este problema.

Como se dejó anteriormente, existen dos formas de aplicar la Aproximación Unificada al problema de difusión - advección, el llamado Tratamiento Completo que consiste en aplicar esta metodología al operador completo, y el así llamado Tratamiento Incompleto que consiste en aplicar esta metodología a una parte del operador antes ó después de aproximar a la derivada Temporal por diferencias finitas.

En este capítulo en su primera sección, se obtienen los esquemas numéricos correspondientes al problema de Difusión - Advección con condiciones de frontera Dirichlet, que dan los tratamientos completo e incompleto del problema, en tanto que en la segunda sección se hace lo mismo para el problema con condiciones de frontera Dirichlet - Neumann.

1. Problema Dirichlet.

- Tratamiento Completo.

Sobre el dominio $\Omega = (0; 1) \times (0; T)$ se tiene la ecuación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{R_e} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (1.1)$$

con las condiciones:

$$u(0, t) = 1$$

$$u(1, t) = 1$$

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

$R = \text{No. de Pedit.}$

Dada una partición uniforme sobre el dominio Ω , se construye la fórmula de Green correspondiente. Por simplicidad, se restringe el tratamiento a una sola de las bandas horizontales de la partición (fig. 1.1); el procedimiento se repite en forma similar para cada una de las bandas, como en un método iterativo.

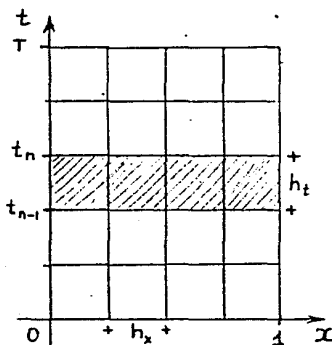


fig. 1.1.

Obtener la fórmula de Green es relativamente simple. Primero se define al operador P en la forma

$$\langle Pu, v \rangle = \int_0^1 \int_{t_{n-1}}^{t_n} v L u \, dx \, dt \quad (1.2)$$

con $L = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ y v elemento de un espacio apropiado de funciones. Se define también al operador adjunto Q^* en la forma:

$$\langle Q^* u, v \rangle = \int_0^1 \int_{t_{n-1}}^{t_n} u L^* v \, dx \, dt \quad (1.3)$$

con L^* operador adjunto de L .

Como P y Q^* deben "pertenecer" a una fórmula de Green, su diferencia deberá ser igual a términos de frontera fácilmente obtenibles mediante la integración por partes de P , y que dentro de la aproximación Unificada se representan mediante operadores, esto es:

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Q^* u, v \rangle = \langle Bu, v \rangle - \langle C^* u, v \rangle - \langle Ru, v \rangle \quad (1.4)$$

donde el operador B contiene a las condiciones de frontera e inicial del problema, el operador C^* contiene a las condiciones de frontera complementarias y final del problema y R es el operador que contiene a

los valores de u y $\frac{\partial u}{\partial x}$ sobre las interfaces. Explícitamente:

$$\langle Bu, v \rangle = - \int_0^1 u(x, t_{n-1}) v(x, t_{n-1}) dx - \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{u(1, t) v(1, t) - u(0, t) v(0, t)\} dt + \frac{1}{\rho c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{u(1, t) \frac{\partial v}{\partial x}(1, t) - u(0, t) \frac{\partial v}{\partial x}(0, t)\} dt \quad (1.5)$$

$$\langle C^*u, v \rangle = - \int_0^1 u(x, t_n) v(x, t_n) dx + \frac{1}{\rho c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{v(1, t) \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) - v(0, t) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t)\} dt$$

Por propiedades de la integral, la integral sobre una partición es igual a la suma de las integrales sobre cada una de las partes, entonces el operador R está dado como la suma

$$\langle Ru, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \langle R_i u, v \rangle \quad (1.6)$$

de los residuos sobre cada interfaz, y cada uno de estos operadores se puede descomponer como:

$$\langle R_i u, v \rangle = \langle R_{i(-)} u, v \rangle + \langle R_{i(+)} u, v \rangle \quad (1.7)$$

donde $R_{i(-)}$ y $R_{i(+)}$ son los términos de frontera que pueden obtenerse al integrar por partes al operador en los elementos adyacentes (derecho e izquierdo respectivamente) a la correspondiente interfaz.

Explícitamente:

$$\langle R_{i(-)} u, v \rangle = \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{u(x_i^-, t) v(x_i^-, t) - \frac{1}{\rho c} [v(x_i^-, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i^-, t) - u(x_i^-, t) \frac{\partial v}{\partial x}(x_i^-, t)]\} dt \quad (a).$$

$$\langle R_{i(+)} u, v \rangle = \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{u(x_i^+, t) v(x_i^+, t) - \frac{1}{\rho c} [v(x_i^+, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x_i^+, t) - u(x_i^+, t) \frac{\partial v}{\partial x}(x_i^+, t)]\} dt \quad (b).$$

Para transformar a la relación (1.4) en una fórmula de Green sobre un dominio discontinuo, es necesario descomponer al operador residual en la diferencia de dos operadores

$$\langle Ru, v \rangle = \langle Ju, v \rangle - \langle Ku^*, v \rangle \quad (1.9)$$

y estos nuevos operadores también se pueden descomponer como la suma de las contribuciones sobre cada interfaz de la partición:

$$\langle Ju, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \langle J_i u, v \rangle \quad (a) \quad (1.10)$$

$$\langle Ku^*, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \langle K_i^* u, v \rangle \quad (b)$$

Entonces la relación:

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Bu, v \rangle - \langle Ju, v \rangle = \langle Qu^*, v \rangle - \langle K^* u, v \rangle \quad (1.11)$$

será una fórmula de Green en el sentido de la Aproximación Unificada si:

$$\langle J_i u, v \rangle = - \langle R_{i-1/2} [u], v \rangle \quad (a) \quad (1.12)$$

$$\langle K_i^* u, v \rangle = \langle R_{i+1/2} \hat{u}, [v] \rangle \quad (b)$$

donde $[u] = u(x_i^+, t) - u(x_i^-, t)$ y $\hat{u} = \frac{1}{2} (u(x_i^+, t) + u(x_i^-, t))$ son los saltos y los promedios de la función en la i -ésima interfaz. Por lo tanto en este caso:

$$\langle Ju, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \langle J_i u, v \rangle = - \sum_{i=1}^{I-1} \int_{t_{i-1/2}}^{t_{i+1/2}} \{ \hat{v} [u] - \frac{1}{\rho_0} (\hat{v} \frac{\partial u}{\partial x} - [u] \frac{\partial \hat{v}}{\partial x}) \} ds \quad (a) \quad (1.13)$$

$$\langle K^* u, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \langle K_i^* u, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \int_{t_{i-1/2}}^{t_{i+1/2}} \{ \hat{u} [v] - \frac{1}{\rho_0} ([v] \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} - \hat{u} \frac{\partial [v]}{\partial x}) \} ds \quad (b)$$

Una vez dada la fórmula de Green, es posible obtener dos formas variacionales equivalentes al problema. La primera es:

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Bu, v \rangle - \langle Ju, v \rangle = \langle f, v \rangle - \langle g, v \rangle - \langle j, v \rangle \quad (1.14)$$

donde las funciones de δ^o lado derecho de esta igualdad están definidas en la forma

$$\langle Pu, v \rangle = \langle f, v \rangle \quad (1.15)$$

funcional que contiene al valor del operador L aplicado a la solución u ,

$$\langle Bu, v \rangle = \langle g, v \rangle \quad (1.16)$$

funcional que contiene a los valores de las condiciones inicial y de frontera del problema, y

$$\langle Ju, v \rangle = \langle j, v \rangle \quad (1.17)$$

funcional que contiene a los valores de los saltos de la solución del problema y su derivada en las interfronteras. La segunda forma variacional asociada al problema es:

$$\langle Q^*u, v \rangle = \langle C^*u, v \rangle - \langle K^*u, v \rangle = \langle f, v \rangle - \langle g, v \rangle - \langle j, v \rangle \quad (1.18)$$

La pregunta ahora es, ¿Cuál es la formulación variacional apropiada para el problema? La respuesta la darán las relaciones de ligadura del problema. En este caso, la solución satisface una ecuación diferencial parcial de segundo orden, entonces al menos u y $\frac{\partial u}{\partial x}$ deben ser continuas en Ω y por lo tanto en las interfronteras de la partición. Esto se expresa en la forma:

$$u(x_i^+, t) = u(x_i^-, t) \quad \text{y} \quad \frac{\partial u}{\partial x}(x_i^+, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(x_i^-, t), \quad i=1, 2, \dots, I-1. \quad (1.19)$$

En otras palabras, las relaciones de ligadura son en este caso requerimientos de continuidad. Por lo tanto, el operador J se anula y el operador K^* contendrá a los valores de u y $\frac{\partial u}{\partial x}$ en las interfronteras, lo que significa que la información buscada se encuentra en la forma variacional (1.18).

Para este problema, (1.18) tiene la siguiente forma:

$$\int_0^1 \int_{t_{n-1}}^{t_n} u \mathcal{L}^* v \, dx \, dt + \int_0^1 u(x, t_n) v(x, t_n) \, dx - \frac{1}{2} \rho_0 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{v(u, t) \left[\frac{\partial u}{\partial x}(a, t) - v(a, t) \frac{\partial u}{\partial x}(a, t) \right] dt - \sum_{i=1}^{I-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{u(x_i, t) [v]_{x_i} - \frac{1}{2} \rho_0 \left([v]_{x_i} \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t) - u(x_i, t) \left[\frac{\partial v}{\partial x} \right]_{x_i} \right) \} dt \quad (1.20)$$

$$= \int_0^1 u(x, t_{n-1}) v(x, t_{n-1}) \, dx - \frac{1}{2} \rho_0 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{\partial v}{\partial x}(1, t) - \frac{\partial v}{\partial x}(a, t) \right) dt$$

En la discusión precedente no se les ha hecho restricción alguna sobre la función de peso v , la solución del problema satisface la relación (1.20) para toda función v (Gienwa 1985 I). Esto permite seleccionar de entre toda la información contenida en (1.20) a aquella que se desea, eligiendo adecuadamente a las funciones de peso v . Por ahora sólo se busca información de la solución a lo largo de las interfaces de la partición, lo que se logra construyendo funciones de peso con soluciones de la ecuación adjunta homogénea, i.e.:

$$\mathcal{L}^* v = -\frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{1}{2} \rho_0 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \quad (1.21)$$

y que sean continuas en la dirección x .

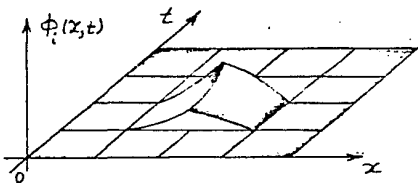


Fig. 1.2.

Finalmente, se puede simplificar la estructura del sistema de ecuaciones asustante escogiendo las funciones de peso con soporte local sobre dos elementos (Fig. 1.2). Con la elección de este conjunto de funciones de peso $\{\phi_i\}_{i=1}^{I-1}$, (1.20) se transforma en el sistema

tridiagonal:

$$\int_0^1 u(x, t_n) \phi_i(x, t_n) \, dx - \frac{1}{2} \rho_0 \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(x_r, t) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{x_r} dt \quad (1.22)$$

$$= \int_0^1 u(x, t_{n-1}) \phi_i(x, t_{n-1}) \, dx - \frac{1}{2} \rho_0 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x}(1, t) - \frac{\partial \phi_i}{\partial x}(a, t) \right) dt$$

$$\text{con } \left[\frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right]_{x=0} = \left[\frac{\partial \phi_{i-1}}{\partial x} \right]_{x=1} = 0, \quad i=1, 2, \dots, I-1.$$

Cuando se aplica la Aproximación Unificada a ecuaciones diferenciales ordinarias, el sistema de ecuaciones que se obtiene es finito y completo y por lo tanto, la formulación variacional equivalente además de ser una condición que satisface necesariamente la solución del problema, es al mismo tiempo un esquema numérico, que al resolverse dará valores exactos de esta. Pero en el caso de ecuaciones diferenciales parciales, el sistema de ecuaciones que se obtiene y que contiene también a la solución del problema no es completo, y no se puede completar con un número finito adicional de funciones de peso que pertenezcan al mismo subespacio. Sin embargo, haciendo algunas aproximaciones se puede obtener un esquema numérico que proporcione información de la solución en los nodos de la partición; aquí se propone hacer algo muy simple, aproximar a la solución linealmente entre los nodos. En este caso:

$$u(x, t_r) \cong \frac{1}{h_x} \{u(x_{i+1}, t_r)(x_i - x) + u(x_i, t_r)(x - x_{i-1})\}, \quad r=1, 2, \dots, N. \quad (1.23)$$

$$u(x_r, t) \cong \frac{1}{h_t} \{u(x_r, t_n)(t - t_{n-1}) + u(x_r, t_{n-1})(t_n - t)\}, \quad r=1, 2, \dots, I-1$$

Con esta aproximación el sistema (1.22) se transforma en un sistema tridiagonal y completo, fácil de resolver (ver Apéndice A) y que dará valores aproximados de la solución en los nodos:

$$\begin{aligned} & \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x_i - x) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_i} dt \right\} u_{i-1}^n \\ & + \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) \varphi_i(x, t_n) dx + \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_i} dt \right\} u_i^n \\ & + \left\{ \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_{i+1}} dt \right\} u_{i+1}^n \\ & = \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x_i - x) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_{i-1}} dt \right\} u_{i-1}^{n-1} \\ & + \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx + \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1} - x) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_i} dt \right\} u_i^{n-1} \\ & + \left\{ \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_{i+1}} dt \right\} u_{i+1}^{n-1} - \frac{h_x}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{d\varphi_i}{dx}(1, t) - \frac{d\varphi_i}{dx}(0, t) \right] dt \end{aligned} \quad (1.24)$$

con $\left[\frac{d^i u_i}{dx^i} \right]_{x=x_0} = \left[\frac{d^i u_{i-1}}{dx^i} \right]_{x=x_1} = 0$, $\alpha = h_1/h_n$ y $i, n = 1, 2, \dots, I-1, N$.

Agrupando en una matriz, el sistema tiene la forma:

$$\begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & & & & & & \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & & & \\ & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & & \\ & & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & \\ & & & \dots & & & & \\ 0 & & & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & \\ & & & & \beta_1 & \beta_2 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{I-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & & & & & & \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & & & \\ & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & & \\ & & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & \\ & & & \dots & & & & \\ 0 & & & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & \\ & & & & \beta_1 & \beta_2 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{I-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \beta_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_x \end{bmatrix} \quad (1.25)$$

El comportamiento estable ó inestable de (1.24) dependerá de las funciones de peso $\{\beta_i\}_{i=1}^{I-1}$ que se elijan. Estas - como se dijo anteriormente -, se construyen con soluciones de la ecuación adjunta homogénea (1.21). Usando el método de Separación de Variables fácilmente se obtiene la solución:

$$v(x, t) = e^{-\frac{K}{2}x} (A e^{\frac{A}{2}x} + B e^{-\frac{A}{2}x}) e^{-Kt + t_0} \quad (1.26)$$

con $A = \sqrt{\beta_0^2 + 4K\beta_0}$; A, B, t_0 constantes de integración y K constante de separación.

Escogiendo las funciones de peso con soporte local sobre dos elementos, normalizadas y continuas en la dirección x , se fijan los valores de las constantes de integración quedando libre el valor de la constante de separación γ , dependiendo del valor de esta, las funciones de peso tienen diferente aspecto.

Un sencillo análisis de estabilidad ó bien, argumentando que si la solución de la ecuación original es decreciente en el tiempo, la solución de la adjunta deberá ser creciente en el tiempo, indicará que la constante de separación debe ser negativa (ver apéndice B). Dentro de este rango se tienen tres posibilidades para la función de peso (las demás posibilidades se encuentran en el apéndice D):

o Caso $\Delta^2 > 0$, ($-\frac{P_2}{4} < K < 0$).

$$\varphi_j^n(x,t) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{P_2}{2}(x-x_j)}}{\sinh \frac{\Delta}{2} h_x} \sinh \frac{\Delta}{2} (x-x_{j+1}) e^{-K(t-t_n)} & , (x,t) \in \bar{\Omega}_j^n \\ \frac{e^{-\frac{P_2}{2}(x-x_j)}}{\sinh \frac{\Delta}{2} h_x} \sinh \frac{\Delta}{2} (x_{j+1}-x) e^{-K(t-t_n)} & , (x,t) \in \bar{\Omega}_{j+1}^n \\ 0 & , (x,t) \notin \bar{\Omega}_j^n \cup \bar{\Omega}_{j+1}^n \end{cases} \quad (1.27)$$

o Caso $\Delta^2 = 0$, ($K = -\frac{P_2}{4}$).

$$\varphi_j^n(x,t) = \begin{cases} \frac{1}{h_x} (x-x_{j+1}) e^{-\frac{P_2}{2}(x-x_j)} e^{\frac{P_2}{2}(t-t_n)} & , (x,t) \in \bar{\Omega}_j^n \\ \frac{1}{h_x} (x_{j+1}-x) e^{-\frac{P_2}{2}(x-x_j)} e^{\frac{P_2}{2}(t-t_n)} & , (x,t) \in \bar{\Omega}_{j+1}^n \\ 0 & , (x,t) \notin \bar{\Omega}_j^n \cup \bar{\Omega}_{j+1}^n \end{cases} \quad (1.28)$$

o Caso $\Delta^2 < 0$, ($K < -\frac{P_2}{4}$).

$$\varphi_j^n(x,t) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{P_2}{2}(x-x_j)}}{\sen \frac{\Delta}{2} h_x} \sen \frac{\Delta}{2} (x-x_{j+1}) e^{-K(t-t_n)} & , (x,t) \in \bar{\Omega}_j^n \\ \frac{e^{-\frac{P_2}{2}(x-x_j)}}{\sen \frac{\Delta}{2} h_x} \sen \frac{\Delta}{2} (x_{j+1}-x) e^{-K(t-t_n)} & , (x,t) \in \bar{\Omega}_{j+1}^n \\ 0 & ; (x,t) \notin \bar{\Omega}_j^n \cup \bar{\Omega}_{j+1}^n \end{cases} \quad (1.29)$$

donde $\bar{\Omega}_j^n = [x_{j+1}; x_j] \times [t_{n-1}; t_n]$ y $j = 1, 2, \dots, I-1$. Para calcular los valores de los coeficientes de sistema (1.24), es necesario evaluar los saltos de las derivadas de las funciones de peso en las interfronteras, éstos serán en cada caso:

o Caso $\Delta^2 > 0$, ($-P_2/4 < K < 0$).

$$\left[\frac{\partial \psi_i^n}{\partial x} \right]_{x_i} = \begin{cases} \Delta/2 e^{\frac{P_2}{2} h_x} e^{-K(t-t_n)} / \operatorname{sech} \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j-1 \\ -\Delta \operatorname{cosh} \frac{\Delta}{2} h_x e^{-K(t-t_n)} / \operatorname{sech} \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j \\ \Delta/2 e^{-\frac{P_2}{2} h_x} e^{-K(t-t_n)} / \operatorname{sech} \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j+1 \\ 0 & , |i-j| \geq 2 \end{cases} \quad (1.30)$$

o Caso $\Delta^2 = 0$, ($K = -P_2/4$).

$$\left[\frac{\partial \psi_i^n}{\partial x} \right]_{x_i} = \begin{cases} 1/h_x e^{\frac{P_2}{2} h_x} e^{\frac{P_2}{4}(t-t_n)} & , i=j-1 \\ -2/h_x e^{\frac{P_2}{4}(t-t_n)} & , i=j \\ 1/h_x e^{-\frac{P_2}{2} h_x} e^{\frac{P_2}{4}(t-t_n)} & , i=j+1 \\ 0 & , |i-j| \geq 2 \end{cases} \quad (1.31)$$

o Caso $\Delta^2 < 0$, ($K < -P_2/4$).

$$\left[\frac{\partial \psi_i^n}{\partial x} \right]_{x_i} = \begin{cases} \Delta/2 e^{\frac{P_2}{2} h_x} e^{-K(t-t_n)} / \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j-1 \\ -\Delta \cos \frac{\Delta}{2} h_x e^{-K(t-t_n)} / \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j \\ \Delta/2 e^{-\frac{P_2}{2} h_x} e^{-K(t-t_n)} / \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j+1 \\ 0 & , |i-j| \geq 2 \end{cases} \quad (1.32)$$

Con estos valores y evaluando las integrales involucradas, los coeficientes del sistema (1.24) serán en cada caso:

Case $\Delta^2 > 0$, $(-r_2/4 < k < 0)$.

$$p_1 = \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{-r_1 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{r_1 h_x}) \right\} \\ - \Delta / 2 R_0 K^2 e^{\frac{r_2 h_x}{2}} (e^{k h_t} - k h_t - 1)$$

$$p_2 = \alpha e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (e^{r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) - \frac{1}{r_1^2} (e^{-r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) \right\} \\ + \alpha e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (e^{r_1 h_x} (r_1 h_x - 1) + 1) - \frac{1}{r_1^2} (e^{-r_1 h_x} (r_1 h_x - 1) + 1) \right\} \\ + \Delta / 2 R_0 K^2 \cosh \frac{\Delta}{2} h_x (e^{k h_t} - k h_t - 1)$$

$$p_3 = \alpha e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_2 h_x + 1 - e^{r_2 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_2 h_x + 1 - e^{-r_2 h_x}) \right\} \\ - \Delta / 2 R_0 K^2 e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} (e^{k h_t} - k h_t - 1)$$

$$p_4 = \alpha e^{k h_t} e^{\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{-r_1 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{r_1 h_x}) \right\} \\ + \Delta / 2 R_0 K^2 e^{\frac{r_2 h_x}{2}} (1 + e^{k h_t} (k h_t - 1))$$

$$p_5 = \alpha e^{k h_t} e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (e^{-r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) - \frac{1}{r_1^2} (e^{r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) \right\} \\ + \alpha e^{k h_t} e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (e^{r_1 h_x} (r_1 h_x - 1) + 1) - \frac{1}{r_1^2} (e^{-r_1 h_x} (r_1 h_x - 1) + 1) \right\} \\ + \Delta / 2 R_0 K^2 \cosh \frac{\Delta}{2} h_x (1 + e^{k h_t} (k h_t - 1))$$

$$p_6 = \alpha e^{k h_t} e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_2 h_x + 1 - e^{r_2 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_2 h_x + 1 - e^{-r_2 h_x}) \right\} \\ + \Delta / 2 R_0 K^2 e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} (1 + e^{k h_t} (k h_t - 1))$$

$$g_0 = \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{-r_1 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{r_1 h_x}) - \frac{\Delta h_t}{2 R_0 K} \right\} (1 - e^{k h_t})$$

$$g_1 = \alpha e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} / 2 \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x + 1 - e^{r_1 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x + 1 - e^{-r_1 h_x}) + \frac{\Delta h_t}{2 R_0 K} \right\} (1 - e^{k h_t})$$

donde:

$$\begin{aligned}\alpha &= h_c / h_x \\ r_1 &= 1/2 (P_0 + \Delta) \\ r_2 &= 1/2 (P_0 - \Delta) \\ \Delta &= \sqrt{P_0^2 + 4KP_0}\end{aligned}$$

o Caso $\Delta^2 = 0$, ($K = -P_0/4$).

($\alpha = h_c/h_x$).

$$P_1 = \alpha (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{2} h_x})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c}) e^{-\frac{P_0}{2} h_x}$$

$$P_2 = 4\alpha (\operatorname{senh} \frac{P_0}{2} h_x - P_0 h_x / 4) - 4(1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c})$$

$$P_3 = \alpha (P_0 h_x / 2 - 2(1 - e^{-\frac{P_0}{2} h_x})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c}) e^{-\frac{P_0}{2} h_x}$$

$$P_4 = \alpha e^{-\frac{P_0}{4} h_c} (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{2} h_x})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c}) e^{-\frac{P_0}{2} h_x}$$

$$P_5 = 4\alpha e^{-\frac{P_0}{4} h_c} (\operatorname{senh} \frac{P_0}{2} h_x - P_0 h_x / 4) - 4(1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c})$$

$$P_6 = \alpha e^{-\frac{P_0}{4} h_c} (P_0 h_x / 2 - 2(1 - e^{-\frac{P_0}{2} h_x})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c}) e^{-\frac{P_0}{2} h_x}$$

$$g_0 = -\alpha (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0}{2} h_x})) (1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c})$$

$$g_1 = -\alpha (P_0 h_x / 2 - 2(1 - e^{-\frac{P_0}{2} h_x})) (1 - e^{-\frac{P_0}{4} h_c})$$

o Caso $\Delta^2 < 0$, ($K < -P_0/4$).

$$P_1 = \alpha \{ (P_0^2 + 4KP_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + 2\Delta/2 (\cos \frac{\Delta}{2} h_x + e^{-\frac{P_0}{2} h_x}) \} + \Delta P_0 e^{-\frac{P_0}{2} h_c} (1 - e^{-K h_c}) / 2$$

$$P_2 = \alpha \{ -(P_0^2 + 4KP_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_0 \Delta \operatorname{senh} \frac{P_0 h_x}{2} \} - \Delta P_0 \cos \frac{\Delta}{2} h_x (1 - e^{-K h_c})$$

$$P_3 = \alpha \{ (P_0^2 + 4KP_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - P_0 \Delta/2 (\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{-\frac{P_0}{2} h_x}) \} + \Delta P_0 e^{-\frac{P_0}{2} h_c} (1 - e^{-K h_c}) / 2$$

$$\beta_1 = \alpha e^{kh_x} \left\{ (P_e^2 + 4KP_e) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_e \Delta \frac{1}{2} (\cos \frac{\Delta}{2} h_x + e^{\frac{P_e h_x}{2}}) \right\} + \Delta P_e e^{\frac{P_e h_x}{2}} (1 - e^{kh_x}) / 2$$

$$\beta_2 = \alpha e^{kh_x} \left\{ -(P_e^2 + 2KP_e) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_e \Delta \operatorname{sen} \frac{1}{2} \frac{P_e h_x}{2} \right\} - \Delta P_e \cos \frac{\Delta}{2} h_x (1 - e^{kh_x})$$

$$\beta_3 = \alpha e^{kh_x} \left\{ (P_e^2 + 4KP_e) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - P_e \Delta \frac{1}{2} (\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{-\frac{P_e h_x}{2}}) \right\} + \Delta P_e e^{-\frac{P_e h_x}{2}} (1 - e^{kh_x}) / 2$$

$$g_0 = \alpha (e^{kh_x} - 1) \left(\frac{1}{2} (P_e^2 + 2KP_e) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_e \Delta \frac{1}{2} (\cos \frac{\Delta}{2} h_x + e^{\frac{P_e h_x}{2}}) \right)$$

$$g_1 = \alpha (e^{kh_x} - 1) \left(\frac{1}{2} (P_e^2 + 2KP_e) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - P_e \Delta \frac{1}{2} (\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{-\frac{P_e h_x}{2}}) \right)$$

$$\text{donde } \alpha = h_z / h_x \quad \text{y} \quad \Delta = \sqrt{-(P_e^2 + 4KP_e)}$$

Se puede preguntar.... ¿Es posible eliminar de alguna forma la duda sobre el valor de la constante de separación K ? ¿Es posible hacer alguna restricción sobre las funciones de peso de tal forma que sea determinado en forma única el valor de la constante K ?

La respuesta es afirmativa. Eligiendo funciones de peso sobre dos elementos, "suaves" y nulas en los extremos de estos elementos, es posible determinar valores fijos -aunque también son una infinidad-, para la constante de separación K , (ver Apéndice C). Un grupo de los que resultan con las restricciones anteriores ($m=1$) es:

$$\varphi_i^n(x, t) = \begin{cases} e^{-\frac{P_e}{2}(x-x_{i-1})} \operatorname{sen} \frac{\pi}{2h_x}(x-x_{i-1}) e^{\frac{P_e}{4} \left(\frac{\pi^2}{(P_e h_x)^2} + 1 \right) (t-t_n)}, & x \in [x_{i-1}; x_{i1}] \\ 0, & x \notin [x_{i-1}; x_{i1}] \end{cases} \quad (1.35)$$

con:

$$\left[\frac{\partial \varphi_i^n}{\partial x} \right]_{x_j} = \begin{cases} \frac{\pi}{2h_x} e^{\frac{P_e}{4} \left(\frac{\pi^2}{(P_e h_x)^2} + 1 \right) (t-t_n)} & , j=i-1 \\ 0 & , j=i \\ \frac{\pi}{2h_x} e^{-\frac{P_e}{2} h_x} e^{\frac{P_e}{4} \left(\frac{\pi^2}{(P_e h_x)^2} + 1 \right) (t-t_n)} & , j=i+1 \\ 0 & , |i+j| \geq 2 \end{cases} \quad (1.34)$$

Los coeficientes asociados a estas funciones de peso son:

$$\beta_1 = \alpha \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right) e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - \pi \frac{P_2 h_x}{2} \right\} + \pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{K h_x})$$

$$\beta_2 = -\alpha \left\{ \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 - \pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 + 2 \operatorname{senh} \frac{P_2 h_x}{2}) \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}}$$

$$\beta_3 = \left[\alpha \left\{ \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right\} e^{\frac{P_2 h_x}{2}} + \pi \frac{P_2 h_x}{2} \right] - \pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{K h_x}) e^{-P_2 h_x}$$

$$\beta_1 = \alpha e^{K h_x} \left\{ \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - \pi \frac{P_2 h_x}{2} \left\{ 1 - e^{K h_x} \right\} + \pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{K h_x})$$

$$\beta_2 = \alpha e^{K h_x} \left\{ \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 - \pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 + 2 \operatorname{senh} \frac{P_2 h_x}{2}) \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}}$$

$$\beta_3 = \left[\alpha e^{K h_x} \left\{ \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right\} e^{\frac{P_2 h_x}{2}} + \pi \frac{P_2 h_x}{2} \right] - \pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{K h_x}) e^{-P_2 h_x}$$

$$g_0 = -\alpha \left\{ \pi \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right) + \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - \pi \frac{P_2 h_x}{2} \left\{ 1 - e^{K h_x} \right\}$$

$$g_1 = -\alpha e^{-P_2 h_x} \left\{ \pi \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right) + \left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \right\} e^{\frac{P_2 h_x}{2}} + \pi \frac{P_2 h_x}{2} \left\{ 1 - e^{K h_x} \right\}$$

donde $K = -P_2/4 \left(\pi^2/P_2^2 h_x^2 + 1 \right)$ y $\alpha = h_x/h_x$.

También se puede preguntar, ¿Cuál es el orden de aproximación de los esquemas que se acaban de obtener?

Hay que recordar que cuando se aproxima a una función

$$u: [a; b] \rightarrow \mathbb{R} \quad u \in C^{(m+1)} [a; b].$$

por un polinomio P_n de grado n construido sobre una partición del dominio: $\{S_i\}_{i=0}^n$, $S_0 = a$, $S_n = b$, para cada $S \in [a; b]$ existe una $\xi \in (a; b)$ tal que:

$$u(S) - P_n(S) = \frac{u^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!} \prod_{i=1}^n (S - S_i) \quad (2.35)$$

La magnitud del error que se tiene al hacer esta aproximación es:

$$\|u(s) - P_n(s)\| \leq \|u^{(n+1)}\| / 4(n+1) h^{n+1} \quad (2.36)$$

donde $h = \max \{ \|S_{i-1} - S_i\| \}$, (Prenter 1975, sec. 2.5). Aplicando estos resultados a una aproximación lineal a través sobre una partición uniforme, entonces para $u \in C^2[S_{i-1}; S_i]$ y para una $S \in [S_{i-1}; S_i]$:

$$u(s) - p_i(s) = u''(\xi) / 2 (S - S_i)(S - S_{i-1})$$

con un error:

$$\|u(s) - p_i(s)\| \leq \|u''\| / 8 h^2, \quad h = \|S_i - S_{i-1}\|.$$

En este caso, los polinomios de primer orden $p_i(s)$ están dados en (2.23) y por lo anterior en cada subintervalo tanto temporal como espacial:

$$u(x, t) = p_i^x(x) + 1/2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_i, t_r) (x - x_{i-1})(x - x_i) \quad (2.37)$$

con $p_i^x(x) = 1/h_x \{ (x_i - x)u(x_{i-1}, t_r) + (x - x_{i-1})u(x_i, t_r) \}$, $r = 1, 2, \dots, N$
y $x_{i-1} \leq x \leq x_i$, $\xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$.

$$u(x, t) = p_r^n(t) + 1/2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(\xi_r, \eta_n) (t - t_{n-1})(t - t_n) \quad (2.38)$$

con $p_r^n(t) = 1/h_t \{ (t - t_{n-1})u(x_r, t_n) + (t_n - t)u(x_r, t_{n-1}) \}$, $r = 1, 2, \dots, I-1$
y $t_{n-1} \leq t \leq t_n$, $\eta_n \in (t_{n-1}, t_n)$.

Substituyendo en (1.22) se puede evaluar el residuo que se tiene al hacer esta aproximación. Si

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_i} u(x, t_n) \varphi_i(x, t_n) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x, t_n) \varphi_i(x, t_n) dx - 1/2 \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(x_r, t) \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_r} dt \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} u(x, t_{n-1}) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} u(x, t_{n-1}) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx \\ & \quad - 1/2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(1, t) - \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(0, t) \right) dt, \quad i = 1, 2, \dots, I-1. \end{aligned}$$

entonces:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_i} p_i^n(x) \varphi_i(x, t_n) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_{i+1}^n(x) \varphi_i(x, t_n) dx + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_i, t_n) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_{i-1})(x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_{i+1}, t_n) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1}) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{6} \sum_{r=1}^{i+1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} p_r^n(t) \left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right]_{x_r} dt \\ & - \frac{1}{2} p_e \sum_{r=1}^{i+1} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_r, \eta_n) \int_{t_{n-1}}^{t_n} (t-t_{n-1})(t-t_n) \left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right]_{x_r} dt \\ = & \int_{x_{i-1}}^{x_i} p_i^n(x) \varphi_i(x, t_n) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_{i+1}^n(x) \varphi_i(x, t_n) dx + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_i, t_n) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_{i-1})(x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_{i+1}, t_n) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1}) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{6} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(z, t) - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(0, t) \right) dt \end{aligned}$$

para $i=1, 2, \dots, I-1$. Utilizando el teorema del valor medio para integrales (Kasser, 1977):

Si f y g son continuas sobre $[a; b]$, $a < b$ y si $g(x) \geq 0 \forall x \in [a; b]$, entonces para alguna $c \in (a; b)$:

$$\int_a^b f g = f(c) \int_a^b g$$

se puede sacar de las integrales que contienen a los residuos de las expresiones (1.37) y (1.38), a la función φ_i , e integrando se obtiene un residuo en función de potencias de las longitudes h_x y h_t de los sub-intervalos espacial y temporal; agrupando adecuadamente:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-1}}^{x_i} p_i^n(x) \varphi_i(x, t_n) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_{i+1}^n(x) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{6} p_e \sum_{r=1}^{i+1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} p_r^n(t) \left[\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right]_{x_r} dt \\ = & \int_{x_{i-1}}^{x_i} p_i^n(x) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_{i+1}^n(x) \varphi_i(x, t_{n-1}) dx - \frac{1}{6} p_e \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(z, t) - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(0, t) \right) dt \\ & + \alpha_i h_x^3 + \beta_i h_t^3, \quad i=1, 2, \dots, I-1. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{donde } \alpha_i = & \frac{1}{6} \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_i, t_n) \varphi_i(x_i, t_n) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_{i+1}, t_n) \varphi_i(x_{i+1}, t_n) \right\} \\ & - \frac{1}{6} \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_i, t_{n-1}) \varphi_i(x_i, t_{n-1}) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi_{i+1}, t_{n-1}) \varphi_i(x_{i+1}, t_{n-1}) \right\} \end{aligned}$$

con $y_i, y_{i+1}, y'_i, y'_{i+1} \in (x_{i-1}; x_i)$, y

$$\beta_i = -\frac{1}{2} \rho_i \sum_{r=i-1}^{i+1} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_r, \eta_n) \left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_{x_r}(\bar{c}_n^r)$$

con $\bar{c}_n^r \in (t_{n-1}; t_n)$. Expresado el anterior sistema en forma compacta:

$$A \bar{u}^{(n)} = B \bar{u}^{(n-1)} + \bar{g} + \bar{\alpha} h_x^3 + \bar{\beta} h_t^3$$

se ve fácilmente que sobre una partición uniforme el esquema (1.24) da una aproximación de tercer orden tanto en x como en t .

Observación. El mismo proceso mostrará que para una partición no uniforme el esquema da una aproximación de tercer orden también. Este orden de aproximación se puede aumentar, tanto en x como en t , si las funciones de peso son de la forma, por ejemplo:

$$\phi_i(x, t) = (x - x_{i-1}) f(x, t)$$

o bien

$$\phi_i(x, t) = (x_{i+1} - x) f(x, t)$$

o

$$\phi_i(x, t) = (t - t_n) f(x, t), \text{ etc.}$$

Aplicando el análisis anterior a los sistemas de ecuaciones que se obtienen con los diferentes tipos de funciones de peso, estos darán los siguientes órdenes de aproximación (denotando $O(h_x^m, h_t^m) = \bar{\alpha} h_x^m + \bar{\beta} h_t^m$):

• Caso $\Delta^2 > 0$, ($-\frac{1}{2} < K < 0$): $O = O(h_x^3, h_t^3)$.

• Caso $\Delta^2 = 0$, ($K = -\frac{1}{4}$): $O = O(h_x^4, h_t^3)$.

• Caso $\Delta^2 < 0$, ($K < -\frac{1}{4}$): $O = O(h_x^3, h_t^3)$.

Y para las funciones de peso (1.33), el esquema da un orden de aproximación $O = O(h_x^3, h_t^3)$.

Un análisis completo de un esquema numérico, debe incluir una demostración de que la solución aproximada que proporciona, conver-

ge a la solución del problema. Como se sabe, esta convergencia está garantizada si el esquema cumple dos condiciones (Garvín 1973)

- (i). Que el esquema numérico aproxime al esquema original, i.e. que en el límite - cuando la partición se va cerrando -, converja a este.
- (ii). Que el esquema numérico sea estable, i.e. que los errores que surgen durante su resolución queden acotados a medida que la partición se va cerrando.

En este caso, no es difícil comprobar que el esquema numérico (1.24) para cualesquiera funciones de peso converge al esquema ó principio variacional original (1.22), teniendo en cuenta que las aproximaciones "línea a trozos" (1.23) convergen a la función que aproximan cuando $h_x \rightarrow 0$ y $h_z \rightarrow 0$ (Pruiter 1975).

Sin embargo, hacer un análisis "directo" de estabilidad de los esquemas numéricos obtenidos utilizando el criterio de Von Neumann ó haciendo un análisis de radio espectral (ver Apéndice B), es realmente imposible dada la complejidad de los coeficientes de estos esquemas. La única forma de determinar para qué valores (h_x, h_z, ρ) los esquemas numéricos obtenidos son estables, es mediante corridas de prueba en la computadora, viendo en qué rangos de estos valores los errores quedan acotados y en qué rangos crecen desmedidamente, que es como se procederá en este trabajo.

Por lo tanto, ante la imposibilidad de un análisis directo de estabilidad de los esquemas, se renuncia en este trabajo a hacer un análisis "a priori" de convergencia, análisis que se propone para trabajos posteriores por no tener aquí los elementos suficientes para hacerlos. También se excluye el análisis de estabilidad y convergencia de los esquemas que se obtendrán mas adelante.

Tratamiento Incompleto.

Como se mencionó anteriormente, la Aproximación Unificada garantiza que para ecuaciones diferenciales ordinarias se obtendrán valores exactos en los nodos. Por lo tanto, una propuesta es aproximar de alguna forma a la derivada temporal y aplicar la teoría al resto del operador diferencial. Se propone entonces aproximar por Diferencias Finitas a la derivada temporal en la ecuación (1.1).

Se tiene que en general (ver Apéndice F):

$$\left[1 - \theta h_c \left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx}\right)\right] u^{n+1} = \left[1 + (1-\theta) h_c \left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx}\right)\right] u^n(x) \quad (1.39)$$

donde n indica el paso en el tiempo y $\theta \in [0; 1]$ es un parámetro que indica que tan implícita ó explícita es la aproximación. Se toma al operador L como:

$$L = 1 - \theta h_c \left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx}\right) \quad (1.40)$$

y se definen los operadores P y Q^* en la forma

$$\langle Pu, v \rangle = \int_0^1 v L u^{n+1} dx \quad (a) \quad (1.41)$$

$$\langle Q^* u, v \rangle = \int_0^1 u^{n+1} L^* v dx \quad (b)$$

donde L^* es el operador adjunto de L . Dada una partición en la dirección x , se obtiene en una "banda" del dominio Ω (fig. 1.1) la fórmula de Green generalizada correspondiente. En este caso, los operadores de frontera, el salto y promedio son:

$$\langle Bu, v \rangle = \theta h_c u^{n+1} \left(\frac{1}{2} \frac{dv}{dx}(1) + v(1)\right) - \theta h_c u^{n+1} \left(\frac{1}{2} \frac{dv}{dx}(0) + v(0)\right) \quad (a) \quad (1.42)$$

$$\langle C^* u, v \rangle = \theta h_c / \rho_c \left(v(1) \frac{du^{n+1}}{dx}(1) - v(0) \frac{du^{n+1}}{dx}(0)\right) \quad (b)$$

$$\langle Ju, v \rangle = - \sum_{i=1}^{I-1} \left\{ -\theta h_c / \rho_c \left(v \left[\frac{du}{dx} \right] - [u] \frac{dv}{dx} \right) + \theta h_c [u] \dot{v} \right\}_x \quad (1.43)a.$$

$$\langle K^* u, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \left\{ -\theta h_x / \rho_e \left([v] \frac{du}{dx} - \dot{u} \left[\frac{dv}{dx} \right] \right) + \theta h_x \dot{u} [v] \right\}_{x_i} \quad (1.43)b$$

Teniendo en cuenta que

$$\langle Pu, v \rangle = \int_0^1 v \left[1 + h_x (1-\theta) \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx} \right) \right] u''(x) dx$$

$$\langle Bu, v \rangle = \theta h_x \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{dv}{dx}(1) + v(1) \right) - \theta h_x \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{dv}{dx}(0) + v(0) \right)$$

$$\langle Ju, v \rangle = 0$$

el principio variacional que contiene la información buscada es:

$$\begin{aligned} & \int_0^1 u^{(n)} \mathcal{L}^* v dx - \theta h_x / \rho_e \left(v(1) \frac{du}{dx}(1) + v(0) \frac{du}{dx}(0) \right) \\ & - \sum_{i=1}^{I-1} \left\{ -\theta h_x / \rho_e \left([v] \frac{du}{dx} - \dot{u} \left[\frac{dv}{dx} \right] \right) + \theta h_x \dot{u} [v] \right\}_{x_i} \quad (1.44) \\ & = \int_0^1 v \left[1 + (1-\theta) \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx} \right) \right] u''(x) dx \\ & - \theta h_x \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{dv}{dx}(1) + v(1) \right) + \theta h_x \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{dv}{dx}(0) + v(0) \right) \end{aligned}$$

El esquema más simple de obtener y que es el que aquí se desarrollará se tiene cuando $\theta = 1$ (aproximación completamente implícita). Cuando $\theta \neq 1$, se tiene que trabajar un poco más para obtener el esquema numérico correspondiente; este desarrollo se hará posteriormente pero no en este trabajo.

Para $\theta = 1$, el esquema numérico tiene la forma:

$$\begin{aligned} & \int_0^1 u^{(n)} \mathcal{L}^* v dx - h_x / \rho_e \left(v(1) \frac{du}{dx}(1) - v(0) \frac{du}{dx}(0) \right) \\ & - \sum_{i=1}^{I-1} \left\{ -h_x / \rho_e \left([v] \frac{du}{dx} - \dot{u} \left[\frac{dv}{dx} \right] \right) + h_x \dot{u} [v] \right\}_{x_i} \quad (1.45) \\ & = \int_0^1 v u'' dx - h_x \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{dv}{dx}(1) + v(1) \right) + h_x \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{dv}{dx}(0) + v(0) \right) \end{aligned}$$

Como se ha hecho hasta ahora, se eligen funciones de

peso que genera un sistema de ecuaciones cuya solución de únicamente valores de la solución en los nodos de la partición. Nuevamente estas se construyen con soluciones de la ecuación adjunta homogénea:

$$L^* v = 0$$

$$v(x) = e^{-\frac{\rho}{2}x} (A_1 \sinh \frac{\Delta}{2} x + A_2 \cosh \frac{\Delta}{2} x) \quad (1.46)$$

Tomando estas funciones continuas y con soporte local sobre dos elementos, se encuentra que estas son:

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} e^{-\frac{\rho}{2}(x-x_i)} \sinh \frac{\Delta}{2} (x-x_{i+1}) / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ e^{-\frac{\rho}{2}(x-x_i)} \sinh \frac{\Delta}{2} (x_{i+1}-x) / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x, & x_{i+1} \leq x \leq x_{i+2} \\ 0, & x \notin [x_{i+1}, x_{i+2}] \end{cases} \quad (1.47)$$

con $\Delta = \sqrt{\rho^2 + 4\rho_0/h_x}$, $i=1, 2, \dots, I-1$. Los saltos de los valores de las derivadas en los nodos son:

$$\left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_j} = \begin{cases} \Delta/2 e^{-\frac{\rho}{2}h_x} / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x, & j=i-1 \\ -\Delta \cosh \frac{\Delta}{2} h_x / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x, & j=i \\ \Delta/2 e^{-\frac{\rho}{2}h_x} / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x, & j=i+1 \\ 0, & |i-j| \geq 2 \end{cases} \quad (1.48)$$

Con la elección de estas funciones de peso el esquema numérico se simplifica bastante, obteniéndose el sistema tridiagonal:

$$-h_x/\rho \sum_{r=i-1}^{i+1} u_r \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x_r} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u''(x) \varphi_i(x) dx - h_x/\rho \left(\frac{d\varphi_i}{dx}(1) - \frac{d\varphi_i}{dx}(0) \right) \quad (1.49)$$

donde $i=1, 2, \dots, I-1$, $\left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x=0} = \left[\frac{d\varphi_i}{dx} \right]_{x=1} = 0$.

La integral del lado derecho de (1.49) se puede evaluar de diferentes formas. Una de ellas es aproximar a la solución $u''(x)$ linealmente entre los nodos e integrar analíticamente, en este caso:

$$u''(x) = \frac{1}{h_x} \{ u_{i-1}''(x_i - x) + (x - x_{i-1}) u_i'' \}, \quad x \in (x_{i-1}; x_i)$$

Substituyendo, agrupando convenientemente e integrando se obtiene un sistema de ecuaciones de la forma (1.25); en este caso los valores de los coeficientes son:

$$\beta_1 = \Delta/2 e^{\frac{\rho_0 h_x}{2}}$$

$$\beta_2 = -\Delta \cosh \frac{\Delta}{2\alpha}$$

$$\beta_3 = \Delta/2 e^{-\frac{\rho_0 h_x}{2}}$$

$$\beta_4 = -\frac{\rho_0 h_x^2}{h_x} \cdot e^{\frac{\rho_0 h_x}{2}} \{ (\sqrt{\alpha} - 1 + e^{-\sqrt{\alpha}})/r_1^2 - (\sqrt{\alpha} - 1 + e^{-r_1/\alpha})/r_2^2 \}$$

$$\beta_5 = -\frac{\rho_0 h_x^2}{h_x} \cdot e^{\frac{\rho_0 h_x}{2}} \{ (e^{\sqrt{\alpha}}(\sqrt{\alpha} + 1) - 1)/r_1^2 - (e^{-\sqrt{\alpha}}(\sqrt{\alpha} + 1) - 1)/r_2^2 \}$$

$$-\frac{\rho_0 h_x^2}{h_x} \cdot e^{-\frac{\rho_0 h_x}{2}} \{ (e^{\sqrt{\alpha}}(\sqrt{\alpha} - 1) + 1)/r_1^2 - (e^{\sqrt{\alpha}}(\sqrt{\alpha} - 1) + 1)/r_2^2 \}$$

$$\beta_6 = -\frac{\rho_0 h_x^2}{h_x} \cdot e^{-\frac{\rho_0 h_x}{2}} \{ (\sqrt{\alpha} + 1 - e^{\sqrt{\alpha}})/r_1^2 - (\sqrt{\alpha} + 1 - e^{r_1/\alpha})/r_2^2 \}$$

$$g_0 = -\frac{\rho_0 h_x^2}{h_x} \cdot e^{\frac{\rho_0 h_x}{2}} \{ (\sqrt{\alpha} - 1 + e^{-\sqrt{\alpha}})/r_1^2 - (\sqrt{\alpha} - 1 + e^{-r_1/\alpha})/r_2^2 \}$$

$$-\Delta/2 e^{\frac{\rho_0 h_x}{2}}$$

$$g_1 = -\frac{\rho_0 h_x^2}{h_x} \cdot e^{-\frac{\rho_0 h_x}{2}} \{ (\sqrt{\alpha} + 1 - e^{\sqrt{\alpha}})/r_1^2 - (\sqrt{\alpha} + 1 - e^{r_1/\alpha})/r_2^2 \}$$

$$-\Delta/2 e^{-\frac{\rho_0 h_x}{2}}$$

donde:

$$\alpha = h_2/h_1$$
$$\Delta = ((P_2 h_1)^2 + 4P_2 h_1)^{1/2}$$
$$r_1 = P_2 h_1/2 + \Delta/2$$
$$r_2 = P_2 h_1/2 - \Delta/2$$

Un esquema diferente se puede obtener de la siguiente forma. Primero se pasa al lado derecho de la igualdad (1.1) a la derivada temporal, luego multiplicando todo por $-P_0$ se tendrá que:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - P_0 \frac{\partial u}{\partial x} = P_0 \frac{\partial u}{\partial t} \quad (1.50)$$

Se aplica ahora la Aproximación Unificada al lado izquierdo de la igualdad (1.50). Se define entonces el operador P en la forma:

$$\langle P u, v \rangle = \int_0^1 v L u \, dx \quad (1.51)$$

y al operador Q^* en la forma:

$$\langle Q^* u, v \rangle = \int_0^1 u L^* v \, dx \quad (1.52)$$

donde $L = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - P_0 \frac{\partial}{\partial x}$ y $L^* = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + P_0 \frac{\partial}{\partial x}$. Integrando por partes se determinan los operadores B y C^* fácilmente:

$$\langle B u, v \rangle = -(u(1,t) \frac{\partial v}{\partial x}(1,t) - u(0,t) \frac{\partial v}{\partial x}(0,t)) - P_0 (u(1,t) v(1,t) - u(0,t) v(0,t)) \quad (1.53)$$

$$\langle C^* u, v \rangle = -(v(1,t) \frac{\partial u}{\partial x}(1,t) - v(0,t) \frac{\partial u}{\partial x}(0,t))$$

y aplicando los conceptos de la Aproximación Unificada se determinan los operadores J y K^* :

$$\langle J u, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \{ -\bar{v} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right] + [u] \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + P_0 [u] \bar{v} \} x_i$$
$$\langle K^* u, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \{ [v] \frac{\partial u}{\partial x} - \bar{u} \left[\frac{\partial v}{\partial x} \right] - P_0 \bar{u} [v] \} x_i \quad (1.54)$$

Teniendo nuevamente en cuenta que en este caso:

$$\langle Pu, v \rangle = P_0 \int_0^1 v \frac{\partial u}{\partial t} dx$$

$$\langle Bu, v \rangle = - \left(\frac{\partial v}{\partial x}(1, t) - \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) \right) - P_0 (v(1, t) - v(0, t)) \quad (1.55)$$

$$\langle Ju, v \rangle = 0$$

se obtiene la formulación variacional equivalente al problema (1.1) :

$$\begin{aligned} & \int_0^1 u \mathcal{L}^* \bar{v} dx + v(1, t) \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) - v(0, t) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) \\ & - \sum_{i=1}^{I-1} \{ [v] \frac{\partial u}{\partial x} - u [\frac{\partial v}{\partial x}] - P_0 u [v] \}_{x_i} = P_0 \int_0^1 v \frac{\partial u}{\partial t} dx \quad (1.54) \\ & + \frac{\partial v}{\partial x}(1, t) - \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) + P_0 (v(1, t) - v(0, t)) \end{aligned}$$

Se puede simplificar la forma del esquema anterior eligiendo adecuadamente a las funciones de peso. En este caso es conveniente tomarlas en la forma $v(x, t) = \psi(x) \bar{v}(t)$ y que sean solución de la ecuación adjunta homogénea $\mathcal{L}^* v = 0$. Con esta elección el sistema (1.56) queda:

$$\begin{aligned} & \psi(1) \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) - \psi(0) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) - \sum_{i=1}^{I-1} \{ [\psi] \frac{\partial u}{\partial x} - u [\frac{\partial \psi}{\partial x}] - P_0 u [\psi] \}_{x_i} \\ & = P_0 \int_0^1 \psi(x) \frac{\partial u}{\partial t} dx + \frac{\partial \psi}{\partial x}(1) - \frac{\partial \psi}{\partial x}(0) + P_0 (\psi(1) - \psi(0)) \quad (1.57) \end{aligned}$$

Nuevamente se construyen las funciones de peso con soluciones de la ecuación adjunta homogénea, continuas y con soporte local sobre dos elementos, de tal forma que el esquema proporcione información únicamente sobre la solución $u(x, t)$; estas serán:

$$\psi_i(x) = \begin{cases} (1 - e^{-P_0(x-x_{i-1})}) / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ (e^{-P_0(x-x_i)} - e^{-P_0 h_x}) / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ 0 & , x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}] \end{cases} \quad (1.58)$$

($i = 1, 2, \dots, I-1$)

Con esta elección el esquema toma la forma tridiagonal

$$\sum_{r=i-1}^{i+1} u_r(t) \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_r} = P_0 \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) dx + \frac{d\psi_i}{dx}(1) - \frac{d\psi_i}{dx}(0) \quad (1.59)$$

con $\left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x=0} = \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x=1} = 0, \dots, i=1, 2, \dots, I-1$, y donde los valores de las derivadas de las derivadas de las funciones de peso en los nodos son:

$$\left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_j} = \begin{cases} P_0 / (1 - e^{-P_0 h x_j}) & , j=i-1 \\ -P_0 (1 + e^{-P_0 h x_j}) / (1 - e^{-P_0 h x_j}) & , j=i \\ P_0 e^{-P_0 h x_j} / (1 - e^{-P_0 h x_j}) & , j=i+1 \\ 0 & , |i-j| \geq 2 \end{cases} \quad (1.60)$$

Queda todavía un detalle por tratar, y este es la evaluación de la integral que contiene a la derivada en el tiempo que no puede hacerse en forma directa. Se procede entonces a aproximar de alguna forma a la solución $u(x,t)$; se propone una forma especial:

$$u(x,t) = \chi(x) z(t) \quad (1.61)$$

Dado que se tiene una partición en la dirección x , se interpolan linealmente los valores sobre esta partición, con esto (1.61) toma la forma:

$$u(x,t) = \sum_{r=0}^I u_r(t) \chi_r(x) = \sum_{r=0}^I \chi_r(x) u(x_r, t) \quad (1.62)$$

donde los $\chi_r(x)$ están dadas en la forma:

$$\chi_r(x) = \begin{cases} 1/h_x (x - x_{r-1}) & , x_{r-1} \leq x \leq x_r \\ 1/h_x (x_{r+1} - x) & , x_r < x \leq x_{r+1} \\ 0 & , x \notin [x_{r-1}, x_{r+1}] \end{cases} \quad (1.63a)$$

($r=1, 2, \dots, I-1$)

$$\chi_0(x) = \begin{cases} 1/h_x(x-x) & , 0 \leq x \leq x_1 \\ 0 & , x_1 < x < x_2 \end{cases} \quad (1.63)b$$

$$\chi_2(x) = \begin{cases} 1/h_x(x-x_{I-1}) & , x_{I-1} \leq x \leq 1 \\ 0 & , x_0 \leq x < x_I \end{cases} \quad (1.63)c$$

Por el esquema (1.59) queda:

$$\sum_{r=i-1}^{i+1} u_r(t) \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_r} = P_0 \sum_{r=i-1}^{i+1} \frac{d u_r}{dt}(t) \int_{x_{r-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \chi_r(x) dx + \frac{d\psi_i}{dx}(1) - \frac{d\psi_i}{dx}(0) \quad (1.64)$$

$$\text{con } \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x=0} = \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x=1} = 0, \quad i=1, 2, \dots, I-1 \quad \text{y} \quad r=0, 1, \dots, I.$$

Se ha encontrado un sistema "tridiagonal" de ecuaciones diferenciales de primer orden en t , de coeficientes constantes y para el cual existe solución. Sin embargo, es tan complicado resolver este tipo de sistemas que lo más sensato es no intentarlo, optando entonces por hacer otra aproximación. Algo muy simple es aproximar por diferencias finitas a la derivada temporal y hacer al esquema completamente explícito o implícito. El esquema completamente implícito tendrá la forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{r=i-1}^{i+1} \left\{ \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_r} - P_0/h_x \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \chi_r(x) dx \right\} u_r^{n+1} \\ & = -P_0/h_x \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \chi_r(x) dx u_r^n + \frac{d\psi_i}{dx}(1) - \frac{d\psi_i}{dx}(0) \end{aligned} \quad (1.65)$$

$$\text{con } \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_0} = \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_1} = 0, \quad i=1, 2, \dots, I-1 \quad \text{y} \quad r=0, 1, 2, \dots, I.$$

En este caso los coeficientes del sistema lineal son:

$$P_1 = (\alpha - 1/2) P_0^2 h_x^2 + P_0 h_x - 1 + e^{-P_0 h_x}$$

$$P_2 = -P_0 h_x (P_0 h_x + 1) (1 + e^{-P_0 h_x}) - 1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4) (1 - e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_3 = (\alpha + 1/2) P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x} - 1 + (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_1 = - (P_0^2 h_x^2 / 2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_2 = - (1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4)(1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0 h_x (1 + e^{-P_0 h_x}))$$

$$\beta_3 = - (1 - (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x} - P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x} / 2)$$

$$g_0 = -\alpha P_0^2 h_x^2$$

$$g_1 = -\alpha P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x}, \quad \alpha = h_e / h_x.$$

El esquema completamente explícito tendrá la forma:

$$P_0 / h_e \sum_{r=1}^{i+1} \int_{x_{r-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \chi_r(x) dx \mathcal{M}_r^{n+1} \\ = \sum_{r=i-1}^{i+1} \left\{ \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_r} + P_0 / h_e \int_{x_{r-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \chi_r(x) dx \right\} \mathcal{M}_r^n - \frac{d\psi_i}{dx}(1) + \frac{d\psi_i}{dx}(0) \quad (1.66)$$

$$\text{con } \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_0} = \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_i} = 0, \quad i=1, 2, \dots, I-1, \quad y \quad r=0, 1, 2, \dots, I.$$

En este caso, los valores de los coeficientes del sistema lineal son:

$$\beta_1 = P_0^2 h_x^2 / 2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_2 = 1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4)(1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0 h_x (1 + e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_3 = 1 - (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x} - P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x} / 2$$

$$\beta_1 = (\alpha + 1/2) P_0^2 h_x^2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_2 = -P_0 h_x (P_0 h_x + 1) (1 + e^{-P_0 h_x}) + 1/2 (P_0^2 h_x^2 + 4)(1 - e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_3 = (\alpha - 1/2) P_e^2 h_x^2 e^{-P_e h_x} + 1 - (P_e h_x + 1) e^{-P_e h_x}$$

$$g_0 = \alpha P_e^2 h_x^2$$

$$g_I = \alpha P_e^2 h_x^2 e^{-P_e h_x}, \quad \alpha = h_e/h_x$$

¿Cuál es el orden de aproximación que dan los esquemas anteriores?

Al substituir por diferencias finitas a la derivada temporal y obtener el esquema completamente implícito, se tiene que:

$$-1/2 P_e \frac{\partial^2 u^{n+1}}{\partial x^2} + \frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} + \frac{u^{n+1}}{h_x} = \frac{u^n}{h_x} + 1/2 h_x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(\bar{\tau}), \quad \bar{\tau} \in (t_n; t_{n+1})$$

Aplicando la Aproximación Unificada y haciendo todo lo anteriormente visto se llega finalmente al esquema:

$$-1/2 \sum_{r=1}^{i+1} \mu_r^{n+1} \left[\frac{\partial \psi_i}{\partial x} \right]_{x_r} = 1/h_x \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u^n(x) \psi_i(x) dx - 1/2 \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial x}(1) - \frac{\partial \psi_i}{\partial x}(0) \right) \\ - h_x/2 \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, \bar{\tau}) dx, \quad i=1, 2, \dots, I-1. \quad (1.67)$$

Suponiendo que $u \in C^2 [0; 1] \times [0; T]$ y aplicando el teorema del valor medio para integrales a la última integral, se tendrá entonces:

$$-1/2 \sum_{r=1}^{i+1} \mu_r^{n+1} \left[\frac{\partial \psi_i}{\partial x} \right]_{x_r} = 1/h_x \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u^n(x) \psi_i(x) dx - 1/2 \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial x}(1) - \frac{\partial \psi_i}{\partial x}(0) \right) \\ - \left[\sum_{r=1}^{i+1} 1/2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_r, \bar{\tau}) \psi_i(x_r) \right] h_x h_t, \quad i=1, 2, \dots, I-1. \quad (1.68)$$

para $x_r \in (x_{r-1}; x_r)$. Tomando ahora $u^n(x)$ en la forma

$$u^n(x) = 1/h_x \{ (x - x_{i-1}) u_i^n + (x_i - x) u_{i-1}^n \} + 1/2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\bar{\xi}_i) (x - x_{i-1})(x - x_i)$$

con $x_{i-1} < x < x_i$, $\bar{\xi}_i \in (x_{i-1}; x_i)$, y substituyendo en la expresión (1.68) se encuentra que:

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{h_x} \sum_{r=i-1}^{i+1} \mu_r^{(i)} \left[\frac{d^2 \psi}{dx^2} \right]_{x_r} &= \frac{1}{h_x} \int_{x_{r-1}}^{x_i} p_i(x) \psi_i(x) dx + \frac{1}{h_x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_i(x) \psi_i(x) dx - \frac{1}{h_x} \left[\frac{d^2 \psi}{dx^2}(1) - \frac{d^2 \psi}{dx^2}(0) \right] \\
 &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}(\bar{x}_i) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_{i-1})(x-x_i) \psi_i(x) dx + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}(\bar{x}_{i+1}) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1}) \psi_i(x) dx \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{r=i}^{i+1} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}(\nu_r, z) \psi_i(\nu_r) \cdot h_x h_z, \quad i=1, 2, \dots, I-1.
 \end{aligned}$$

Nuevamente utilizando el teorema del valor medio para integrales y agrupando adecuadamente se tendrá que:

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{h_x} \sum_{r=i-1}^{i+1} \mu_r^{(i)} \left[\frac{d^2 \psi}{dx^2} \right]_{x_r} &= \frac{1}{h_x} \int_{x_{i-1}}^{x_i} p_i(x) \psi_i(x) dx + \frac{1}{h_x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_i(x) \psi_i(x) dx - \frac{1}{h_x} \left[\frac{d^2 \psi}{dx^2}(1) - \frac{d^2 \psi}{dx^2}(0) \right] \\
 &+ \alpha_i h_x^3 / h_z + \beta_i h_x h_z, \quad i=1, 2, \dots, I-1.
 \end{aligned}$$

$$\text{donde: } \alpha_i = \frac{1}{6} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}(\bar{x}_i) \psi_i(\nu_i) + \frac{1}{6} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}(\bar{x}_{i+1}) \psi_i(\nu_{i+1})$$

$$\beta_i = -\frac{1}{2} \sum_{r=i}^{i+1} \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2}(\nu_r, z) \psi_i(\nu_r)$$

Es evidente que si se toman los límites cuando $h_x \rightarrow 0$, $h_z \rightarrow 0$, la convergencia del esquema aproximado hacia el principio variacional dependerá de la forma en que tiendan a cero h_x y h_z ; es claro que si $h_z = k h_x^m$, $m \geq 4$, habrá problemas en la convergencia del esquema. Entonces, tomando $h_z = k h_x^m$, $m \leq 2$ si existen estos problemas. Se puede argumentar que multiplicando toda la expresión anterior por h_z , se vea que el término h_x^3/h_z diverja, sin embargo el orden de aproximación del esquema seguirá siendo

$$O(h_x, h_z) = \alpha_i h_x^3 / h_z + \beta_i h_x h_z$$

El orden de aproximación del esquema (1.64) también se calcula fácilmente.

Se tiene el sistema (1.59) que es equivalente al problema (1.50), donde no se ha hecho ninguna aproximación:

$$\sum_{r=i-1}^{i+1} \mu_r(t) \left[\frac{d^2 \psi}{dx^2} \right]_{x_r} = p_i \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_i(x) \frac{d^2 \psi}{dx^2}(x, t) dx + \frac{d^2 \psi}{dx^2}(1) - \frac{d^2 \psi}{dx^2}(0), \quad i=1, 2, \dots, I-1.$$

Se propone entonces que la solución del problema tenga la forma

$$u(x,t) = \sum_{r=0}^I x_r(z) u_r(x,t) + R(x,t)$$

donde $x_r(x)$ están dadas en (1.63) y en cada subintervalo:

$$R(x,t) = 1/2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\bar{\zeta}_i, t) (x-x_{i-1})(x-x_i) \quad , \quad \bar{\zeta}_i \in (x_{i-1}, x_i)$$

para $x \in (x_{i-1}, x_i)$, $i=1, 2, \dots, I-1$. Substituyendo en (1.59) y desarrollando el residuo:

$$\begin{aligned} \sum_{r=i-1}^{i+1} u_r(t) \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{x_r} &= P_0 \sum_{r=i-1}^{i+1} \frac{du}{dt}(t) \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_r(x) x_r(x) dx + \frac{du}{dx}(1) - \frac{du}{dx}(0) \\ &+ 1/2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\bar{\zeta}_i, t) \right) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_{i-1})(x-x_i) \psi_i(x) dx + 1/2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\bar{\zeta}_{i+1}, t) \right) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i)(x-x_{i+1}) \psi_i(x) dx \end{aligned}$$

con $\left[\frac{\partial u}{\partial x} \right]_{x_i} = \left[\frac{du}{dx} \right]_{x_i} = 0$, $i=1, 2, \dots, I-1$. Usando en los residuos el Teorema del valor medio para integrales y agrupando adecuadamente:

$$\begin{aligned} \sum_{r=i-1}^{i+1} u_r(t) \left[\frac{du}{dx} \right]_{x_r} &= P_0 \sum_{r=i-1}^{i+1} \frac{du}{dt}(t) \int_{x_{i-1}}^{x_i} \psi_r(x) x_r(x) dx + \frac{du}{dx}(1) - \frac{du}{dx}(0) \\ &+ \left\{ 1/6 f_i(t) \psi_i(\delta_i) + 1/6 f_{i+1}(t) \psi_i(\delta_{i+1}) \right\} h_x^3 \end{aligned}$$

donde $f_i(t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\bar{\zeta}_i, t) \right)$, $f_{i+1}(t) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\bar{\zeta}_{i+1}, t) \right)$, $\delta_r \in (x_{r-1}, x_r)$.

Aproximando a la derivada temporal por diferencias finitas, se tendrá que para el esquema completamente implícito:

$$\begin{aligned} \sum_{r=i-1}^{i+1} \left\{ \left[\frac{du}{dx} \right]_{x_r} - P_0/h_x \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_r(x) x_r(x) dx \right\} u_r^{n+1} &= -P_0/h_x \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_r(x) x_r(x) dx u_r^n + \\ &+ \frac{du}{dx}(1) - \frac{du}{dx}(0) + \alpha_i h_x^3 + \beta_i h_x \quad , \quad i=1, 2, \dots, I-1 \end{aligned}$$

donde $\alpha_i = 1/6 f_i(t_n) \psi_i(\delta_i) + 1/6 f_{i+1}(t_n) \psi_i(\delta_{i+1})$

$$\beta_i = -P_0 \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \psi_r(x) x_r(x) dx \quad , \quad \bar{z} \in (t_{n-1}, t_n)$$

Algo similar se obtendrá también para el esquema completamente explícito (1.66) o para cualquier otro con $0 < \theta < 1$.

Por lo tanto, los esquemas (1.65) y (1.66) dan una aproximación de tercer orden en x y de primer orden en t ; i.e.:

$$O(h_x, h_t) = \alpha h_x^3 + \beta h_t$$

2. Problema Dirichlet-Neumann.

• Tratamiento Completo.

Sobre el dominio $\Omega = (0; 1) \times (0; T)$ se tiene nuevamente la ecuación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (2.1)$$

pero ahora con las condiciones:

$$\begin{aligned} u(0, t) &= 1 \\ \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) &= 0 \\ u(x, 0) &= 0 \end{aligned}, \quad Pe = \text{No. de Peclet.}$$

En una partición uniforme del dominio Ω , se construye la fórmula de Green correspondiente al problema. El proceso para obtener el valor o forma de los operadores es idéntico al utilizado en el problema Dirichlet. Se definen

$$\langle Pu, v \rangle = \int_0^1 \int_{t_{n-1}}^{t_n} v L u \, dx \, dt \quad \langle Q^* u, v \rangle = \int_0^1 \int_{t_{n-1}}^{t_n} u L^* v \, dx \, dt$$

con $L = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ y L^* su adjunto. Los operadores de frontera son:

$$\begin{aligned} \langle Bu, v \rangle &= - \int_0^1 u(x, t_{n-1}) v(x, t_{n-1}) \, dx - \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(1, t) v(1, t) \, dt \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{ u(0, t) \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) + v(1, t) \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) \} \, dt \end{aligned} \quad (2.2)a.$$

$$\langle C^*u, v \rangle = - \int_0^1 u(x, t_n) v(x, t_n) dx - \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(1, t) v(1, t) dt \\ - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\{ u(1, t) \frac{\partial v}{\partial x}(1, t) + v(0, t) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) \right\} dt \quad (2.2)b.$$

y los operadores de salto y promedio son:

$$\langle Ju, v \rangle = - \sum_{i=1}^{I-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\{ \bar{v}[u] - \frac{1}{2} ([u] \frac{\partial v}{\partial x} - \bar{v} [\frac{\partial u}{\partial x}]) \right\} dt \quad (a) \quad (2.3)$$

$$\langle K^*u, v \rangle = \sum_{i=1}^{I-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left\{ \bar{u}[v] - \frac{1}{2} ([v] \frac{\partial u}{\partial x} - \bar{u} [\frac{\partial v}{\partial x}]) \right\} dt \quad (b)$$

La forma variacional que proporciona la información que se busca se obtiene fácilmente de la fórmula de Green en el dominio discontinuo

$$\langle Pu, v \rangle - \langle Bu, v \rangle - \langle Ju, v \rangle = \langle Q^*u, v \rangle - \langle C^*u, v \rangle - \langle K^*u, v \rangle$$

Teniendo en cuenta que en este caso

$$\langle Pu, v \rangle = 0$$

$$\langle Bu, v \rangle = - \int_0^1 u(x, t_{n-1}) v(x, t_{n-1}) dx - \int_{t_{n-1}}^{t_n} (v(0, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}(0, t)) dt$$

$$\langle Ju, v \rangle = 0$$

Explícitamente esta forma será:

$$\int_0^1 \int_{t_{n-1}}^{t_n} u^* v dx dt + \int_0^1 u(x, t_n) v(x, t_n) dx + \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(1, t) v(1, t) dt \\ + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\{ u(1, t) \frac{\partial v}{\partial x}(1, t) + v(0, t) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) \right\} dt - \sum_{i=1}^{I-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left\{ \bar{v}[u] - \frac{1}{2} ([u] \frac{\partial v}{\partial x} - \bar{v} [\frac{\partial u}{\partial x}]) \right\} dt \\ = \int_0^1 u(x, t_{n-1}) v(x, t_{n-1}) dx + \int_{t_{n-1}}^{t_n} (v(0, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x}(0, t)) dt \quad (2.4)$$

Seleccionando la información contenida en (2.4) mediante la elección de las funciones de peso con soporte local sobre dos ele-

mentos, continuas y constituidas con soluciones de la ecuación adjunta homogénea, se tendrá el esquema:

$$\int_0^1 u(x, t_n) \varphi_i(x, t_n) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(1, t) \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(1, t) dt - \frac{1}{2} \sum_{r=i+1}^{I-1} \int_{t_{n-1}}^{t_n} u(x_r, t) \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_r} dt \quad (2.5)$$

$$= \int_0^1 u(x, t_{n-1}) \varphi_i(x, t_n) dx + \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\varphi_i(0, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(0, t)) dt \quad , \quad i=1, 2, \dots, I-1.$$

que contiene únicamente información de la solución a lo largo de las interfaces de la partición. Haciendo las aproximaciones (1.23) se tendrá un esquema que dará valores aproximados de u en los nodos, y este será:

$$\left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_{i-1}} dt \right\} u_{i-1}^n$$

$$+ \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_{i-1}) \varphi_i(x, t_n) dx + \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_i} dt \right\} u_i^n$$

$$+ \left\{ \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_{i+1}} dt + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(1, t) dt \right\} u_{i+1}^n$$

$$= \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_{i-1}} dt \right\} u_{i-1}^n \quad (2.6)$$

$$+ \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x-x_{i-1}) \varphi_i(x, t_n) dx + \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_i} dt \right\} u_i^n$$

$$+ \left\{ \alpha \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x-x_i) \varphi_i(x, t_n) dx + \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_{i+1}} dt - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(1, t) dt \right\} u_{i+1}^n$$

$$+ h_i/2 \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(0, t) dt \quad , \quad i=1, 2, \dots, I-1.$$

con $\left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_0} = \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_I} = 0$. Este es un sistema de $I-1$ ecuaciones con I incógnitas, por lo tanto es necesario añadir una función de peso extra (ver Apéndice D) para completar el sistema. La ecuación que completa adecuadamente al sistema es:

$$\left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^1 (1-x) \varphi_i(x, t_n) dx - \frac{1}{2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right]_{x_{i-1}} dt \right\} u_{i-1}^n$$

$$+ \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^1 (x-x_{i-1}) \varphi_i(x, t_n) dx + \int_{t_{n-1}}^{t_n} (\varphi_i(1, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}(1, t)) dt \right\} u_i^n$$

$$= \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^1 (1-x) \varphi_2(x, t_{n-1}) dx + \frac{1}{r_2} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (t_n-t) \left[\frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \right]_{x_{i-1}} dt \right\} \mu_{x_{i-1}}^{n-1} \\ + \left\{ \alpha \int_{x_{i-1}}^1 (x-x_{i-1}) \varphi_2(x, t_{n-1}) dx - \int_{t_{n-1}}^{t_n} (t_n-t) (\varphi_2(1, t)) + \frac{1}{r_2} \frac{\partial \mu}{\partial x}(1, t) dt \right\} \mu_x^0$$

Expresado matricialmente el sistema completo es de la forma

$$\begin{bmatrix} \rho_2 & \rho_3 & & & & & & \\ \rho_1 & \rho_2 & \rho_3 & & & & & \\ & \rho_1 & \rho_2 & \rho_3 & & & & \\ & & \dots & \dots & \dots & & & \\ 0 & & & \rho_3 & \rho_2 & \rho_3 & & \\ & & & & \rho_1 & \rho_4 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_{i-1} \\ \mu_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_2 & \beta_3 & & & & & & \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & & & \\ & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & & \\ & & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & \\ 0 & & \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & & & \\ & & & \beta_1 & \beta_4 & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_{i-1} \\ \mu_x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

El comportamiento estable ó inestable del esquema dependerá nuevamente de las funciones de peso que se elijan. Igual que en el problema Dirichlet, las funciones de peso que tienen posibilidades de dar un esquema estable son las que se obtienen con la constante de separación $K < 0$. Por lo tanto, utilizando las funciones de peso (1.27) - (1.29) (*) se tendrán los siguientes valores para los coeficientes del sistema (2.7):

o Caso $\Delta^2 > 0$, ($-\rho_2/4 < K < 0$).

$$\rho_3 = \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{2} (r_2 h_x - 1 + e^{-r_2 h_x}) - \frac{1}{r_2^2} (r_2 h_x - 1 + e^{-r_2 h_x}) \right\} \\ - \frac{1}{2} \rho_2 K^2 e^{\frac{K h_x}{2}} (e^{K h_x} - K h_x - 1)$$

$$\rho_2 = \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_2^2} (e^{-r_2 h_x} (r_2 h_x + 1) - 1) - \frac{1}{2} (e^{-r_2 h_x} (r_2 h_x + 1) - 1) \right\} \\ + \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_2^2} (e^{r_2 h_x} (r_2 h_x - 1) + 1) - \frac{1}{2} (e^{r_2 h_x} (r_2 h_x - 1) + 1) \right\} \\ + \frac{1}{2} \rho_2 K^2 \cosh \frac{K}{2} h_x (e^{K h_x} - K h_x - 1)$$

(*) Las funciones que completan al sistema se pueden ver en el Apéndice D.

$$\beta_3 = \alpha \bar{e}^{-\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_2^2} (r_2 h_x + 1 - e^{r_2 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x + 1 - e^{r_1 h_x}) \right\} - \frac{\Delta}{2} P_2 K^2 \bar{e}^{-\frac{r_2 h_x}{2}} (e^{Kh_t} - Kh_t - 1)$$

$$\beta_4 = \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_1^2} (\bar{e}^{-r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) - \frac{1}{r_2^2} (\bar{e}^{-r_2 h_x} (r_2 h_x + 1) - 1) \right\} + \frac{\Delta}{2} P_2 K^2 (P_2 \operatorname{sech} \frac{\Delta}{2} h_x + \Delta \operatorname{cosh} \frac{\Delta}{2} h_x) (e^{Kh_t} - Kh_t - 1)$$

$$\beta_1 = \alpha e^{Kh_t} e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_2^2} (r_2 h_x - 1 + \bar{e}^{-r_2 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + e^{-r_1 h_x}) \right\} + \frac{\Delta}{2} P_2 K^2 e^{\frac{r_2 h_x}{2}} (1 + e^{Kh_t} (Kh_t - 1))$$

$$\beta_2 = \alpha e^{Kh_t} e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_1^2} (\bar{e}^{-r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) - \frac{1}{r_2^2} (\bar{e}^{-r_2 h_x} (r_2 h_x + 1) - 1) \right\} + \alpha e^{Kh_t} e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_1^2} (e^{r_1 h_x} (r_1 h_x - 1) + 1) - \frac{1}{r_2^2} (e^{r_2 h_x} (r_2 h_x - 1) + 1) \right\} - \Delta P_2 K^2 \operatorname{cosh} \frac{\Delta}{2} h_x (1 + e^{Kh_t} (Kh_t - 1))$$

$$\beta_3 = \alpha e^{Kh_t} e^{-\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_2^2} (r_2 h_x + 1 - e^{r_2 h_x}) - \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x + 1 - e^{r_1 h_x}) \right\} + \frac{\Delta}{2} P_2 K^2 \bar{e}^{-\frac{r_2 h_x}{2}} (1 + e^{Kh_t} (Kh_t - 1))$$

$$\beta_4 = \alpha e^{Kh_t} e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_1^2} (\bar{e}^{-r_1 h_x} (r_1 h_x + 1) - 1) - \frac{1}{r_2^2} (\bar{e}^{-r_2 h_x} (r_2 h_x + 1) - 1) \right\} - \frac{\Delta}{2} P_2 K^2 (P_2 \operatorname{sech} \frac{\Delta}{2} h_x + \Delta \operatorname{cosh} \frac{\Delta}{2} h_x) (1 + e^{Kh_t} (Kh_t - 1))$$

$$g_0 = \alpha e^{\frac{r_2 h_x}{2}} \left\{ \frac{1}{r_1^2} (r_1 h_x - 1 + \bar{e}^{-r_1 h_x}) - \frac{1}{r_2^2} (r_2 h_x - 1 + \bar{e}^{-r_2 h_x}) - \Delta h_x \frac{\Delta}{2} P_2 K \right\} (1 - e^{Kh_t})$$

donc:

$$\begin{aligned} \alpha &= h_c / h_x \\ r_1 &= \frac{1}{2} (P_0 + \Delta) \\ r_2 &= \frac{1}{2} (P_0 - \Delta) \\ \Delta &= \sqrt{P_0^2 + 4K P_0} \end{aligned}$$

○ Caso $\Delta^2 = 0$, ($K = -P_0/4$).

$$f_1 = \alpha (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}}) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$P_2 = 4\alpha (\operatorname{senh} \frac{P_0 h_x}{2} - P_0 h_x / 4) - 4(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}})$$

$$P_3 = \alpha (P_0 h_x / 2 - 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}}) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$P_4 = -\alpha (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) - 2(P_0 h_x / 2 + 1)(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}})$$

$$f_1 = \alpha e^{-\frac{P_0 h_x}{4}} (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}}) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$P_2 = 4\alpha e^{-\frac{P_0 h_x}{4}} (\operatorname{senh} \frac{P_0 h_x}{2} - P_0 h_x / 4) - 4(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}})$$

$$P_3 = \alpha e^{-\frac{P_0 h_x}{4}} (P_0 h_x / 2 - 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}}) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$P_4 = -\alpha e^{-\frac{P_0 h_x}{4}} (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}}) (P_0 h_x / 2 + 1)$$

$$g_n = -\alpha (P_0 h_x / 2 + 2(1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}})) / (1 - e^{-\frac{P_0 h_x}{4}}), \quad \alpha = h_c / h_x$$

○ Caso $\Delta^2 < 0$, ($K < -P_0/4$).

$$f_1 = \alpha \{ (\frac{1}{2} P_0^2 + K P_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_0 \Delta / 2 (\cos \frac{\Delta}{2} h_x + e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}) \} + \Delta P_0 / 2 e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} (1 - e^{-K h_c})$$

$$P_2 = \alpha \{ -(P_0^2 + 2K P_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_0 \Delta \operatorname{senh} \frac{P_0 h_x}{2} \} - \Delta P_0 \cos \frac{\Delta}{2} h_x (1 - e^{-K h_c})$$

$$P_3 = \alpha \{ (\frac{1}{2} P_0^2 + K P_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - P_0 \Delta / 2 (\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}) \} + \Delta P_0 / 2 e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} (1 - e^{-K h_c})$$

$$P_4 = \alpha \{ -(P_0^2 + K P_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - P_0 \Delta / 2 (\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}) \}$$

$$- P_0 / 2 (P_0 \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + \Delta \cos \frac{\Delta}{2} h_x) (1 - e^{-K h_c})$$

$$\beta_1 = \alpha e^{kh_c} \left\{ \left(\frac{1}{2} P_0^2 + K P_0 \right) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + \frac{P_0 \Delta}{2} \left(\cos \frac{\Delta}{2} h_x + e^{\frac{P_0 h_x}{2}} \right) \right\} + \Delta P_0^2 (1 - e^{kh_c}) e^{\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$\beta_2 = \alpha e^{kh_c} \left\{ - (P_0^2 + 2K P_0) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + P_0 \Delta \operatorname{sen} h \frac{P_0 h_x}{2} \right\} - \Delta P_0 \cos \frac{\Delta}{2} h_x (1 - e^{kh_c})$$

$$\beta_3 = \alpha e^{kh_c} \left\{ \left(\frac{1}{2} P_0^2 + K P_0 \right) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - \frac{P_0 \Delta}{2} \left(\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} \right) + \Delta P_0^2 (1 - e^{kh_c}) \right\} e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$\beta_4 = \alpha e^{kh_c} \left\{ - \left(\frac{1}{2} P_0^2 + K P_0 \right) \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x - \frac{P_0 \Delta}{2} \left(\cos \frac{\Delta}{2} h_x - e^{\frac{P_0 h_x}{2}} \right) \right\}$$

$$- \frac{P_0}{2} \left(P_0 \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} h_x + \Delta \cos \frac{\Delta}{2} h_x \right) (1 - e^{kh_c})$$

con $\alpha = h_c/h_x$ y $\Delta = \sqrt{P_0^2 + 4K P_0}$. En este caso también se pueden utilizar las funciones de peso (1.33) y obtener un esquema numérico alternativo. Los valores de estos coeficientes son:

$$\beta_1 = \alpha \left\{ \left((P_0 h_x / 2)^2 - (\pi/2)^2 \right) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} - \pi P_0 h_x / 2 \right\} + \pi P_0 h_x / 2 (1 - e^{kh_c})$$

$$\beta_2 = -\alpha \left\{ (P_0 h_x / 2)^2 - (\pi/2)^2 - \pi P_0 h_x / 2 (1 + 2 \operatorname{sen} h \frac{P_0 h_x}{2}) \right\} e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$\beta_3 = \alpha e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} \left\{ \left((P_0 h_x / 2)^2 - (\pi/2)^2 \right) e^{\frac{P_0 h_x}{2}} + \pi P_0 h_x / 2 \right\} - \pi P_0 h_x / 2 e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} (1 - e^{kh_c})$$

$$\beta_4 = -\alpha \left\{ (P_0 h_x / 2)^2 + (\pi/2)^2 - \pi P_0 h_x / 2 \right\} e^{\frac{P_0 h_x}{2}} \left\{ e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} - P_0^2 h_x / 2 e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} (1 - e^{kh_c}) \right\}$$

$$\beta_1 = \alpha e^{kh_c} \left\{ \left((2h_x/2)^2 - (\pi/2)^2 \right) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} - \pi P_0 h_x / 2 \right\} + \pi P_0 h_x / 2 (1 - e^{kh_c})$$

$$\beta_2 = -\alpha e^{kh_c} \left\{ (2h_x/2)^2 - (\pi/2)^2 - \pi P_0 h_x / 2 (1 + 2 \operatorname{sen} h \frac{P_0 h_x}{2}) \right\} e^{-\frac{P_0 h_x}{2}}$$

$$\beta_3 = \alpha e^{kh_c} e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} \left\{ \left((2h_x/2)^2 - (\pi/2)^2 \right) e^{\frac{P_0 h_x}{2}} + \pi P_0 h_x / 2 \right\} - \pi P_0 h_x / 2 e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} (1 - e^{kh_c})$$

$$\beta_4 = -\alpha e^{kh_c} \left\{ (2h_x/2)^2 + (\pi/2)^2 - \pi P_0 h_x / 2 \right\} \pi e^{\frac{P_0 h_x}{2}} \left\{ e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} + P_0^2 h_x / 2 e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} (1 - e^{kh_c}) \right\}$$

$$g_0 = -\alpha \left\{ \pi \left(\frac{P_0 h_x}{2} \right)^2 + (\pi/2)^2 \right\} + \left((2h_x/2)^2 - (\pi/2)^2 \right) e^{-\frac{P_0 h_x}{2}} - \pi P_0 h_x / 2 \left\{ (1 - e^{kh_c}) \right\}$$

con $\alpha = h_c/h_x$ y $K = -P_0/4 \left((\pi/P_0 h_x)^2 + 1 \right)$.

El orden de aproximación de estas esquemas es el mismo que para los esquemas del problema Dirichlet de la sección anterior.

- Tratamiento Incompleto.

Si la ecuación (2.1) se aproxima en la forma (1.39), se tendrá un esquema numérico diferente a los anteriores. Los operadores P y Q^* se definen en la forma (1.41), pero en este caso los operadores de frontera serán:

$$\begin{aligned} \langle B u, v \rangle &= -\theta h_x / \rho_e v(1) \frac{d^2 u}{dx^2}(1) - \theta h_x u(0) (1/\rho_e \frac{d^2 v}{dx^2}(0) + v(0)) \\ \langle C^* u, v \rangle &= -\theta h_x / \rho_e v(0) \frac{d^2 u}{dx^2}(0) - \theta h_x u(1) (1/\rho_e \frac{d^2 v}{dx^2}(1) + v(1)) \end{aligned} \quad (2.8)$$

en tanto que los operadores de salto y promedio son los mismos (1.43).

Tomando en cuenta que:

$$\langle P u, v \rangle = \int_0^1 v(x) \left[1 + h_x (1-\theta) \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d}{dx} \right) \right] u^T(x) dx$$

$$\langle B u, v \rangle = \theta h_x (1/\rho_e \frac{d^2 v}{dx^2}(0) + v(0))$$

$$\langle C u, v \rangle = 0$$

y tomando $\theta = 1$ y las funciones de peso (1.47), se obtiene el sistema de ecuaciones:

$$h_x / \rho_e u(1) \frac{d^2 v}{dx^2}(1) - h_x / \rho_e \sum_{r=i-1}^{i+1} u_r^{n+1} \left[\frac{d^2 v}{dx^2} \right]_{x_r} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} u^n(x) \varphi_i(x) dx + h_x / \rho_e \frac{d^2 v}{dx^2}(0) \quad (2.9)$$

$$\text{con } \left[\frac{d^2 v}{dx^2} \right]_{x_0} = \left[\frac{d^2 v}{dx^2} \right]_{x_I} = 0 \quad \text{y } i = 1, 2, \dots, I-1.$$

Este es un sistema de $I-1$ ecuaciones con I incógnitas; el sistema se

completa con la ecuación:

$$h_c u''(1) \left(\frac{1}{r_2} \frac{d\psi}{dx}(1) + \psi'(1) \right) - h_c/r_2 u''(1) \left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{x=1} = \int_{x_2=1}^1 u''(x) \psi_x(x) dx$$

donde $\psi_x(x)$ es la función de peso que se muestra en el Apéndice D. En este caso, los valores de los coeficientes del sistema (2.7) — una vez hechas las aproximaciones adecuadas en $u''(x)$ para poder evaluar las integrales (igual que para el problema Dirichlet), son:

$$f_1 = \Delta/2 e^{\frac{P_2 h_c}{2}}$$

$$f_2 = -\Delta \cosh \Delta/2$$

$$f_3 = \Delta/2 e^{-\frac{P_2 h_c}{2}}$$

$$f_4 = -P_2 h_c/2 \sinh \Delta/2 - \Delta/2 \cosh \Delta/2$$

$$g_1 = -P_2 h_c^2/h_x e^{\frac{P_2 h_c}{2}} \left\{ (r_2/\alpha - 1 + e^{-r_2/\alpha})/r_2^2 - (r_1/\alpha - 1 + e^{-r_1/\alpha})/r_1^2 \right\}$$

$$g_2 = -P_2 h_c^2/h_x e^{\frac{P_2 h_c}{2}} \left\{ (e^{-r_1/\alpha} (r_1/\alpha + 1) - 1)/r_1^2 - (e^{-r_2/\alpha} (r_2/\alpha + 1) - 1)/r_2^2 \right\}$$

$$- P_2 h_c^2/h_x e^{-\frac{P_2 h_c}{2}} \left\{ (e^{r_1/\alpha} (r_1/\alpha - 1) + 1)/r_1^2 - (e^{r_2/\alpha} (r_2/\alpha - 1) + 1)/r_2^2 \right\}$$

$$g_3 = -P_2 h_c^2/h_x e^{-\frac{P_2 h_c}{2}} \left\{ (r_2/\alpha + 1 - e^{r_2/\alpha})/r_2^2 - (r_1/\alpha + 1 - e^{r_1/\alpha})/r_1^2 \right\}$$

$$g_4 = -P_2 h_c^2/h_x e^{\frac{P_2 h_c}{2}} \left\{ (r_1/\alpha + 1) e^{-r_1/\alpha} - 1 \right\}/r_1^2 - \left\{ (r_2/\alpha + 1) e^{-r_2/\alpha} - 1 \right\}/r_2^2$$

$$g_0 = -P_2 h_c^2/h_x e^{\frac{P_2 h_c}{2}} \left\{ (r_2/\alpha - 1 + e^{r_2/\alpha})/r_2^2 - (r_1/\alpha - 1 + e^{-r_1/\alpha})/r_1^2 \right\}$$

$$- \Delta/2 e^{\frac{P_2 h_c}{2}}$$

donde:

$$\alpha = h_c/h_x$$

$$\Delta = ((P_2 h_c)^2 + 4P_2 h_c)^{1/2}$$

$$r_1 = P_2 h_c/2 + \Delta/2$$

$$r_2 = P_2 h_c/2 - \Delta/2$$

Finalmente, si se trabaja a la ecuación (2.1) en la forma (1.50) es posible obtener un par de esquemas numéricos diferentes a los anteriores. En este caso se definen los operadores P_y y Q^* también en las formas (1.51) y (1.52) respectivamente, en tanto que los operadores de frontera serán aquí:

$$\langle B u, v \rangle = v(1) \frac{\partial u}{\partial x}(1) + u(0) \frac{\partial v}{\partial x}(0) + P_0 u(0) v(0) \quad (a)$$

$$\langle C^* u, v \rangle = v(0) \frac{\partial u}{\partial x}(0) + u(1) \frac{\partial v}{\partial x}(1) + P_0 u(1) v(1) \quad (b)$$

(2.10)

y los operadores de salto y promedio serán los mismos (1.55) y (1.56).

Alando las funciones de peso (1.58) y aproximando a la solución $u(x, t)$ en la forma (1.62), el esquema completamente implícito tendrá la forma:

$$\begin{aligned} -M_I^{n+1} \frac{d\psi_i}{dx}(1) + \sum_{r=i-1}^{i+1} \left(\left[\frac{d\psi_r}{dx} \right]_{x_r} - P_0/h_c \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_r(x) dx \right) M_r^{n+1} \\ = -P_0/h_c \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_r(x) dx M_r^n - \frac{d\psi_i}{dx}(0) \end{aligned} \quad (2.11)$$

con $\left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_0} = \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_1} = 0$, $i=1, 2, \dots, I-1$. La ecuación complementaria es:

$$\begin{aligned} \left(\left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_{i-1}} - P_0/h_c \int_{x_{i-1}}^1 \chi_{i-1}(x) \psi_{i-1}(x) dx \right) M_{i-1}^{n+1} + \\ + \left(-\frac{d\psi_i}{dx}(1) - P_0 \psi_i(1) - P_0/h_c \int_{x_{i-1}}^1 \chi_i(x) \psi_i(x) dx \right) M_i^n \\ = -P_0/h_c \sum_{r=i-1}^{I-1} \int_{x_{i-1}}^1 \chi_r(x) \psi_r(x) dx M_r^n \end{aligned}$$

Este es un sistema lineal de la forma (2.7). Los valores de los coeficientes serán en este caso

$$P_1 = (\alpha - 1/2) P_0^2 h_x^2 + P_0 h_x - 1 + e^{-P_0 h_x}$$

$$P_2 = -[P_0 h_x (P_0 h_x + 1) (1 + e^{-P_0 h_x}) + 1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4) (1 - e^{-P_0 h_x})]$$

$$\beta_3 = (\alpha + 1/2) P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x} - 1 + (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_4 = -\{(\alpha + 1/2) P_0^2 h_x^2 + e^{-P_0 h_x} (P_0 h_x + 1) - 1\}$$

$$\beta_1 = -(P_0^2 h_x^2 / 2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_2 = -\{1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4) (1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0 h_x (1 + e^{-P_0 h_x})\}$$

$$\beta_3 = -(1 - (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x} - 1/2 P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_4 = -(P_0^2 h_x^2 / 2 + e^{-P_0 h_x} (P_0 h_x + 1) - 1)$$

$$g_0 = -\alpha P_0^2 h_x^2$$

$$, \alpha = h_c / h_x$$

El esquema completamente explícito tendrá la forma:

$$P_0 / h_c \sum_{r=1}^{i+1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_i(x) dx \mu_r^{n+1} = -\mu_i^n \frac{d\psi_i}{dx}(1) + \sum_{r=i-1}^{i+1} \left(\frac{d\psi_i}{dx} \right)_{x_r} + P_0 / h_c \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_i(x) dx \mu_r^n + \frac{d\psi_i}{dx}(0) \quad (2.13)$$

con $\left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_0} = \left[\frac{d\psi_i}{dx} \right]_{x_I} = 0$, $i = 1, 2, \dots, I-1$. La ecuación complementaria es:

$$P_0 / h_c \sum_{r=i-1}^{i+1} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_i(x) dx \mu_i^{n+1} = \left(\frac{d\psi_i}{dx} \right)_{x_{i-1}} + P_0 / h_c \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_i(x) dx \mu_{i-1}^n + \left(-\frac{d\psi_i}{dx}(1) - P_0 \psi_i(1) + P_0 / h_c \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \chi_r(x) \psi_i(x) dx \right) \mu_i^n$$

Los valores de los coeficientes en este caso son:

$$\beta_1 = P_0^2 h_x^2 / 2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_2 = 1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4) (1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0 h_x (1 + e^{-P_0 h_x})$$

$$\beta_3 = 1 - (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x} - P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x} / 2$$

$$P_4 = P_0^2 h_x^2 / 2 + e^{-P_0 h_x} (P_0 h_x + 1) - 1$$

$$P_1 = (\alpha + 1/2) P_0^2 h_x^2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x}$$

$$P_2 = -P_0 h_x (P_0 h_x + 1) (1 + e^{-P_0 h_x}) + 1/2 (P_0^2 h_x^2 + 4) (1 - e^{-P_0 h_x})$$

$$P_3 = (\alpha - 1/2) P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x} + 1 - (P_0 h_x + 1) e^{-P_0 h_x}$$

$$P_4 = -(\alpha - 1/2) P_0^2 h_x^2 + e^{-P_0 h_x} (P_0 h_x + 1) - 1$$

$$g_0 = \alpha P_0^2 h_x^2$$

$$, \alpha = h_c / h_x$$

El orden de aproximación de estos esquemas es el mismo que para los esquemas del problema Dirichlet de la sección anterior.

Resultados.

Obtenidos los diferentes esquemas numéricos, en este capítulo se muestran los resultados que dan. Se empieza por exponer la estructura del programa que se utiliza para inventar cualquiera de los esquemas obtenidos. Después se hace un análisis detallado de los resultados que proporciona el esquema numérico con orden de aproximación más alta, que es el que surge del Tratamiento Completo cuando la constante de separación se toma $K = -\frac{1}{4}$.

Finalmente, se reportan también - sin entrar en detalles -, los resultados preliminares que se obtienen con algunos de los demás esquemas numéricos que se obtienen tanto con el Tratamiento Completo como con el Tratamiento Incompleto, los detalles serán el tema de trabajos posteriores.

1. Programas.

Una vez obtenidos los sistemas de ecuaciones, lo que resta es invertirlos. En todos los casos presentados, las matrices asociadas a estos sistemas de ecuaciones tienen estructura tridiagonal y la inversión de este tipo de matrices es relativamente simple. Hay que notar que los esquemas numéricos aquí propuestos son tan simples en su estructura como los esquemas que se obtienen al utilizar los métodos clásicos de aproximación, diferencias finitas y elemento finito; en otras palabras, la memoria y tiempo que ocupan para su resolución es mínima aun para particiones temporales y/o espaciales muy cerradas.

La estructura de todos los programas elaborados para obtener las soluciones numéricas en los diferentes casos es por tanto la misma. El diagrama de flujo de estos programas implementados en una computadora H. P. 9000 es el siguiente:

Comienzo

Dimencionamiento de variables.

Lectura de datos

Definición de las funciones IFIP que hacen al proceso iterativo en el tiempo

Cálculo de variables auxiliares para el cálculo de los coeficientes de las matrices

Escritura de datos del problema.

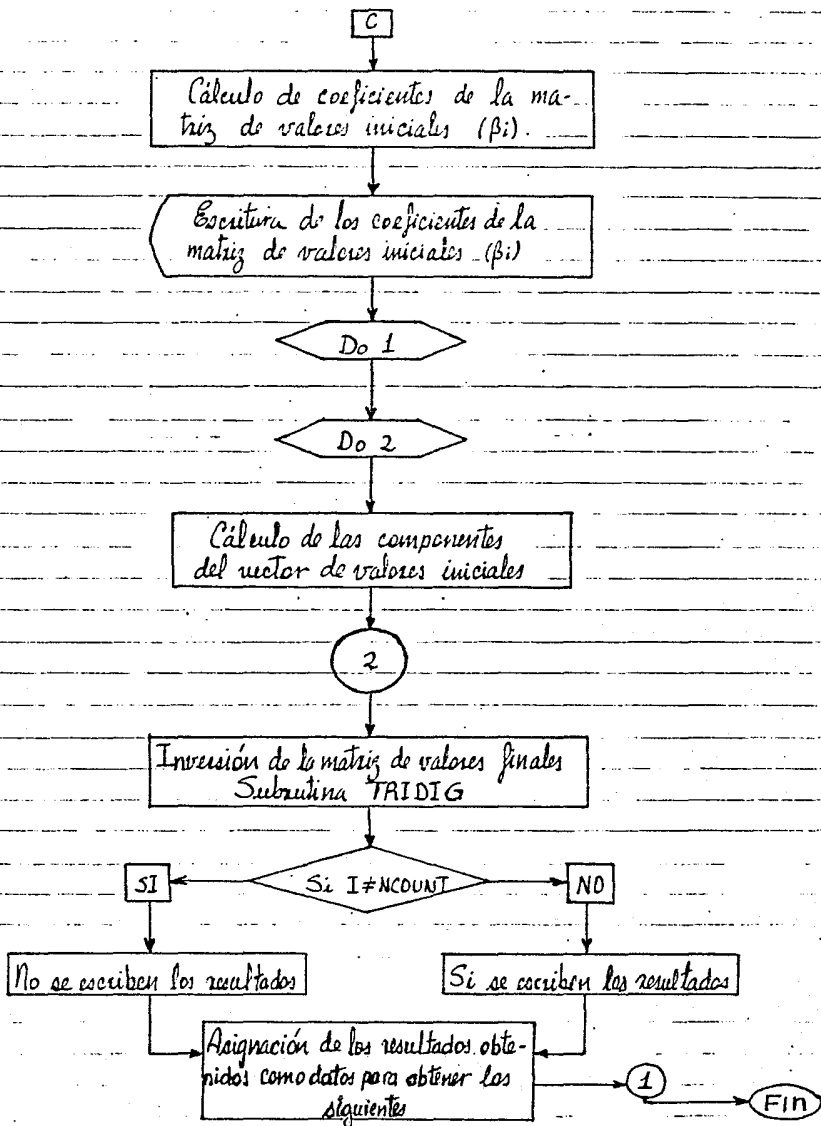
Do 3

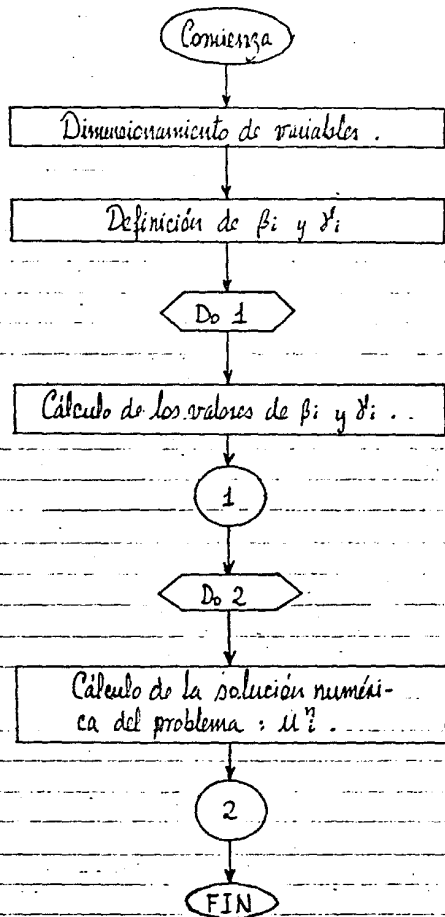
Cálculo de coeficientes de la matriz de valores finales, (P_i) .

3

Escritura de los coeficientes de la matriz de valores finales (P_i) .

c





2. Caso $\Delta^2 = 0$ ($k = -P_0/4$).

La principal desventaja de este esquema es que tanto su estabilidad como su convergencia están condicionados. Determinar analíticamente una relación de estabilidad a partir de los valores

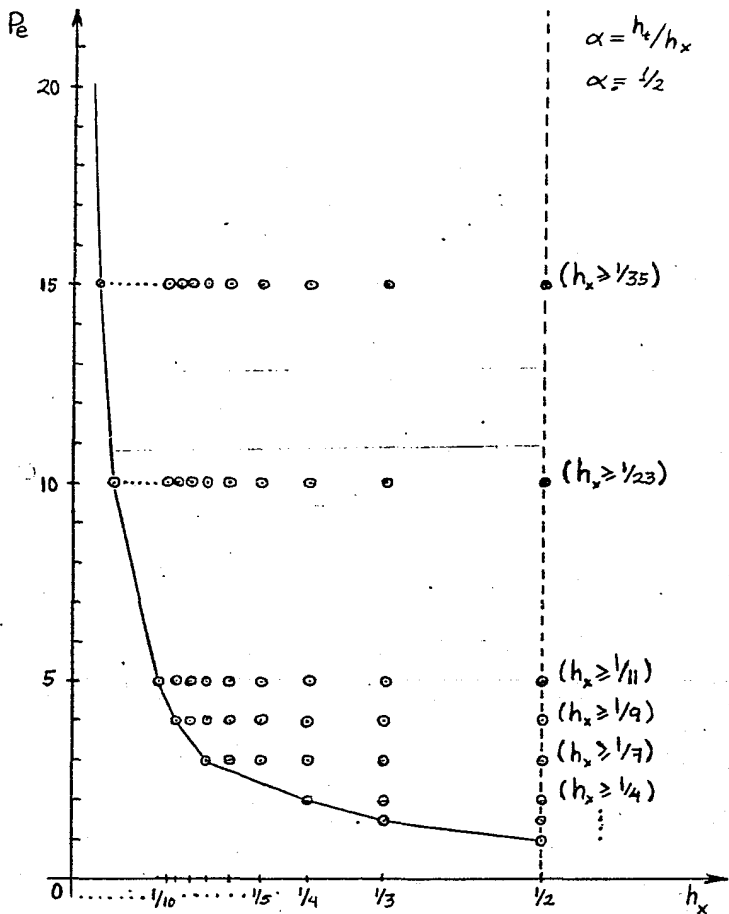


fig. 2.1.

de los coeficientes del sistema (1.25) del capítulo anterior es realmente imposible (ver Apéndice B).

Se tiene entonces que recurrir entonces a numerosas corridas de prueba para poder así determinar una relación aproximada de estabilidad del método. Para hacer esto, primero se toman valores

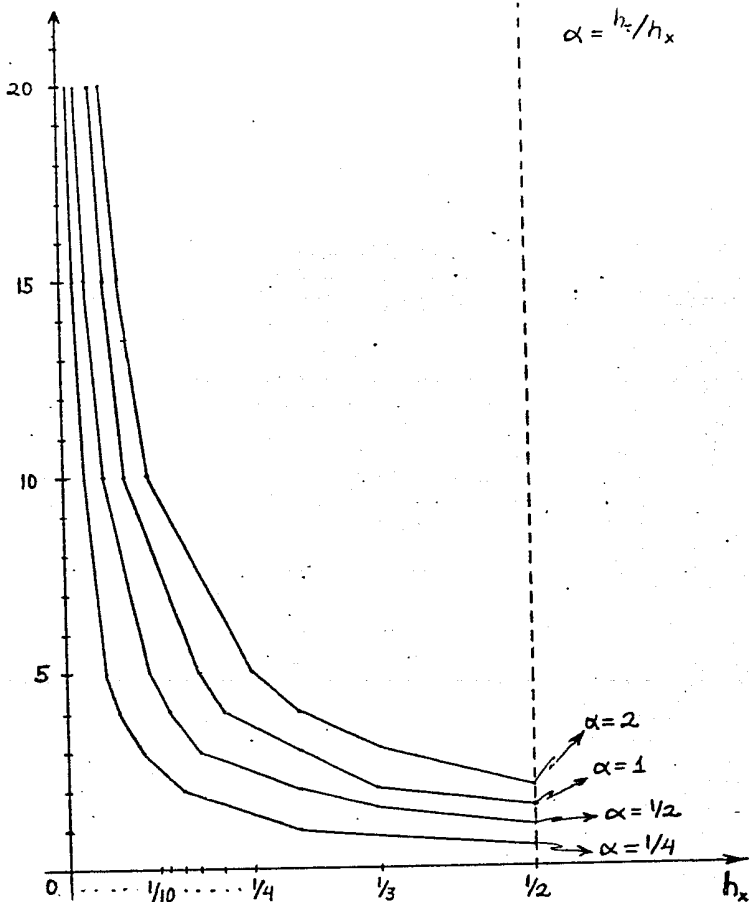


fig. 2.2.

lijos de la relación $\alpha = h_z/h_x$, después, para un número Pe se efectúan corridas para diferentes valores de h_x y h_z que satisfacen la relación α . El proceso se repite para diferentes números Pe . Representando gráficamente (fig. 2.1) a los valores para los cuales el esquema es estable, es relativamente fácil determinar esta relación aproximada. Por la forma de las "curvas frontera" de estos conjun-

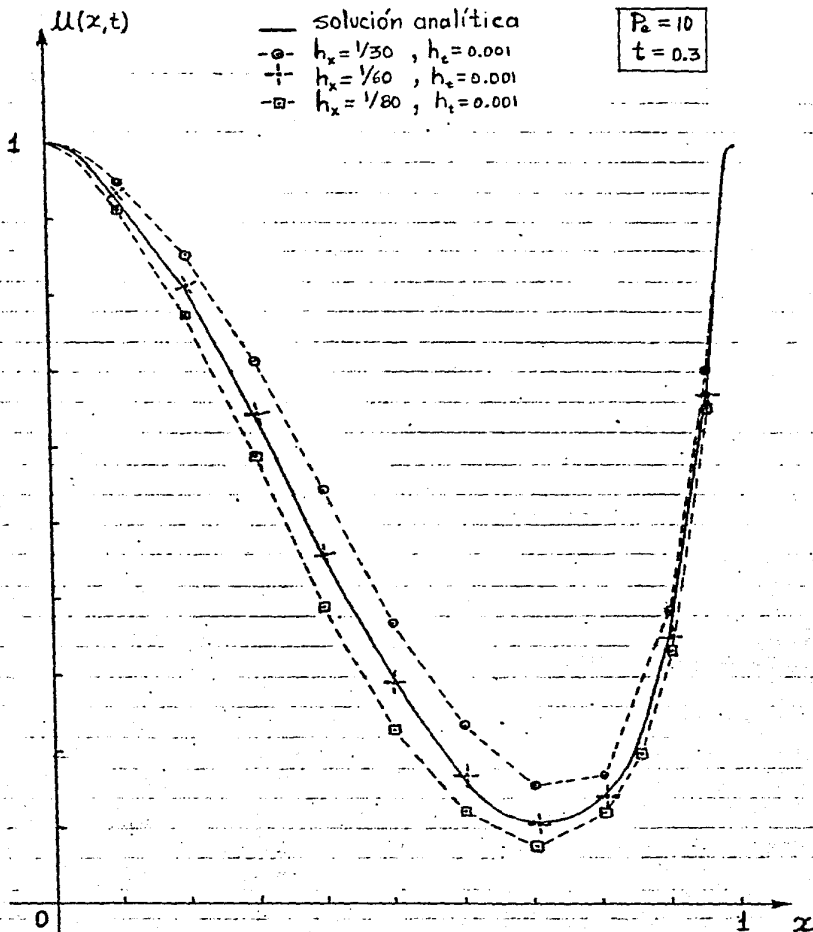


fig. 2.3

tos de puntos que conforman lo que se puede llamar una "región de estabilidad" (fig. 2.2), se puede pensar en asociar una relación del tipo hiperbólico:

$$Pe_{h_x} = \alpha \quad (2.1)$$

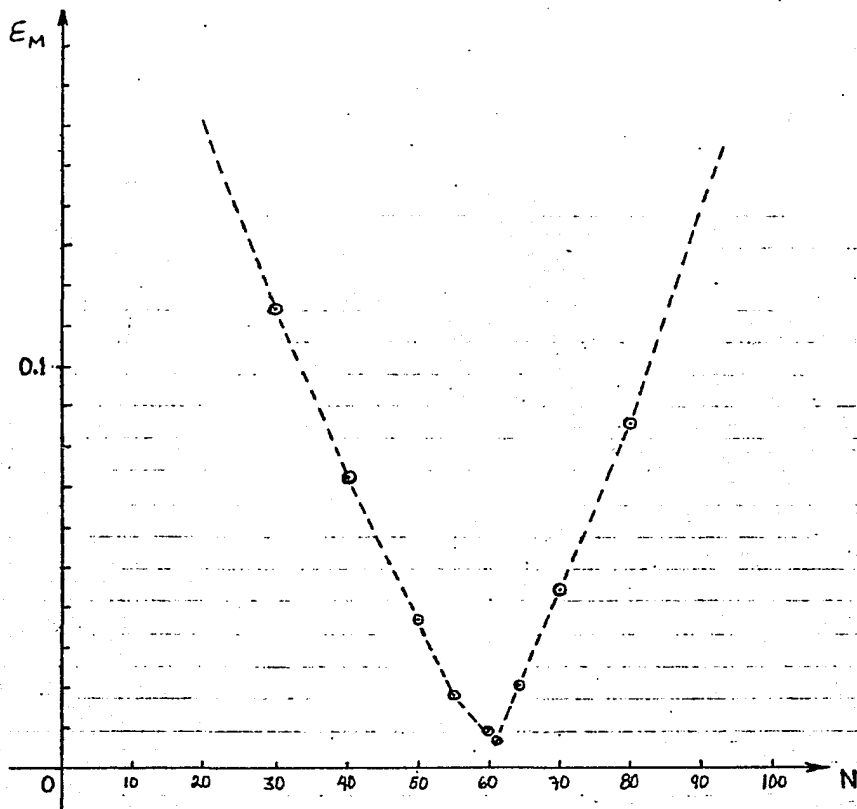


fig. 2.4

que es la forma más simple de relacionar en forma aproximada a estos puntos frontera. De esta relación y teniendo en cuenta que debe contener a los puntos que están por encima de la curva, se puede llegar fácilmente a la relación:

$$h_e / \rho_c h_s^2 \leq 1 \quad (2.2)$$

que indica el rango ó conjunto de valores que puede tener uno de los tres parámetros cuando se fijan los valores de los otros dos.

Esta relación - para ciertos rangos de valores -, es suficiente aunque no necesaria, ya que para valores cercanos a estas curvas frontera de la "región de estabilidad" puede no cumplirse y el esquema resultar estable, aunque con cierto comportamiento un poco irregular, i.e. el frente presenta pequeñas oscilaciones. Esto hace sospechar un comportamiento irregular para otros valores de P_2 , h_x y h_z ; se hicieron entonces unas pruebas para el caso que se puede considerar aquí como más importante: cuando domina la aducción (i.e. cuando P_2 es grande).

El resultado es la aparición de oscilaciones - que pueden llegar a ser bastante grandes -, en el frente de concentración cuando se toma el paso temporal muy pequeño respecto al paso espacial (dos o más órdenes de magnitud); aunque se satisface con mucho, la relación (2.2) en estos casos, las oscilaciones desaparecen cuando h_x y h_z son del mismo orden de magnitud:

El siguiente paso es obtener resultados para diferentes valores de P_2 , h_x , h_z que estén dentro de los rangos que permite la relación (2.2), y compararlos con la solución analítica del problema. La fig. 2.3 muestra este comportamiento para $P_2 = 10$, $h_z = 0.001$, $h_x = 1/30, 1/60$ y $1/80$ en el instante $t = 0.3$. Es notable (fig. 2.3) cuando la partición del intervalo no es muy fina ($h_x = 1/30$), un cierto adelanto respecto al proceso real, aunque es también notable que ambos frentes son bastante paralelos. Al ir cerrando la partición en x , el frente aproximado se va acercando al frente real, y existe una partición ($h_x = 1/60$) para la cual prácticamente coinciden ambos frentes durante todo el proceso, en otras palabras, el error es muy pequeño. Si se continúa cerrando la partición, el frente aproximado se va retrasando paralelamente respecto al frente real; este último comportamiento predice en cierto modo la inestabilidad del esquema al seguir cerrando la red sin tomar en cuenta h_z .

Para comprender mejor el comportamiento anterior, es conveniente evaluar el error que se tiene para diferentes particiones en x , para valores fijos de h_z y P_2 durante todo el proceso. En la fig. 2.4 se muestra

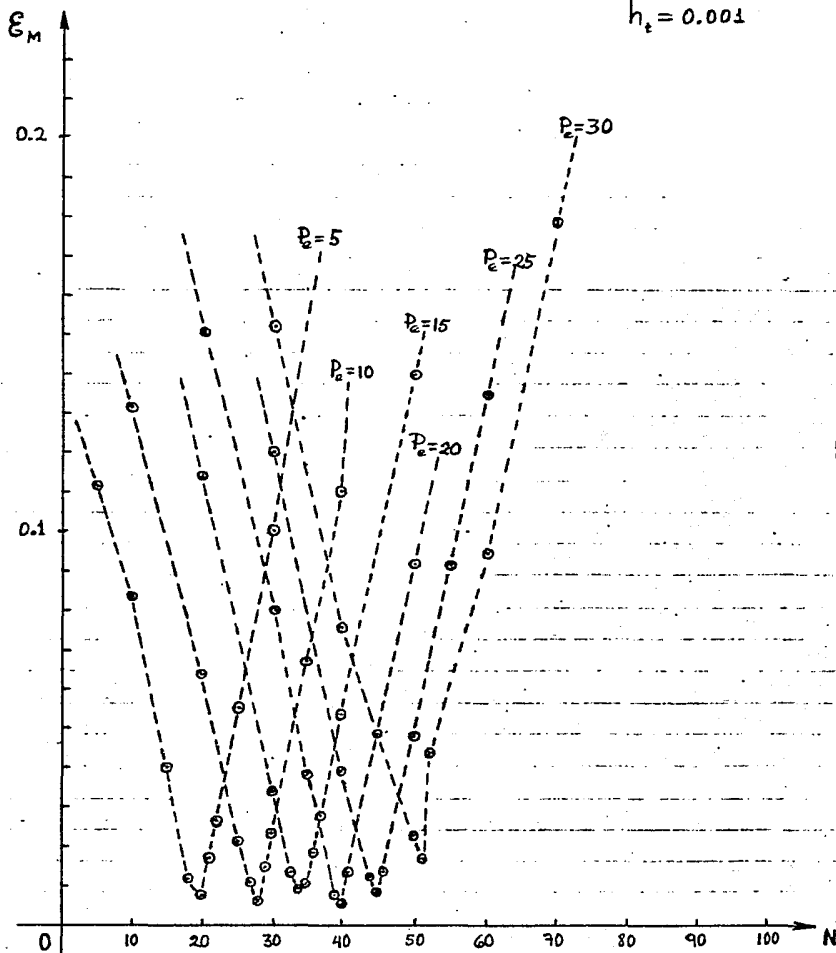


fig. 2.5

el comportamiento del valor absoluto del error más grande que se tiene durante todo el proceso, para $h_t = 0.001$, $P_\epsilon = 10$ y diferentes particiones en x ; ahí se ve claramente la existencia de una partición en x para la

(*) en este caso la diferencia entre el valor real y el valor aproximado.

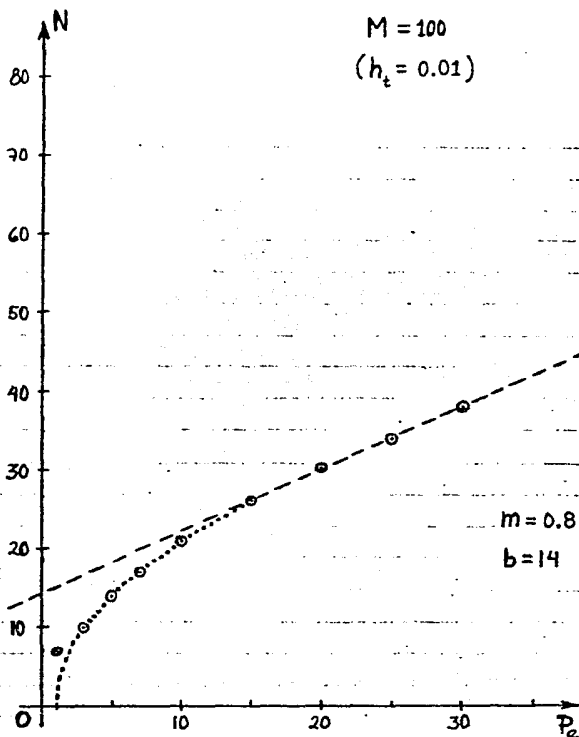


fig. 2.6

cual el error es mínimo, lo que indica que los frentes real y aproximado prácticamente coinciden durante todo el proceso.

Cambiando el valor de la partición en el tiempo ó el número P_e , se obtienen gráficas con un comportamiento similar (fig. 2.5). En este caso (fig. 2.5) se mantiene un paso h_t fijo ($h_t = 0.001$) y se varía el número P_e ; aquí se puede observar un espaciamiento bastante uniforme entre estos mínimos de error. El paso lógico es ahora ver si existe alguna relación entre las particiones en x que corresponden a estos mínimos y los valores de P_e .

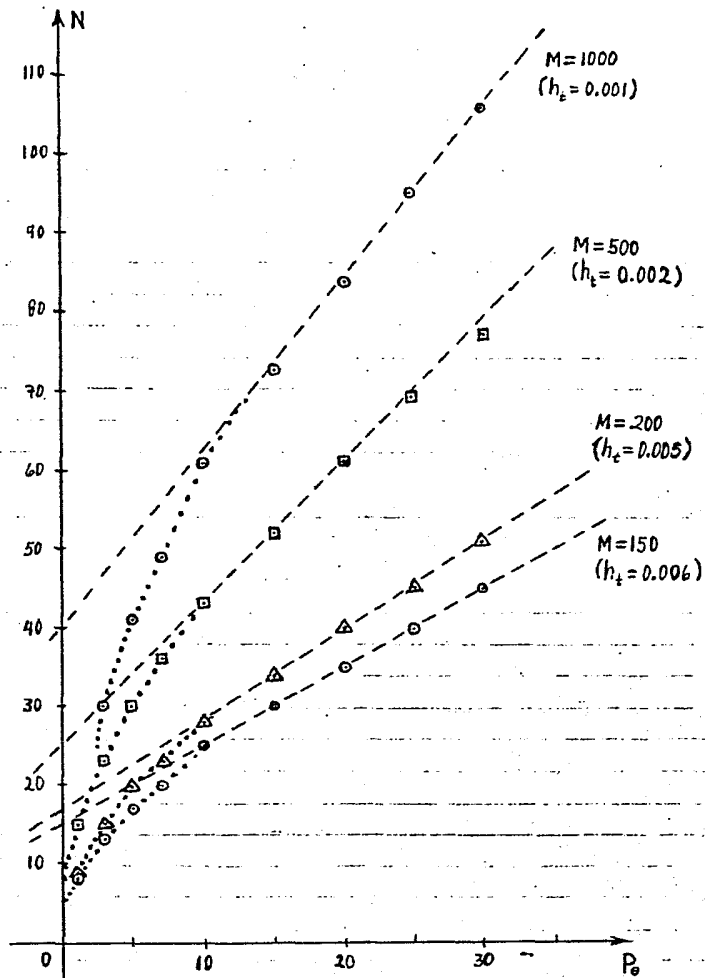


fig. 2.7

Con h_i fijo, para cada P_0 se grafica el correspondiente valor de la partición espacial para la cual el error es mínimo (fig. 2.6); se procede del mismo modo para diferentes pasos en el tiempo (fig. 2.7). Es notable el comportamiento que presentan estas curvas, a partir de

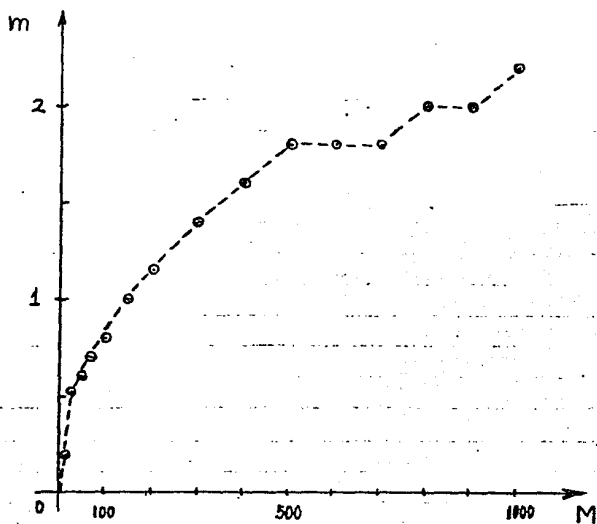


fig. 2.8

ciertos valores de P_0 , las particiones que dan un error mínimo se alinean en una recta, aunque no en todos los casos (fig. 2.7). Puede decirse entonces que estas curvas se comportan como hipérbolas y que las rectas en que se alinean los puntos son las asíntotas de estas.

El comportamiento anterior invita a extrapolar y obtener valores de particiones para las cuales el error es mínimo. Este es un primer resultado positivo; el esquema numérico puede ser utilizado para calcular valores de la solución analítica - dentro de un cierto rango de error -, cuando P_0 es grande, ya que en este caso la solución analítica obtenida para este problema falla (ver Apéndice E).

Por todo lo anterior, se infiere que existe una relación $f(P_0, h_x, h_t) = 0$, para la cual el error del esquema numérico es mínimo. El problema sería ahora determinar - en base a numerosas condiciones de prueba -, esa superficie de errores mínimos.

Lo más simple de realizar en este momento con los valores ya obtenidos, es determinar la variación de la pendiente de las asíntotas cuando se cambia el paso temporal h_2 . Para los primeros valores de M (fig. 2.8), $M = 1/h_2$, el comportamiento es bastante uniforme, como una raíz cuadrada (lo que en realidad es), pero a partir de un cierto valor ($M = 500$), el comportamiento deja de ser uniforme (fig. 2.8), lo que impide extrapolar en forma simple para particiones más finas en el tiempo.

Por otro lado, es necesario conocer el comportamiento de las ordenadas al origen de cada una de las asíntotas. En la fig. 2.9 se muestra el comportamiento de las ordenadas al origen contra el número de nodos en el intervalo temporal unitario. Se puede ver que los valores de las ordenadas al origen aumentan más o menos uniformemente y puede ajustarse usando el método de mínimos cuadrados, una recta que no queda del todo mal (fig. 2.9).

Sin embargo, el error dado por esta recta respecto a los valores de las ordenadas al origen producirá errores en la localización de las particiones que dan soluciones numéricas que presentan un error mínimo respecto a la solución real del problema. Aproximando a trozos mediante rectas se puede eliminar esta dificultad, quedando el problema de no poder extrapolar confiada mente para particiones más finas en el tiempo. No obstante, utilizar particiones más finas en el tiempo es multiplicar el trabajo de cálculo y así se gase a que aumenten los errores de redondeo del proceso. Sin embargo, esta elección dependerá de los requerimientos del problema, por tanto, es mejor tener una relación más general para determinar las particiones que dan errores mínimos dados cualesquiera valores de h_2 y P_2 con mayor precisión.

Se propone entonces evaluar la relación $h_2/P_2 h_2^2$ (alternativamente $M^2/P_2 N$) en los puntos que forman a las hipérbolas de las figuras 2.6 y 2.7. Para cada hipérbola se obtiene el promedio de todas estas evaluaciones - que no difieren demasiado -, y graficando todos estos promedios contra la correspondiente partición en el tiempo (fig. 2.9),

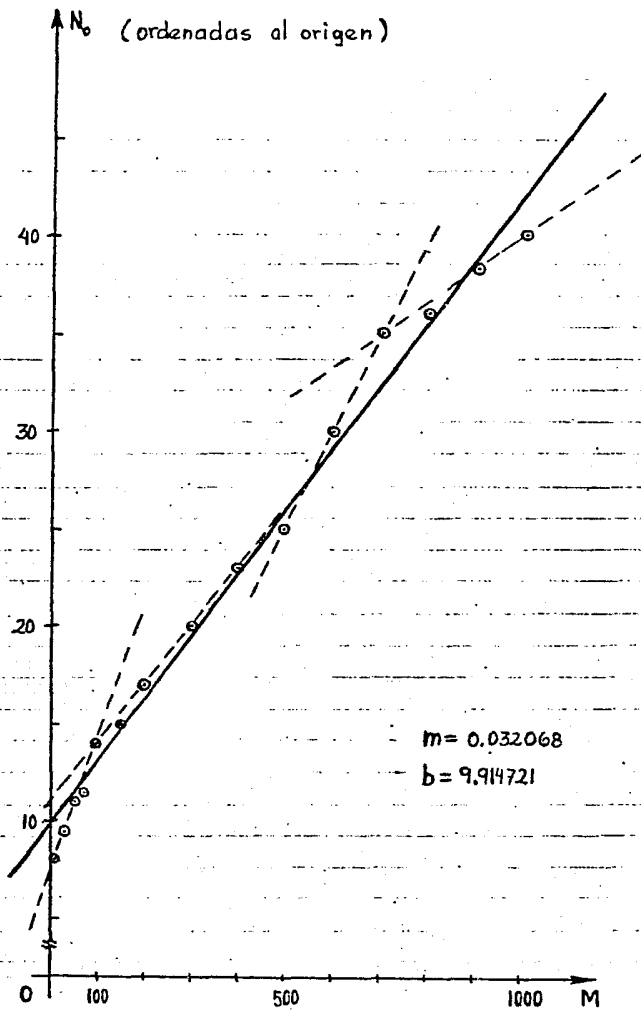


Fig. 2.9

se puede observar una relación muy uniforme entre estos valores. Es notable la semejanza con una hipérbola equilátera trasladada.

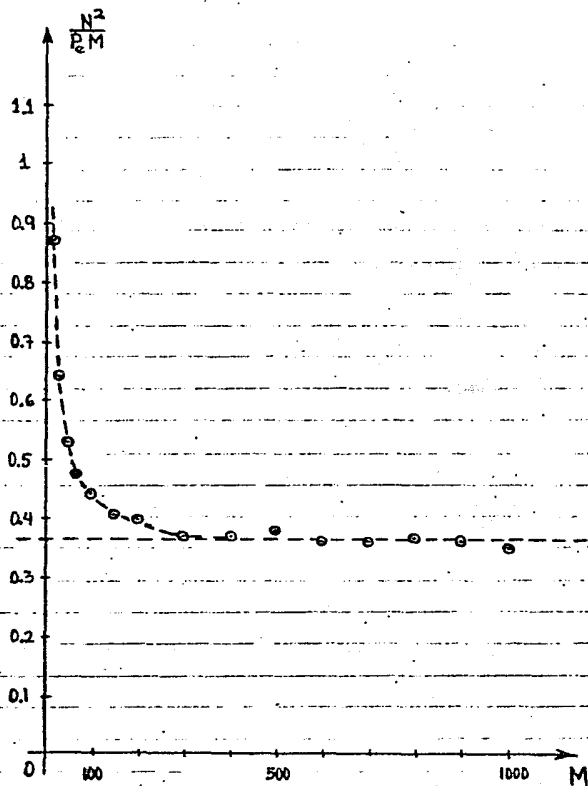


fig. 2.10

Es relativamente fácil ajustar una ecuación a estos puntos. Realizando una simple traslación y graficando los inversos de las nuevas ordenadas contra M , se puede ajustar para los primeros puntos una recta; regresando a las variables originales se encuentra la relación:

$$(0.1596706M - 1.7441686)(N/\Sigma N - 0.3637937) = 1 \quad (2.3)$$

con la que es posible determinar - dadas la partición temporal y el número de Peclét -, el valor de la partición espacial para la cual el error

que se tiene en la solución numérica es mínimo.

Aunque aparentemente con la relación (2.3) todo está resuelto, existe un pequeño detalle: este tipo de relaciones solo se pueden determinar si y solo si se conoce la solución del problema, aunque sea en un rango limitado de valores, como en este caso. Sin embargo, en casi todos los problemas que se atacan numéricamente no se tiene ni tan solo una idea de como puede ser la solución analítica, ya no se diga conocerla. Entonces surgen dos preguntas:

¿Es posible determinar de alguna otra forma esta relación?, ¿Es posible determinar por otros medios alguna relación equivalente?

Todo intento para determinar la relación (2.3) u otra equivalente, deberá hacerse utilizando únicamente lo que puede dar la Aproximación Unificada y/o lo que se puede obtener a través de consideraciones de prueba.

Lo que se obtiene finalmente al aplicar la Aproximación Unificada son los valores de los coeficientes de la (s) matriz (es) del sistema de ecuaciones y lo que se obtuvo a través de consideraciones de prueba es la relación de estabilidad (2.2). Es obvio que la curva (2.3) está contenida en la región determinada por (2.2), pero tratar de obtener (2.3) a partir de los coeficientes del sistema de ecuaciones o bien, a partir de los residuos que se tienen al hacer la aproximación lineal de la solución del problema en (1.22) del capítulo anterior, es realmente imposible, ya que a la complejidad del problema, se une el desconocimiento del valor de algunas magnitudes que aparecen y que no se pueden eliminar.

Entonces lo que se puede hacer es examinar si dadas las soluciones numéricas obtenidas con valores (h_n, h_e, P_e) que satisfacen (2.3), existe alguna característica en ellas ó en alguno de los pasos intermedios efectuados para obtenerlas, que las distingan de las demás soluciones obtenidas con valores (h_n, h_e, P_e) que no satisfacen (2.3).

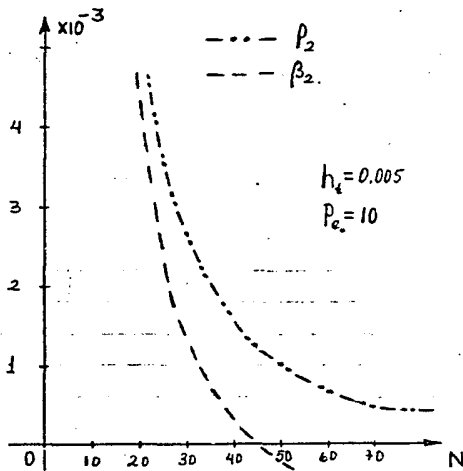


fig. 2.11

Para empezar se propone mofocar la atención a lo más simple de analizar: el comportamiento de los coeficientes del sistema de ecuaciones. El comportamiento de estos coeficientes como funciones de (h_x, h_t, P_e) se estudiará variando el valor de la posición especial h_x y manteniendo fijos los valores de h_t y P_e .

Para $h_t = 0.005$, $P_e = 10$, se muestra (fig. 2.11) el comportamiento de los "coeficientes diagonales" de la matriz de valores finales y de la matriz de valores iniciales, β_1

y β_2 respectivamente. Se aprecia un cambio de signo en los valores que toma β_2 en tanto que β_1 permanece siempre positivo. Lo mismo sucede cuando se toma otro peso temporal h_t ó cuando se varía el número P_e .

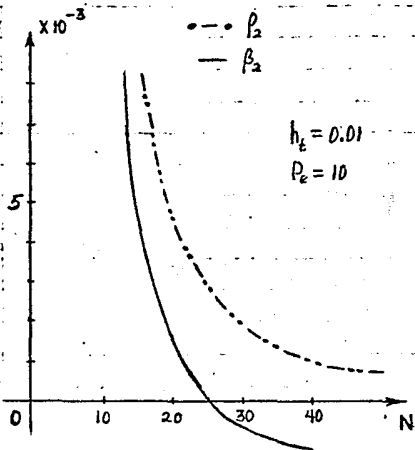
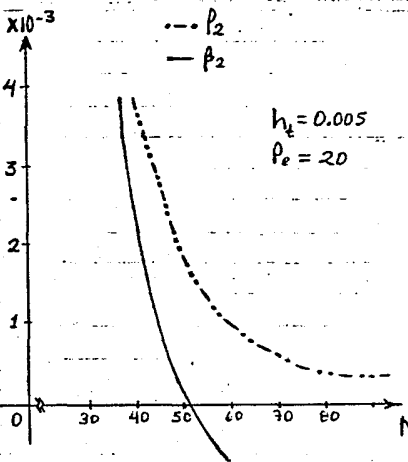


fig. 2.12

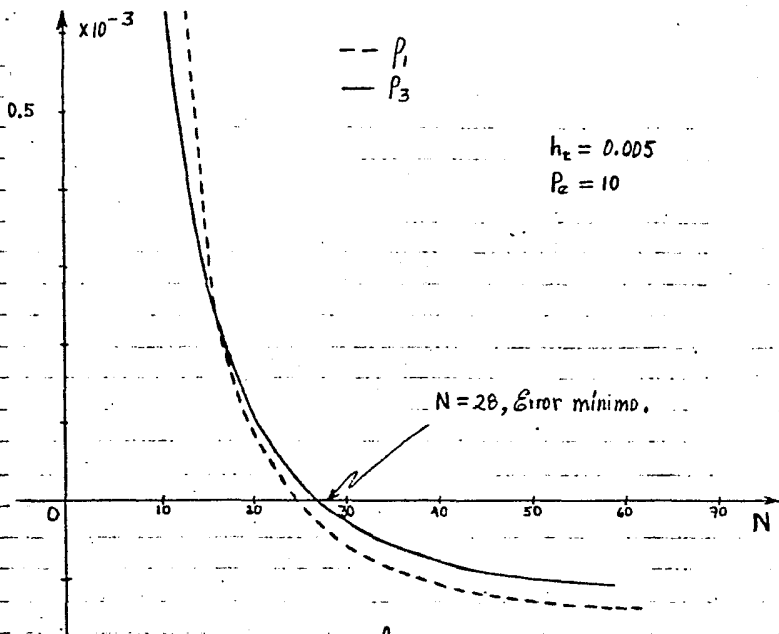


fig. 2.13

Para $h_e = 0.005$ y $P_e = 10$, se muestra (fig. 2.13) el comportamiento de los "coeficientes extremos" de la matriz de valores finales β_1 y β_2 . Ambos presentan un cambio de signo a medida que la partici\u00f3n espacial se cierra y es notable el hecho de que se anulan en valores muy cercanos al valor de la partici\u00f3n en x , que da soluciones num\u00e9ricas con un error m\u00ednimo, en especial el coeficiente β_3 . El comportamiento es el mismo para diferentes pasos temporales y/o diferentes valores de P_e , (fig. 2.14).

Finalmente, se muestra (fig. 2.15) para $h_e = 0.005$ y $P_e = 10$, el comportamiento de los "coeficientes extremos" de la matriz de valores iniciales β_1 y β_3 . Ninguno de los dos presenta cambio de signo, se mantienen positivos a medida que se cierra la partici\u00f3n espacial para cualesquiera valores de la partici\u00f3n temporal h_c y del n\u00famero de Pecl\u00e9t P_e , (fig. 2.15).

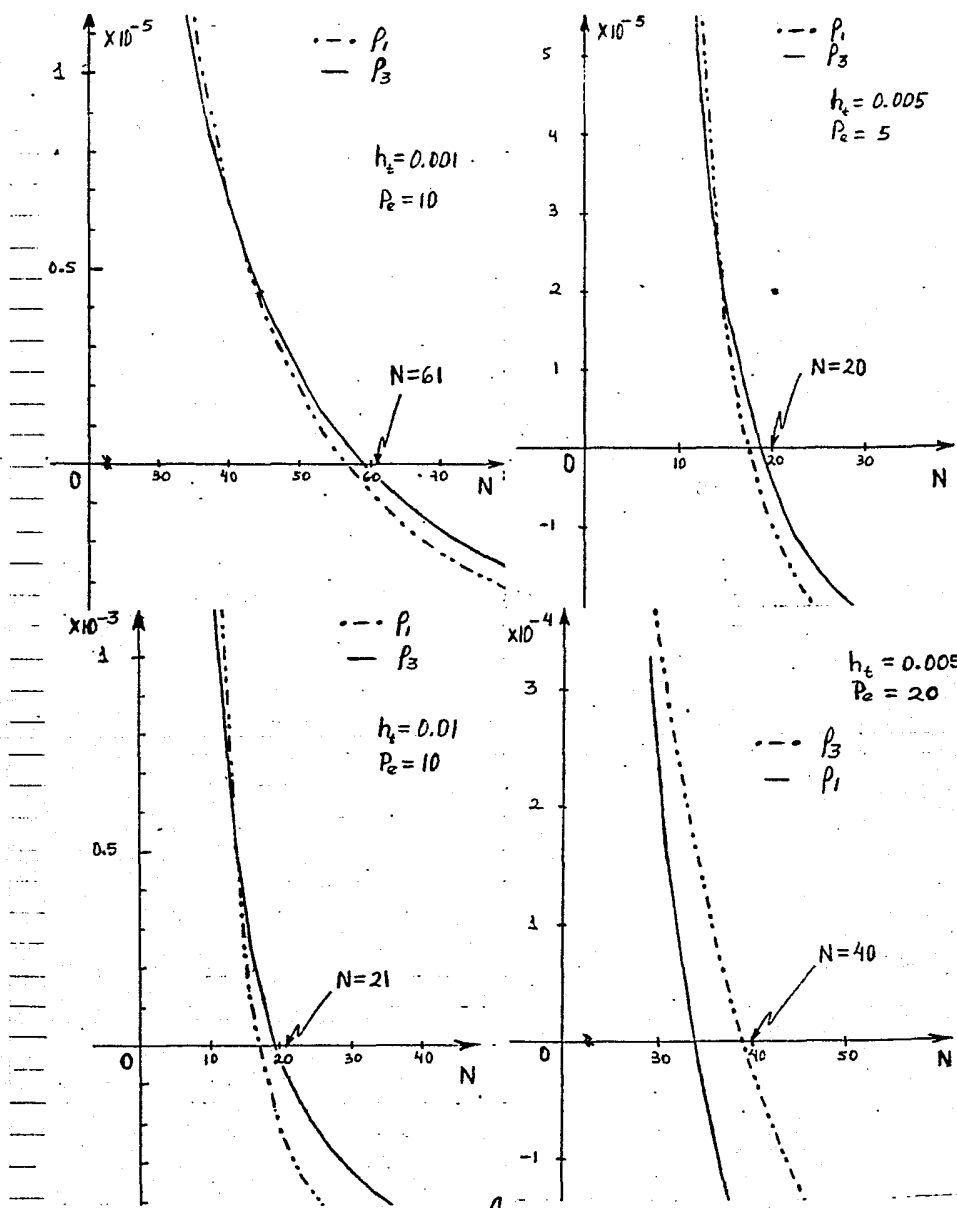
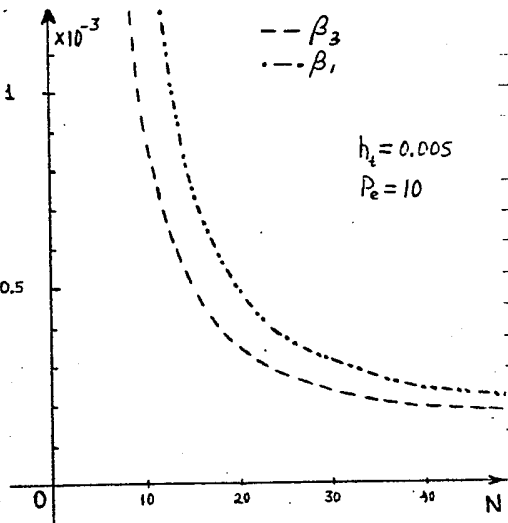


fig. 2.14



Se puede concluir por lo anteriormente visto, que escogiendo valores para la partición espacial tales que estén cerca de los valores en los que se anulan los coeficientes β_1 y β_3 , especialmente β_3 , se puede asegurar que el error en la solución numérica será pequeño aunque no necesariamente el mínimo.

Finalmente se aplicaron los resultados anteriores para obtener soluciones numéricas

Fig. 2.15

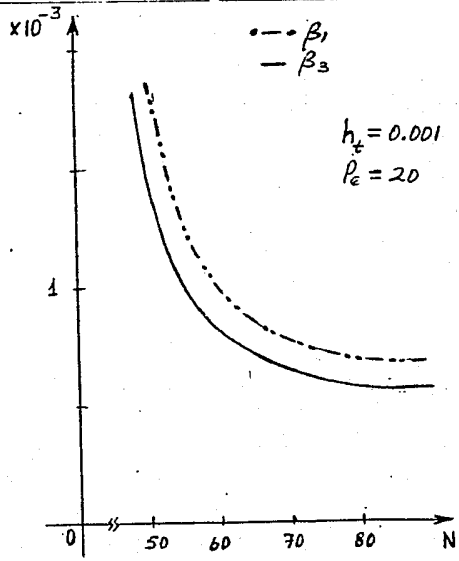
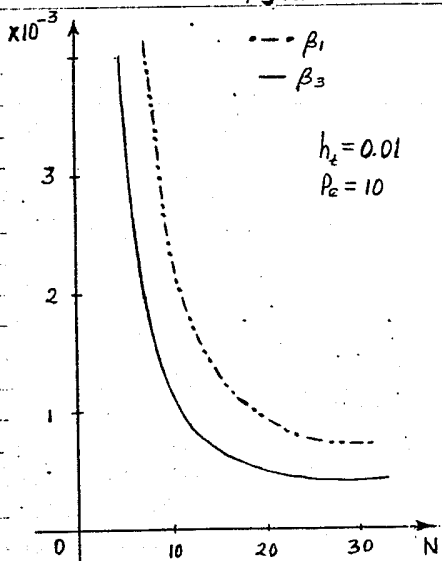


Fig. 2.16

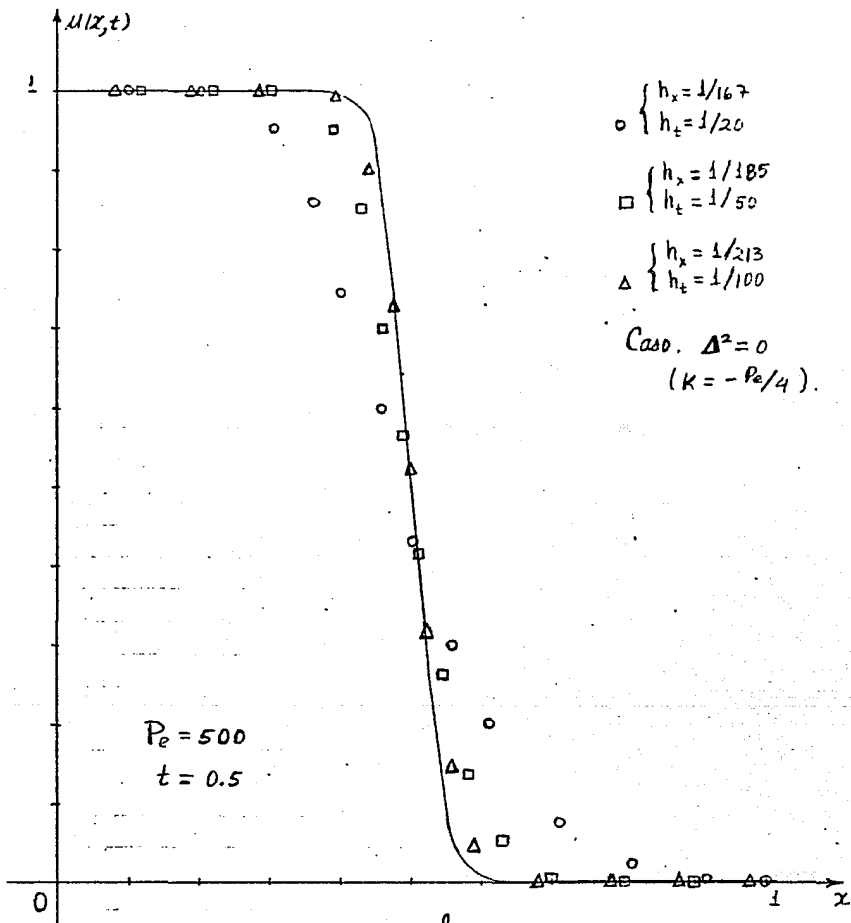


fig. 2.17

al problema de difusión dominado por advección con condiciones de frontera Dirichlet-Neumann (Allen, B.M. 1984). Se elige el valor $P_e = 500$ y se compara en un cierto instante ($t = 0.5$) con un frente dado por una solución analítica que describe al fenómeno durante los primeros instantes de su evolución, (Apéndice E).

Se puede observar (fig. 2.17) que para particiones temporales

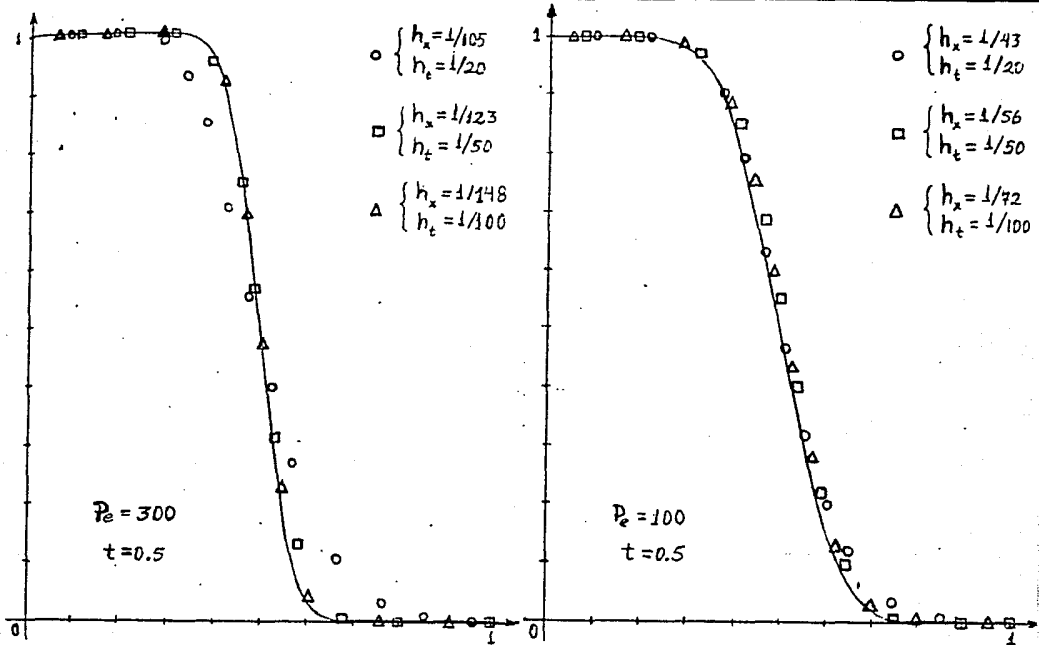


fig. 2.18

no muy cerradas ($h_t = 1/20$), la correspondiente partición espacial es - comparativamente con la primera - bastante más cerrada, ($h_x = 1/105$) y que la solución numérica que proporcionan presenta un alejamiento o dispersión respecto al frente real, igual al que se tiene al utilizar el método de las Diferencias Finitas. Al ir cerrando la red temporal, la correspondiente red espacial es comparativamente menor cerrada que antes, y la solución numérica se aproxima notablemente al frente real, más rápidamente que la solución obtenida por Diferencias Finitas (fig. 2.19).

Este mismo comportamiento se presenta también para números P_e menores (fig. 2.18).

Resumiendo, en este esquema numérico - cuando domina la advección -, se pueden presentar oscilaciones en la solución numérica si el paso temporal es muy pequeño respecto al paso espacial, (más de

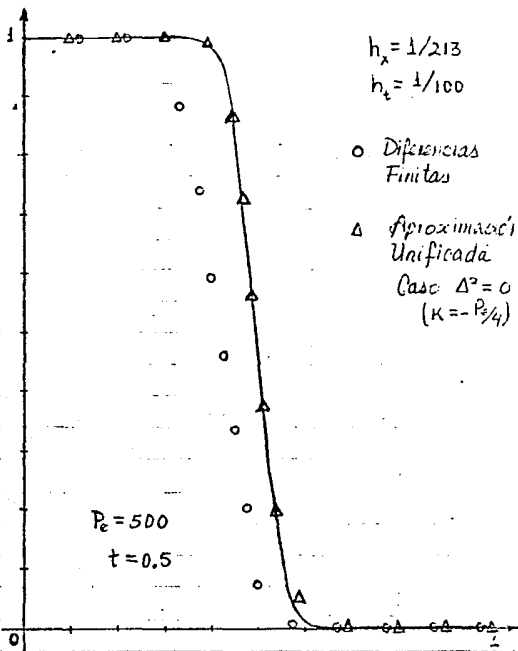


fig. 2.19.

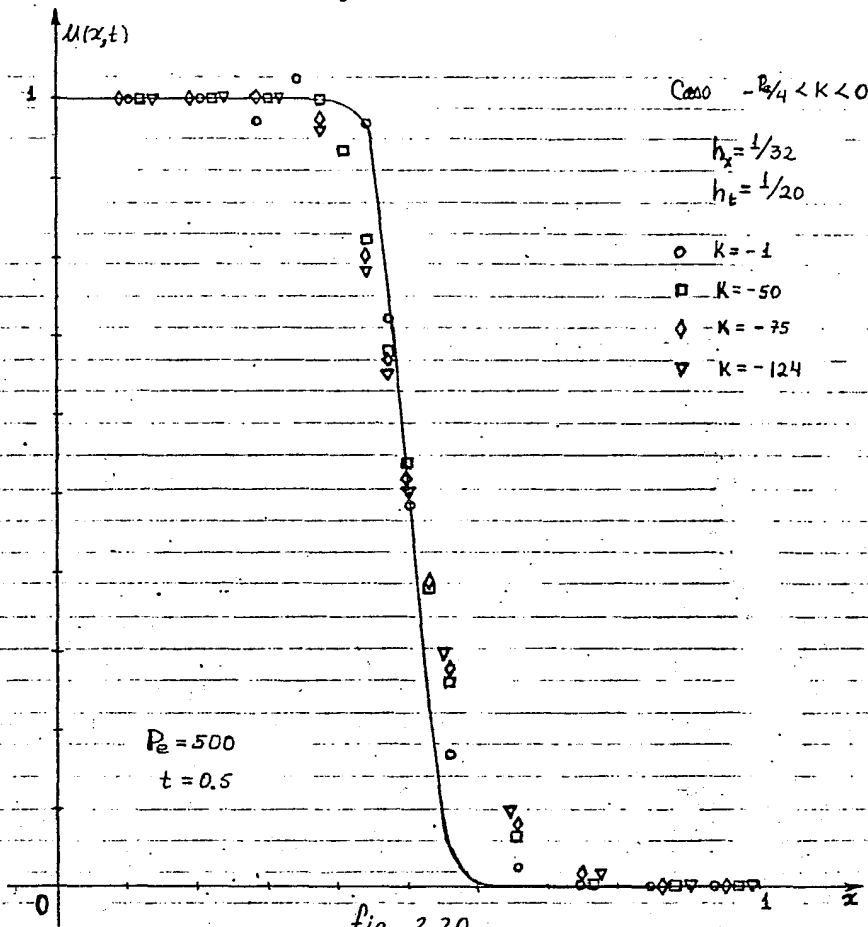
to respecto al frente real que no se corrige al cerrar más los pesos temporal y espacial.

• Caso $\Delta^2 > 0$, $(-Pe/4 < K < 0)$.

Este esquema al igual que el anterior, tiene condicionada su estabilidad, lo que significa que no se pueden cerrar independientemente las particiones espacial y temporal por que existe el riesgo de que el error se propague desmedidamente si se toman valores "no permitidos" para h_x respecto a h_t "o viceversa". No se entrará aquí en detalles de este comportamiento que es similar al del esquema anterior, aunque hay que decir que para el problema Dirichlet la precisión que se logra para números Pe pequeños (~ 10) es menor que la que se tiene en el caso $\Delta^2 = 0$ ($K = -Pe/4$); existe una

un orden de magnitud), y se puede volver inestable si el paso espacial se toma muy pequeño respecto al paso temporal (ver (2.2)), pero eligiendo el paso espacial adecuado para el paso temporal, se pueden obtener mejores resultados que con el método de las Diferencias Finitas.

Nota. Aunque este esquema proporciona magníficos resultados (fig. 2.3) para el problema Dirichlet y Pe pequeños (~ 10), los resultados no son satisfactorios para el problema Dirichlet-Neumann y Pe pequeños; estos presentan una despreción numérica y un adelanto



disipación numérica similar aunque menor que la que se presenta en el método de Diferencias Finitas.

Sin embargo, para el caso que más interesa en este trabajo, i.e. cuando domina la advección (P_e grandes) y las condiciones son Dirichlet-Neumann, el comportamiento de este segundo esquema es variado.

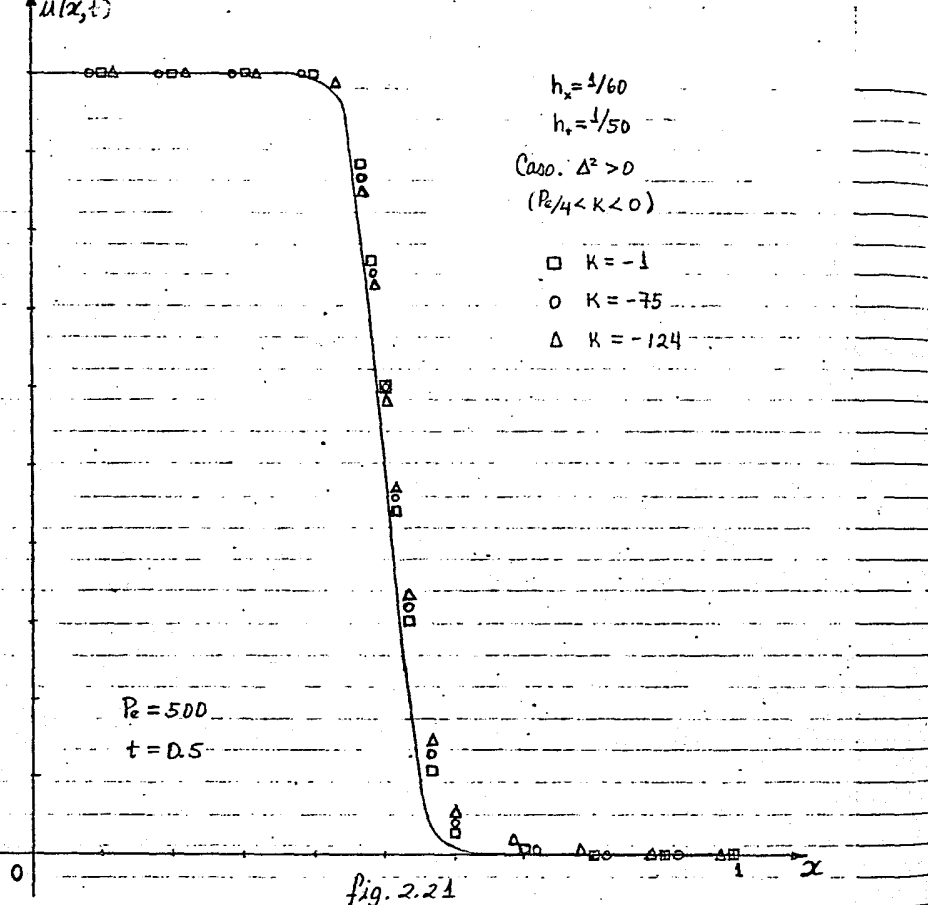


fig. 2.21

En primer lugar y a diferencia del esquema anterior, la constante K puede tomar cualquier valor dentro del intervalo $(-P_2/4; 0)$, y el valor que esta tome influye significativamente en el comportamiento de la solución numérica. Tomando una partición temporal no muy cerrada se encuentra que si la partición espacial es mayor que la temporal, la solución numérica presenta oscilaciones que aumentan al hacerse mayor esta diferencia y lo al tomar un valor de K próximo a cero $(-1 < K)$; en este caso

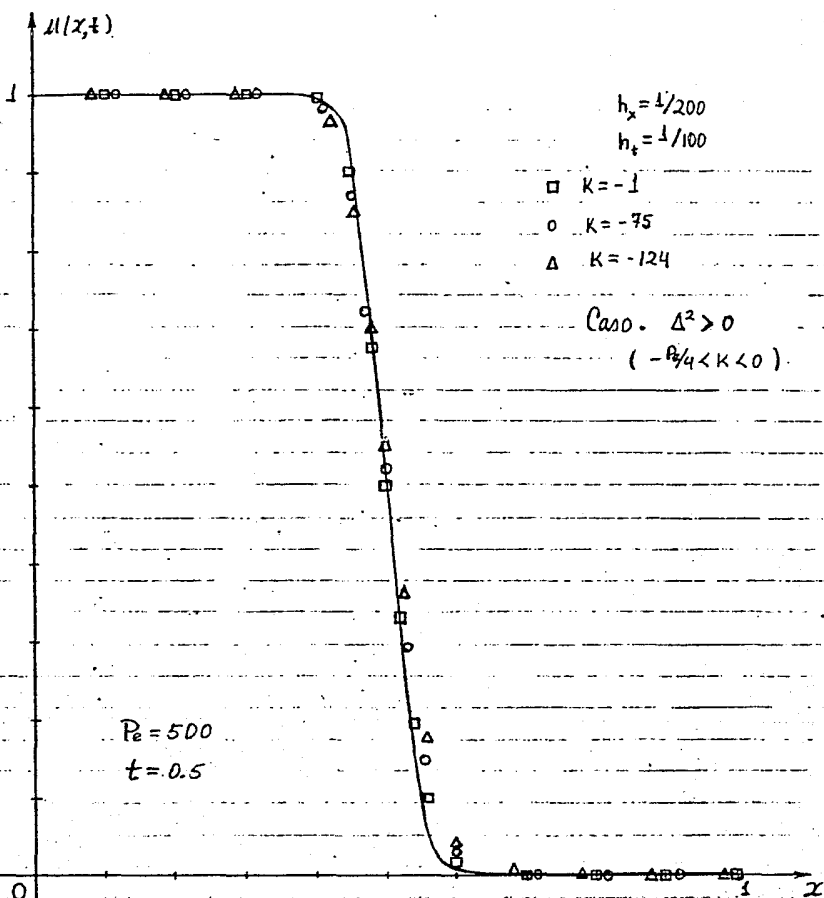
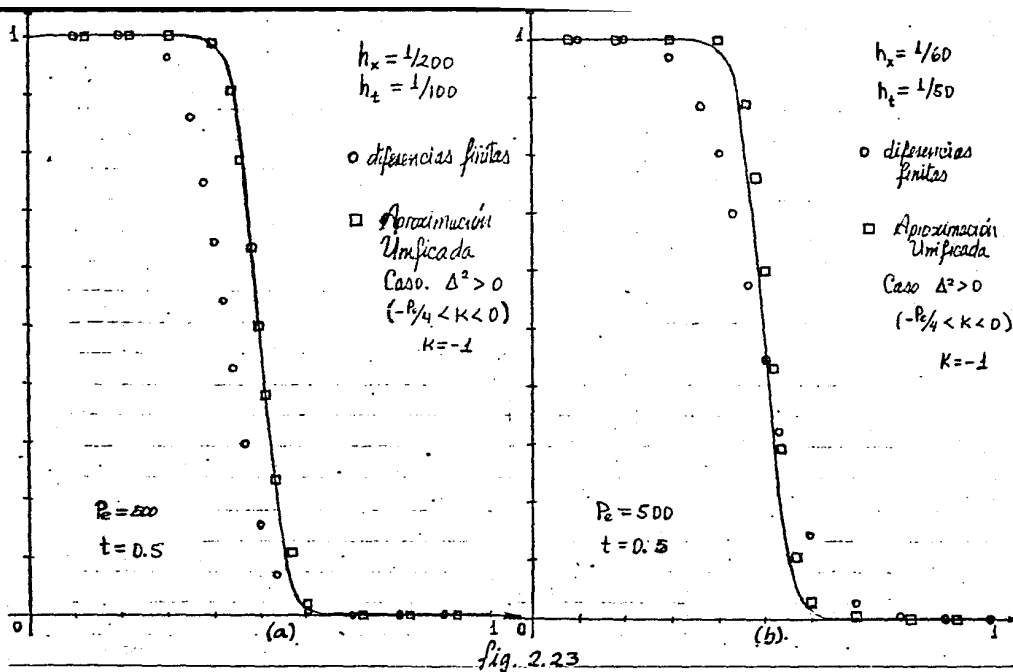


fig 2.22

las oscilaciones pueden llegar a ser tales que el esquema se puede considerar inestable o insoportable.

La práctica demuestra que las particiones espaciales adecuadas deben ser menores que la partición temporal elegida; una regla práctica es elegir h_x tal que la solución numérica no presente oscilaciones para un valor de K "intermedio" o "próximo" a $-1/4$, o bien eligiendo un valor h_x tal que el coeficiente f_i (ver (2.2) Cap III) sea

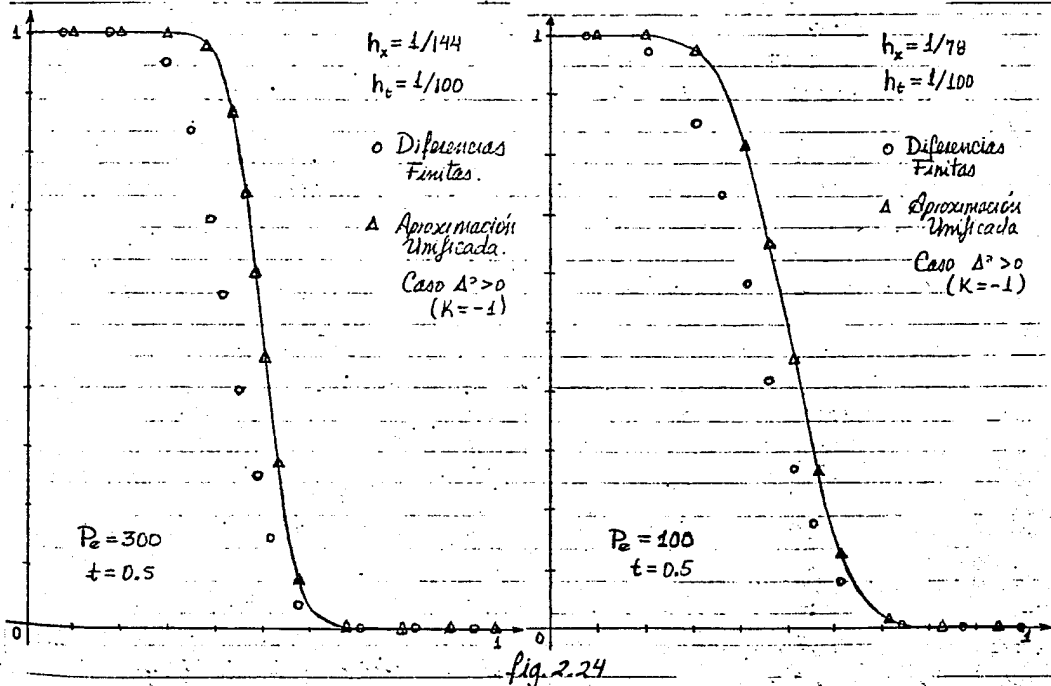


negativo pero próximo a cero. Una vez lograda una solución numérica "bien comportada", se varía el valor de K ; se puede ver (fig. 2.20) que para valores $K \leq 10$, la solución presenta oscilaciones, más fuertes mientras más pequeño es este valor (hasta hacerse inestable para valores cercanos a cero), pero el frente aproximado está relativamente cerca de la solución analítica. Al disminuir el valor de K , las oscilaciones se van amortiguando y el frente aproximado se va "alejando" del frente real (fig. 2.20) comportándose de modo similar a la solución por Diferencias Finitas; hay que notar que existe un valor de K para el cual las oscilaciones desaparecen y la solución numérica está relativamente cerca de la solución analítica.

Al tomar particiones más finas el comportamiento es similar pero se logra una mejor aproximación, los frentes aproximados resultan bastante "paralelos" al frente real aunque en este caso (fig. 2.21) un poco más adelantados, lo que se puede aminorar si se toma una

partición espacial un poco más fina. Al curar más las particiones temporal y espacial ($h_t = 1/100$, $h_x = 1/200$), se pueden lograr resultados de una precisión bastante aceptable para $K = -1$ (fig. 2.22); una regla sencilla para obtener de este esquema las mejores soluciones es: dados los valores de h_t y P_e se elige h_x y K tales que los coeficientes β_1 y β_2 (ver 12.2) Cap. III) sean negativos y próximos a cero, i.e. elegir la partición h_x que haga que β_1 y β_2 cambien de signo y sean ambos negativos (el cambio puede no ser simultáneo); procediendo así se pueden lograr soluciones numéricas mejores que las dadas por el método de las Diferencias Finitas (fig. 2.23). Lo mismo sucede para números P_e menores, (fig. 2.24).

Resumiendo: cuando domina la advección, este esquema



puede presentar oscilaciones ó inestabilidad si la constante K se toma próxima a cero y lo el peso temporal es mayor que el peso espacial, pero se pueden obtener buenos resultados si - dados P_0 y h_x -, se eligen valores para K y h_x tales que hagan al esquema "lo más explícito posible" (i.e. que β_1 y β_2 sean negativos y cercanos a cero).

• Tratamiento Incompleto

El esquema numérico que surge del principio variacional (I.56, Cap. III) al tomar las funciones de peso (I.58, Cap. III) - tanto para el problema Dirichlet como para el problema Dirichlet-Neumann -, tiene la ventaja sobre los dos esquemas anteriores de ser incondicionalmente estable, esto deja en libertad de elegir cualesquiera valores de h_x y h_t para un valor P_0 dado. Sin embargo, no todos los valores dan una solución numérica que sea una buena aproximación a la solución del problema.

Al igual que en los casos anteriores - dados los valores de P_0 y h_t -, existe una partición espacial h_x para la cual el error que da la solución numérica respecto a la solución analítica es mínimo (aunque no necesariamente "pequeño"). Después de un número considerable de corridas de prueba y comparaciones con la solución analítica, se concluye que la mejor solución numérica se obtiene cuando - dados P_0 y h_t -, se elige h_x tal que los coeficientes de la matriz de valores finales, β_1 y β_2 , sean negativos y tan próximas a cero como sea posible; en otras palabras, los mejores resultados se obtienen nuevamente cuando el esquema es prácticamente explícito.

Aplicando lo anterior al caso en el que domina la advección, se encuentra que desafortunadamente los resultados numéricos no están tan próximos a la solución analítica como los dados por los esquemas anteriores; estos nuevos resultados presentan dispersión ó disipación numérica - que disminuye al

$$\circ \begin{cases} h_t = 1/20 \\ h_x = 1/102 \end{cases}$$

$$\square \begin{cases} h_t = 1/50 \\ h_x = 1/127 \end{cases}$$

$$\triangle \begin{cases} h_t = 1/100 \\ h_x = 1/154 \end{cases}$$

comparar los pasos h_x y h_t (fig. 2.25), igual que las soluciones obtenidas por diferencias finitas (fig. 2.26); aquí se puede observar que las soluciones obtenidas del tratamiento incompleto (o "semi-discretización") son ligeramente mejores que las obtenidas por diferencias finitas con otras particiones espaciales, (fig. 2.26 b.).

$P_e = 500$

$t = 0.5$

fig. 2.25

Sucede lo mismo para números P_e menores.

En conclusión, este esquema

$$h_x = 1/154$$

$$h_t = 1/100$$

o diferencias finitas.

△ Aproximación Unificada.

$P_e = 500$

$t = 0.5$

fig. 2.26

o Diferencias Finitas

$$h_x = 1/80$$

$$h_t = 1/100$$

△ Aproximación Unificada.

$$h_x = 1/154$$

$$h_t = 1/100$$

$P_e = 500$

$t = 0.5$

(b)

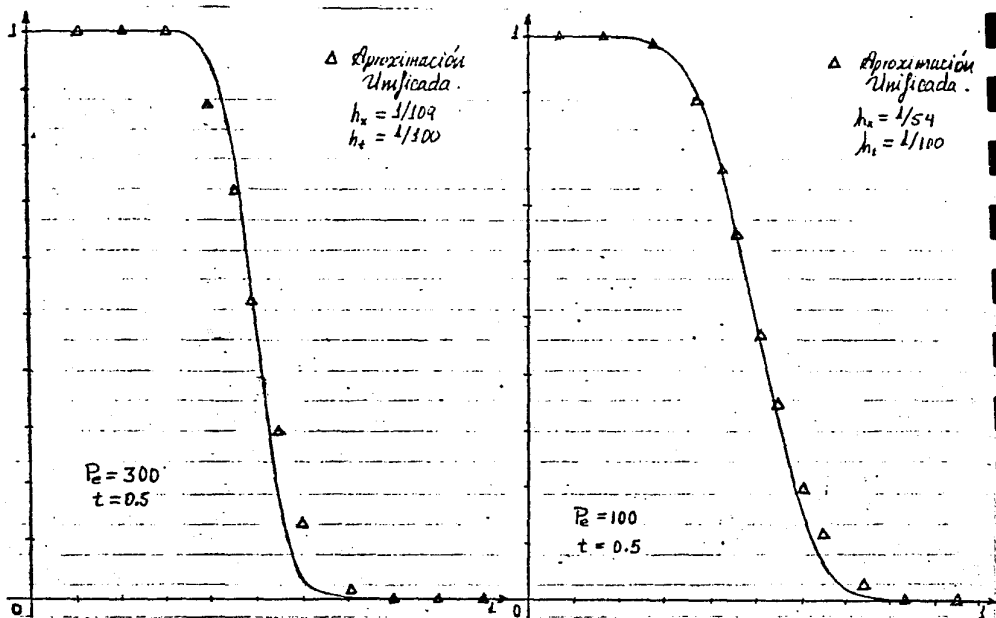
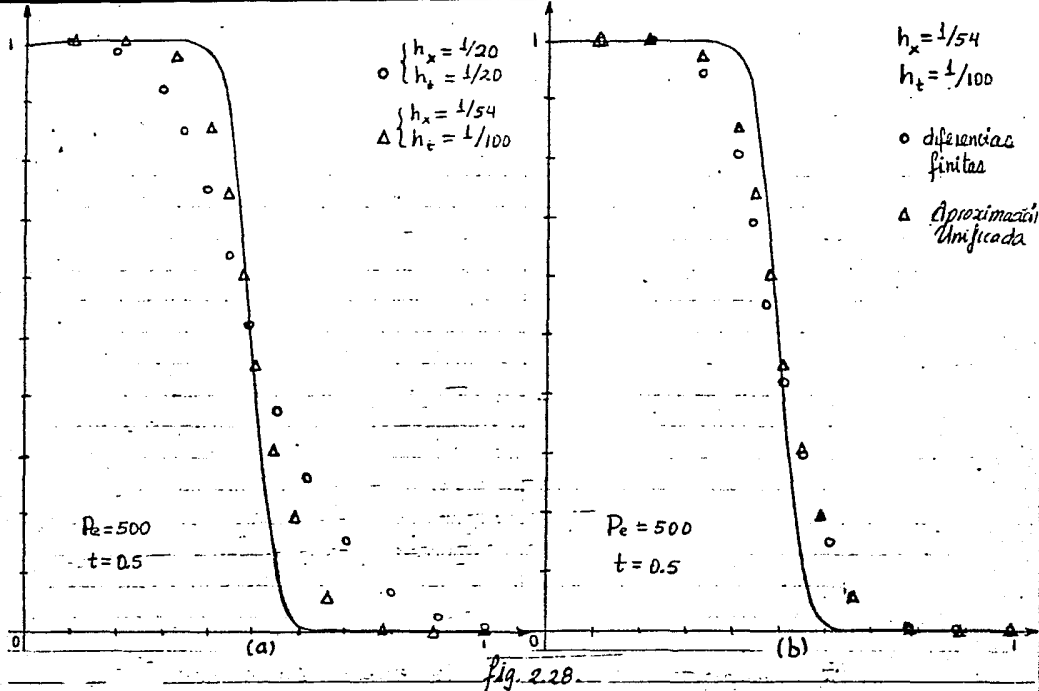


fig. 2.27.

Tiene prácticamente el mismo comportamiento que el clásico esquema obtenido por Diferencias Finitas; por tanto se puede decir que este esquema por los resultados que "ofrece" es equivalente al esquema de Diferencias Finitas en el caso en que P_e es grande, ya que con este se logran casi los mismos resultados con una red menos cerrada que la utilizada para el esquema aquí propuesto, aunque los resultados que da este último son ligeramente mejores. (fig. 2.27)

Finalmente se presentan los resultados preliminares que da el esquema numérico que surge del principio variacional (2.9, Cap III) con las funciones de peso (1.47, Cap III).

Al igual que el anterior, este es un esquema incondicionalmente estable y que - dados P_e y h_t - existe un valor h_x para el cual el error que se tiene es mínimo (aunque no necesariamente pequeño). También este esquema presenta una dispersión numé-



similar a la que se tiene en los esquemas de Diferencias Finitas, (fig. 2.28.a) pero los resultados numéricos son ligeramente mejores, (fig. 2.28.b). Queda por estudiar que "requeritos" se deben pedir para obtener los mejores resultados de este esquema, lo que se hará posteriormente.

Nota: El esquema (1.66, Cap III) que surge del principio variacional (1.57, Cap III) con las funciones de peso (1.58, Cap III), resultó ser incondicionalmente inestable. También lo es el mismo esquema para el problema Dirichlet-Neumann. Los esquemas numéricos que surgen del principio variacional (1.22, Cap III) al utilizar las funciones de peso (1.29, Cap III) y (1.33, Cap III) - tanto para el problema Dirichlet como para el Dirichlet-Neumann, presentaron un comportamiento completamente irregular en los resultados preliminares, el estudio y análisis del por qué de esto requerirá de tiempo y por lo tanto no es posible presentar resultados definitivos en este trabajo.

3. Conclusiones.

Se pueden resumir en 7 puntos las ventajas y desventajas de estos esquemas numéricos.

o Ventajas.

- i). Se ofrece una forma sistemática para obtener una fórmula de Green generalizada para cualquier tipo de ecuación diferencial lineal incluso con coeficientes variables y que da lugar a un principio variacional que contiene la información que se busca.
- ii). Se puede seleccionar al gusto la información que contiene el principio variacional; tomando las funciones de peso adecuadas se pueden obtener valores de la solución y/o sus derivadas sobre las interfronteras de la partición en la disposición u orden que se quiera, i.e., que en una parte se puede pedir la solución y en otra el valor de su derivada. En los métodos de Elemento Finito, Diferencias Finitas ó Colocación Ortogonal no se tiene esta capacidad de selección.
- iii). Al igual que en los métodos de Elemento Finito y de Diferencias Finitas, el sistema de ecuaciones que proporciona esta metodología - cuando solamente se busca el valor de la solución ó bien de su derivada sobre las interfronteras ó los nodos de la partición - es de una estructura muy simple, (tridiagonal), fácil de resolver, que ocupa muy poca memoria en la computadora y el tiempo de resolución aún para un número grande de sistemas de ecuaciones de dimensión alta, es mínimo. En caso de buscar simultáneamente valores de la solución y sus derivadas, la forma de las matrices es la misma que se obtiene al utilizar Colocación Ortogonal cuando se usan como funciones base a los polinomios cúbicos de Hermite; este tipo de sistemas es también de fácil solución.

iv). Los esquemas que surgen del tratamiento completo de la ecuación de aducción-difusión presentan una convergencia más rápida hacia la solución del problema que las obtenidas del tratamiento incompleto y que las obtenidas por diferencias finitas (y -seguramente aunque aquí no se hizo por falta de tiempo-, que las obtenidas por todo método en el que se haya aproximado a la derivada temporal a primer orden; o gr. por diferencias finitas; como por ejemplo en el método de elemento finito). Esto da como resultado que la solución numérica (en los casos $-P/4 < K < 0$ y $K = -P/4$) prácticamente coincida con la solución analítica durante todo el proceso, para redes (h_x, h_t) que pueden considerarse "no muy cercadas" si se cumple que el esquema numérico sea "prácticamente explícito".

Por otro lado, los resultados que dan los esquemas surgidos del tratamiento incompleto, se pueden considerar "ligeramente mejores" que los resultados obtenidos por diferencias finitas, (queda la interrogante de si también son mejores que los resultados obtenidos por los métodos de elemento finito ó colocación ortogonal).

Por tanto, en conjunto, los resultados que dan los esquemas numéricos propuestos en este trabajo se pueden considerar mejores -y en el peor de los casos iguales-, a los obtenidos con los métodos tradicionales, como el de diferencias finitas.

© Desventajas.

v). Los coeficientes del sistema de ecuaciones son más complejos y es un poco más difícil obtenerlos que en los métodos "tradicionales".

vi). Los esquemas que dan los mejores resultados tienen la desventaja relativa de tener estabilidad condicional y que para ciertos valores en los que se supone que los esquemas son estables (i.e. que el proceso converge al estado final del problema), se pueden tener fuertes oscilaciones en la solución numérica cuando la aducción domina a la

difusión. Pero siguiendo las indicaciones dadas en cada caso (i.e. elegir valores que hagan casi completamente explícitos a los esquemas) se evitan completamente estos problemas.

viii). Se tiene una restricción muy grande al construir las funciones de peso con soluciones de la adjunta homogénea, lo que en general no es posible hacer.

Los siguientes pasos en esta investigación estarán encaminados a:

- a). Terminar el análisis de todos los esquemas aquí presentados.
- b). En ambos tratamientos relajar la condición de construir las funciones de peso con soluciones de la adjunta homogénea (i.e. eliminar el término $\langle Q^*u, v \rangle$ de alguna otra forma), cuidando que se preserve la rápida convergencia de los esquemas obtenidos del tratamiento completo y la estabilidad incondicional de los esquemas del tratamiento incompleto. Se buscará también una forma más eficiente de aproximar a la derivada temporal en el tratamiento incompleto y aumentar así la rapidez de convergencia.
- c). Generalizar a dos y tres dimensiones espaciales y al caso de coeficientes variables.

Aunque el método de eliminación gaussiana se utiliza para resolver en forma exacta los sistemas lineales y es un buen método de resolución, al ser aplicado a sistemas "grandes" se vuelve completamente impráctico, ya que conduce a una cantidad enorme de operaciones y el riesgo de equivocarse en una ó mas es grande. Sin embargo, cuando el sistema de ecuaciones tiene la forma tridimensional:

$$\begin{aligned} b_1 u_1 + c_1 u_2 &= d_1 \\ a_2 u_1 + b_2 u_2 + c_2 u_3 &= d_2 \\ a_3 u_2 + b_3 u_3 + c_3 u_4 &= d_3 \\ \dots & \dots \\ a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} &= d_i \quad (A.1) \\ \dots & \dots \\ a_{n-1} u_{n-2} + b_{n-1} u_{n-1} + c_{n-1} u_n &= d_{n-1} \\ a_n u_{n-1} + b_n u_n &= d_n \end{aligned}$$

que es el tipo de sistema que surge en este trabajo, es sencillo aplicar el método. De la primera ecuación del sistema (A.1) se puede despejar u_1 , esto es:

$$u_1 = d_1/b_1 - (c_1/b_1)u_2 = \beta_1 - (c_1/\beta_1)u_2$$

y substituyendo esta expresión en la segunda ecuación del sistema (A.1) se encuentra que:

$$a_2 (\beta_1 - (c_1/\beta_1)u_2) + b_2 u_2 + c_2 u_3 = d_2$$

de donde

$$u_2 = (d_2 - a_2 \beta_1) / (b_2 - (a_2 c_1 / \beta_1)) - [c_2 / (b_2 - a_2 c_1 / \beta_1)] u_3$$

haciendo entonces:

$$u_2 = \beta_2 - (c_2/\beta_2)u_3$$

Substituyendo esta expresión en la tercera ecuación del sistema (A.1), se despeja u_3 y se deja en función de u_4 y $(c_3/\beta_2)u_4$, luego se substituye en la cuarta ecuación del sistema y lo que salga en la quinta

ta ecuación y así sucesivamente. No es difícil comprobar que para la i -ésima ecuación

$$u_i = \delta_i - (c_i/\beta_i) u_{i+1}$$

donde $\beta_i = b_i - a_i c_{i-1}/\beta_{i-1}$ y $\delta_i = (d_i - a_i \delta_{i-1})/\beta_{i-1}$

Finalmente, al substituir la expresión que da a u_{i-1} en la última ecuación del sistema se llega a que:

$$u_N = \delta_N$$

con $\delta_N = (d_N - a_N \delta_{N-1})/\beta_N$ y $\beta_N = b_N - a_N c_{N-1}/\beta_{N-1}$.

Como puede verse, esta última componente del vector \vec{u} ya está determinada; para encontrar el valor de los componentes restantes, se va substituyendo "hacia atrás", empezando por $u_{N-1} = \delta_{N-1} - (c_{N-1}/\beta_{N-1}) u_N$ y finalizando con $u_1 = \delta_1 - (c_1/\beta_1) u_2$.

Existe sin embargo un criterio que deben cumplir los coeficientes del sistema (A.1) para que el método resulte estable cuando la dimensión del sistema es grande, y este es el de "dominancia diagonal":

$$(A.2) \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i| \quad i = 1, 2, \dots, N$$

La demostración de que los errores de redondeo quedan acotados si se cumple (A.2) es sencilla. Substituyendo "hacia atrás" como se recomendó anteriormente para determinar los valores de u_i , se encuentra que:

$$u_N = \delta_N$$

$$u_{N-1} = \delta_{N-1} - \frac{c_{N-1}}{\beta_{N-1}} u_N = \delta_{N-1} - \frac{c_{N-1}}{\beta_{N-1}} \delta_N$$

$$u_{N-2} = \delta_{N-2} - \frac{c_{N-2}}{\beta_{N-2}} (\delta_{N-1} - \frac{c_{N-1}}{\beta_{N-1}} \delta_N) = \delta_{N-2} - \frac{c_{N-2}}{\beta_{N-2}} \delta_{N-1} + \frac{c_{N-1} c_{N-2}}{\beta_{N-1} \beta_{N-2}} \delta_N$$

procediendo de este modo no es difícil comprobar que:

$$u_i = y_i - \frac{c_i}{\beta_i} y_{i+1} + \frac{c_{i+1} c_i}{\beta_{i+1} \beta_i} y_{i+2} + \dots + (-1)^i \frac{c_{i+1} c_{i+2} \dots c_i}{\beta_{i+1} \beta_{i+2} \dots \beta_i} y_N$$

ó en forma compacta:

$$u_i = \sum_{j=0}^{N-i} \left\{ (-1)^j y_{i+j} \prod_{k=0}^j \frac{c_{i+k}}{\beta_{i+k}} \right\}, \quad \text{con } \frac{c_N}{\beta_N} = 1.$$

Los valores y_{i+j} se suponen finitos por que son productos de los coeficientes del sistema, y es claro que para N grandes el producto $\prod \frac{c_{i+k}}{\beta_{i+k}}$ puede caer mucho si se tiene que

$$\left| \frac{c_{i+k}}{\beta_{i+k}} \right| > 1, \quad \forall k \geq 1.$$

Por lo tanto, es suficiente suponer que

$$\left| \frac{c_{i+k}}{\beta_{i+k}} \right| \leq 1 \quad \forall k \geq 1.$$

para que el producto de estos términos permanezca acotado cuando N es grande. Se procederá a demostrar por inducción que si

$$|b_i| \geq |a_i| + |c_i| \Rightarrow \left| \frac{c_i}{\beta_i} \right| < 1, \quad \forall i=1, 2, \dots, N.$$

Se tiene que $|b_i| \geq |a_i| + |c_i| \Rightarrow |b_i| \geq |c_i|$, entonces es inmediato que:

$$\left| \frac{c_i}{\beta_i} \right| = \left| \frac{c_i}{b_i} \right| \leq 1$$

Supóngase que $\left| \frac{c_{i+1}}{\beta_{i+1}} \right| \leq 1$ y que $|b_{i+1}| \geq |a_{i+1}| + |c_{i+1}|$, entonces

$$\left| \frac{c_i}{\beta_i} \right| = \left| \frac{c_i}{b_i - a_i \frac{c_{i+1}}{\beta_{i+1}}} \right|$$

recordando que $||a| - b| \leq |a - b|$ se tendrá que

$$\left| \frac{c_i}{\beta_i} \right| = \left| \frac{c_i}{b_i - a_i \frac{c_{i+1}}{\beta_{i+1}}} \right| \leq \left| \frac{c_i}{|b_i| - |a_i| \left| \frac{c_{i+1}}{\beta_{i+1}} \right|} \right|$$

Por hipótesis $|b_{i+1}| \geq |a_{i+1}| + |c_{i+1}| \Rightarrow |b_{i+1}| \geq |a_{i+1}|$, y si $\left| \frac{c_{i+1}}{\beta_{i+1}} \right| \leq 1$ se tendrá que:

$$|b_n| \geq |a_n| \geq |a_n| \cdot |c_{n-1}/\beta_{n-1}|$$

de donde puede deducirse fácilmente que:

$$0 \leq |b_n| - |a_n| \leq |b_n| - |a_n| \cdot |c_{n-1}/\beta_{n-1}|$$

entonces:

$$|c_n/\beta_n| \leq |c_n| / (|b_n| - |a_n| \cdot |c_{n-1}/\beta_{n-1}|) \leq |c_n| / (|b_n| - |a_n|) = |c_n| / (|b_n| - |a_n|)$$

y no es difícil comprobar que $|b_n| \geq |a_n| + |c_n| \Rightarrow |c_n| / (|b_n| - |a_n|) \leq 1$

$$\therefore |c_n/\beta_n| \leq 1$$

con lo que queda demostrado que la dominancia diagonal en (A.1) garantiza la estabilidad del método, pero hay que hacer notar que esta es una condición suficiente pero no necesaria; esto se puede ver si se trata de demostrar que:

Suponiendo: $|c_{n-1}/\beta_{n-1}| \leq 1$ y $|c_n/\beta_n| \leq 1$ entonces $|b_n| \geq |c_n| + |a_n|$.

Se tiene un sistema de ecuaciones de la forma

$$A\vec{u}^{(n)} = B\vec{u}^{(n-1)} + \vec{u}_0 \quad (B.1)$$

donde A y B son matrices cuadradas de dimensión arbitraria y el índice n indica un proceso iterativo, ($n \rightarrow \infty$). La pregunta es: ¿Qué condiciones deben cumplir las matrices A y B para que el proceso sea estable? Suponiendo que la matriz A es no singular y que posee las características que hacen que el método de inversión utilizado sea estable, entonces explícitamente el proceso (B.1) es:

$$A\vec{u}^{(1)} = B\vec{u}^{(0)} + \vec{u}_0$$

$$A\vec{u}^{(2)} = B\vec{u}^{(1)} + \vec{u}_0$$

$$A\vec{u}^{(3)} = B\vec{u}^{(2)} + \vec{u}_0$$

⋮

donde $\vec{u}^{(0)}$ es el vector asociado a las condiciones iniciales del problema y \vec{u}_0 un vector asociado a las condiciones de frontera, que en este caso se toma constante. Invirtiendo el primer sistema se encuentra que:

$$\vec{u}^{(1)} = A^{-1}B\vec{u}^{(0)} + A^{-1}\vec{u}_0$$

substituyendo este valor en el siguiente paso se tendrá que

$$A\vec{u}^{(2)} = B(A^{-1}B\vec{u}^{(0)} + A^{-1}\vec{u}_0) + \vec{u}_0 = B(A^{-1}B)\vec{u}^{(0)} + BA^{-1}\vec{u}_0 + \vec{u}_0$$

e invirtiendo la matriz A se obtiene:

$$\vec{u}^{(2)} = (A^{-1}B)(A^{-1}B)\vec{u}^{(0)} + (A^{-1}B)A^{-1}\vec{u}_0 + A^{-1}\vec{u}_0$$

Denotando $A^{-1}B = M$ y $A^{-1}\vec{u}_0 = \vec{c}$, entonces:

$$\vec{u}^{(2)} = M \cdot M \vec{u}^{(0)} + M\vec{c} + \vec{c} = M^2 \vec{u}^{(0)} + (M+1)\vec{c}$$

Repetiendo este proceso, se tendrá que en la n -ésima iteración:

$$\vec{u}^{(n)} = M^n \vec{u}^{(n-1)} + (M^{n-1} + M^{n-2} + \dots + M + I) \vec{c}$$

Tomando el proceso al límite, cuando $n \rightarrow \infty$, es evidente que para tener valores finitos de M^n y de $\sum M^{n-1}$, se debe cumplir que $\|M\| < 1$, donde $\|\cdot\|$ denota la norma de la matriz. Con esto

$$\lim_{n \rightarrow \infty} M^n = 0 \quad \text{y} \quad \sum_{n=1}^{\infty} M^{n-1} = (I - M)^{-1}$$

Por lo tanto, el proceso tendrá como estado final:

$$\begin{aligned} \vec{u}^{(\infty)} &= (I - M)^{-1} \vec{c} \\ &= (I - M)^{-1} A^{-1} \vec{u}_0 \\ &= (A(I - M))^{-1} \vec{u}_0 \\ &= (A(I - A^{-1}B))^{-1} \vec{u}_0 \\ &= (A - B)^{-1} \vec{u}_0 \end{aligned} \quad (B.2)$$

y la condición para que el proceso sea estable es:

$$\|A^{-1}B\| < 1 \quad (B.3)$$

Esto condiciona los valores que pueden tomar los coeficientes del sistema (B.1) y por lo tanto los valores de los parámetros P_e, h_x, h_y y k .

Sin embargo, evaluar exactamente la restricción (B.3) para n arbitraria es realmente imposible, sobre todo viendo la forma que pueden tomar los coeficientes del sistema (B.1) (ver Cap. III), por lo que tiene que recurrirse a un análisis intuitivo sobre que valores deben elegirse para que se cumpla (B.3).

Las restricciones se centrarán en la constante k , que es el único parámetro libre que se tiene; P_e es dato del problema original y h_x y h_y es preferible elegirlas, de ser posible como mejor convergen al problema. Buscando que se cumpla (B.3), se pide que todos los elementos de $A^{-1}B$ sean menores que la unidad, petición que realmente no asegura que $\|A^{-1}B\| < 1$ pero que es simple para el razonamiento; esto obligaría

a que la mayor parte de los elementos de la matriz A sean mayores, en valor absoluto, que los elementos de la matriz B .

Esto puede lograrse a través de las funciones de peso, pidiendo que estas tengan un valor más grande en el extremo final del peso temporal que al principio de este, lo que no puede tener cuando estas funciones son crecientes en el tiempo, es decir, cuando $K < 0$. Este análisis aunque demasiado intuitivo y sobresimplificado, se comprueba después numéricamente, aunque no se debe descartar la existencia de ciertos valores P_c , h_x , h_c que con todo y tener $K < 0$, harán al esquema inestable. No obstante, elegir $K < 0$ es un primer paso hacia la estabilidad del esquema.

Una última observación, la igualdad (B.2) indica que una forma de comprobar que las matrices A y B son las correctamente asociadas a un proceso que evoluciona en el tiempo, es aplicar la inversa de la diferencia $A-B$ al vector de condiciones de frontera y el resultado debe ser el estado final del proceso. En caso contrario deberá pensarse en un error en el cálculo de estas matrices.

Nota. Debido a la complejidad de los coeficientes, no es posible aplicar el criterio de Von Neumann para determinar los valores P_c , h_x , h_c para los cuales el esquema numérico es estable.

Apéndice C

Funciones de peso alternativas

Aquí se obtienen valores fijos para la constante K de (1.26, Cap III). Se procede a imponer a la solución (1.23, Cap III) condiciones homogéneas en los extremos del intervalo $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. Para facilitar el tratamiento se procede a hacer una traslación: $x \Rightarrow x - x_{i-1}$, con esto y suponiendo $K < -\rho/4$ tal que $\Delta^2 < 0$, la solución (1.26, Cap III) queda:

$$v(x, t) = e^{-\frac{\rho}{2}(x-x_{i-1})} (A_1 \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2}(x-x_{i-1}) + A_2 \cos \frac{\Delta}{2}(x-x_{i-1})) e^{-kt+to}$$

Imponiendo las condiciones homogéneas:

$$v(x_{i-1}, t) = 0 \Rightarrow A_2 e^{-kt+to} = 0 \Rightarrow A_2 = 0$$

$$v(x_{i+1}, t) = 0 \Rightarrow A_1 \operatorname{sen} \Delta h_x e^{-kt+to} = 0 \Leftrightarrow \operatorname{sen} \Delta h_x = 0 \Leftrightarrow \Delta h_x = m\pi$$

de donde: $k = -\rho/4 \left(\frac{m^2 \pi^2}{(\rho h_x)^2} + 1 \right)$, $m \in \mathbb{Z}$ (C.1)

Así: $v(x, t) = e^{-\frac{\rho}{2}(x-x_{i-1})} A \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2h_x}(x-x_{i-1}) e^{-kt}$, $m \geq 1$.

Es fácil ver que de la expresión anterior se pueden obtener una infinidad de familias de funciones de peso. A priori no es posible saber que grupo de funciones de peso ayudará a obtener un esquema estable y buenos resultados. Para obtener el valor de β , se pide que la exponencial temporal sea 1 en $t = t_n$, con esto, las funciones de peso serán:

$$\varphi_{i,m}^n(x, t) = \begin{cases} e^{-\frac{\rho}{2}(x-x_{i-1})} \frac{m\pi}{2h_x} \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2h_x}(x-x_{i-1}) e^{-\frac{\rho}{4} \left(\frac{m^2 \pi^2}{(\rho h_x)^2} + 1 \right) (t-t_n)} & , x \in [x_{i-1}; x_{i+1}] \\ 0 & , x \notin [x_{i-1}; x_{i+1}] \end{cases}$$

con:

$$\left[\frac{d\varphi_{i,m}^n}{dx} \right]_{x_j} = \begin{cases} \frac{m\pi}{2h_x} e^{-\frac{\rho}{4} \left(\frac{m^2 \pi^2}{(\rho h_x)^2} + 1 \right) (t-t_n)} & , j=i-1 \\ (-1) \frac{m\pi}{2h_x} e^{-\frac{\rho}{4} \left(\frac{m^2 \pi^2}{(\rho h_x)^2} + 1 \right) (t-t_n)} & , j=i+1 \\ 0 & , j=i \text{ y } |i-j| \geq 2 \end{cases}$$

En este caso, los coeficientes del sistema (1.25, Cap III) serán:

$$\beta_1 = \alpha \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} \cos \frac{m\pi}{2}) \right\} + \frac{m\pi}{2} P_2 h_x (1 - e^{kh_x})$$

$$\beta_2 = -\alpha \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} + \frac{m\pi}{2} P_2 h_x (\cos \frac{m\pi}{2} - e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} + (-1)^m (1 - e^{-\frac{P_2 h_x}{2}})) \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}}$$

$$\beta_3 = \left\{ \alpha \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (-1)^m e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} \cos \frac{m\pi}{2} \right\} + (-1)^m m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{kh_x}) \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}}$$

$$\beta_4 = \alpha e^{kh_x} \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} \cos \frac{m\pi}{2}) \right\} + m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{kh_x})$$

$$\beta_5 = -\alpha e^{kh_x} \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} + \frac{m\pi}{2} P_2 h_x (\cos \frac{m\pi}{2} - e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} + (-1)^m (1 - e^{-\frac{P_2 h_x}{2}})) \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}}$$

$$\beta_6 = \left\{ \alpha e^{kh_x} \left\{ \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (-1)^m e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} \cos \frac{m\pi}{2} \right\} + (-1)^m m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - e^{kh_x}) \right\} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}}$$

$$g_0 = -\alpha \left(m\pi \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) + \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} - m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (1 - \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} \cos \frac{m\pi}{2}) \right) (1 - e^{kh_x})$$

$$g_1 = \alpha \bar{e}^{-\frac{P_2 h_x}{2}} (-1)^m m\pi \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) - \left(\left(\frac{P_2 h_x}{2} \right)^2 - \left(\frac{m\pi}{2} \right)^2 \right) \operatorname{sen} \frac{m\pi}{2} e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} + m\pi \frac{P_2 h_x}{2} (-1)^m e^{-\frac{P_2 h_x}{2}} \cos \frac{m\pi}{2} \right) (1 - e^{kh_x})$$

$$\text{con } K = -\frac{P_2}{4} \left(\frac{m^2 \pi^2}{P_2^2 h_x^2} + 1 \right), \quad m \geq 1.$$

o Caso $k > 0$.

$$\psi_j^n(x, t) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{k}{2}(x-x_j)}}{\sinh \frac{\Delta}{2} h_x} \sinh \frac{\Delta}{2} (x-x_{j-1}) e^{-k(t-t_{n-1})} & , (x, t) \in \bar{\Omega}_j^n \\ \frac{e^{-\frac{k}{2}(x-x_j)}}{\sinh \frac{\Delta}{2} h_x} \sinh \frac{\Delta}{2} (x_{j+1}-x) e^{-k(t-t_{n-1})} & , (x, t) \in \bar{\Omega}_j^n \\ 0 & , (x, t) \notin \bar{\Omega}_j^n \cup \bar{\Omega}_{j+1}^n \end{cases}$$

com:

$$\left[\frac{d\psi_j^n}{dx} \right]_{x_i} = \begin{cases} \Delta/2 e^{-\frac{k}{2}x} e^{-k(t-t_{n-1})} / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j-1 \\ -\Delta \coth \frac{\Delta}{2} h_x e^{-k(t-t_{n-1})} / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j \\ \Delta/2 e^{-\frac{k}{2}x} e^{-k(t-t_{n-1})} / \sinh \frac{\Delta}{2} h_x & , i=j+1 \\ 0 & , |i-j| \geq 2 \end{cases}$$

o Caso $k=0$.

$$\psi_j^n(x, t) = \begin{cases} (1 - e^{-P_0(x-x_{j-1})}) / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , (x, t) \in \bar{\Omega}_j^n \\ (e^{-P_0(x-x_j)} - e^{-P_0 h_x}) / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , (x, t) \in \bar{\Omega}_{j+1}^n \\ 0 & , (x, t) \notin \bar{\Omega}_j^n \cup \bar{\Omega}_{j+1}^n \end{cases}$$

$$\left[\frac{d\psi_j^n}{dx} \right]_{x_i} = \begin{cases} P_0 / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , i=j-1 \\ -P_0 (1 + e^{-P_0 h_x}) / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , i=j \\ P_0 e^{-P_0 h_x} / (1 - e^{-P_0 h_x}) & , i=j+1 \\ 0 & , |i-j| \geq 2 \end{cases}$$

• Funciones de peso complementarias para el problema Dirichlet-Neumann.

• Caso $\Delta^2 > 0$ ($-P_0/4 < K < 0$).

$$\varphi_{\pm}^n(x, t) = \begin{cases} 0 & , (x, t) \notin \bar{\Omega}_{\pm}^n \\ \frac{e^{-\frac{P_0}{2}(x-x_i)}}{\sinh \frac{\Delta}{2} h x} \sinh \frac{\Delta}{2} (x-x_i) e^{-K(t-t_n)} & , (x, t) \in \bar{\Omega}_{\pm}^n \end{cases}$$

• Caso $\Delta^2 = 0$ ($K = -P_0/4$).

$$\varphi_{\pm}^n(x, t) = \begin{cases} 0 & , (x, t) \notin \bar{\Omega}_{\pm}^n \\ \frac{1}{h x} (x-x_i) e^{-\frac{P_0}{2}(x-x_i)} e^{\frac{P_0}{2}(t-t_n)} & , (x, t) \in \bar{\Omega}_{\pm}^n \end{cases}$$

• Caso $\Delta^2 < 0$ ($K < -P_0/4$).

$$\varphi_{\pm}^n(x, t) = \begin{cases} 0 & , (x, t) \notin \bar{\Omega}_{\pm}^n \\ \frac{e^{-\frac{P_0}{2}(x-x_i)}}{\sin \frac{\Delta}{2} h x} \sin \frac{\Delta}{2} (x-x_i) e^{-K(t-t_n)} & , (x, t) \in \bar{\Omega}_{\pm}^n \end{cases}$$

• Caso $\Delta^2 > 0$ ($K = 0$).

$$\varphi_{\pm}^n(x, t) = \begin{cases} 0 & , (x, t) \notin \bar{\Omega}_{\pm}^n \\ (1 - e^{-\frac{P_0}{2}(x-x_i)}) / (1 - e^{-\frac{P_0}{2} h x}) & , (x, t) \in \bar{\Omega}_{\pm}^n \end{cases}$$

• Coeficientes del sistema de ecuaciones (1.25, Cap III) para las funciones de peso estacionarias ($K=0$) para el problema Dirichlet-Neumann.

$$\beta_1 = \alpha (P_0^2 h_x^2 / 2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x}) - P_0^2 h_x^2 / 2$$

$$\beta_2 = \alpha (1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4)(1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0 h_x (1 + e^{-P_0 h_x})) + (1 + e^{-P_0 h_x}) P_0^2 h_x^2 / 2$$

$$\beta_3 = \alpha (1 - e^{-P_0 h_x} (1/2 P_0^2 h_x^2 + P_0 h_x + 1)) - P_0^2 h_x^2 / 2 e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_4 = \alpha (P_0^2 h_x^2 / 2 + e^{-P_0 h_x} (P_0 h_x + 1) - 1) + P_0^2 h_x^2 / 2$$

$$\beta_1 = \alpha (P_0^2 h_x^2 / 2 - P_0 h_x + 1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0^2 h_x^2 / 2$$

$$\beta_2 = \alpha (1/2 (P_0^2 h_x^2 - 4)(1 - e^{-P_0 h_x}) + P_0 h_x (1 + e^{-P_0 h_x})) - (1 + e^{-P_0 h_x}) P_0^2 h_x^2 / 2$$

$$\beta_3 = \alpha (1 - e^{-P_0 h_x} (1/2 P_0^2 h_x^2 + P_0 h_x + 1)) + P_0^2 h_x^2 / 2 e^{-P_0 h_x}$$

$$\beta_4 = \alpha (P_0^2 h_x^2 / 2 + e^{-P_0 h_x} (P_0 h_x + 1) - 1) - P_0^2 h_x^2 / 2$$

$$g_0 = P_0^2 h_x^2, \quad \text{con } \alpha = h_x / h_x$$

Nota: $g_x = P_0^2 h_x^2 e^{-P_0 h_x}$, para el problema Dirichlet.

Apéndice E.

Soluciones Exactas.

Se tiene la ecuación: $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{P_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ (E.1)
con las condiciones:

$$u(x, 0) = -1$$

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

$$u(1, t) = 0$$

Se propone una solución del tipo: $\Phi(x, t) = U(x) e^{-kt}$, $k > 0$. (E.2)
y substituyendo en (E.1):

$$-kU(x) + U_x(x) - \frac{1}{P_2} U_{xx}(x) = 0$$

La solución de este problema de "valores propios" es:

$$U(x) = e^{\frac{P_2}{2}x} (A e^{\frac{\Delta}{2}x} + B e^{-\frac{\Delta}{2}x}), \quad \Delta = \sqrt{P_2^2 - 4kP_2} \quad (E.3)$$

Se imponen ahora las condiciones de frontera y dado que son homogéneas, es conveniente tomar a la solución como:

$$U(x) = e^{\frac{P_2}{2}x} (A \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2}x + B \operatorname{cos} \frac{\Delta}{2}x) \quad (E.4)$$

entonces

$$U(0) = B = 0$$

$$U(1) = e^{\frac{P_2}{2}} (A \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2}) = 0$$

$$\Leftrightarrow \operatorname{sen} \frac{\Delta}{2} = 0 \Leftrightarrow \frac{\Delta}{2} = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\therefore k = (P_2^2 + 4n^2\pi^2) / 4P_2 \quad (E.5)$$

Con esto: $U_n(x) = A_n \operatorname{sen} n\pi x e^{\frac{P_2}{2}x}$

y

$$\Phi_n(x, t) = A_n e^{\frac{P_2}{2}x} \operatorname{sen} n\pi x e^{-\frac{P_2^2 + 4n^2\pi^2}{4P_2}t}$$

Por lo tanto la solución general será:

$$\Phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{\frac{P_2}{2}x} \operatorname{sen} n\pi x e^{-\frac{P_2^2 + 4n^2\pi^2}{4P_2}t} \quad (E.6)$$

Se impone ahora la condición inicial:

$$-1 = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{\frac{k_n}{2}x} \sin n\pi x$$

Para invertir lo anterior se puede usar el concepto de funciones biortogonales. Se tiene la fórmula de Green:

$$\int_{\Omega} \{v Lu - u L^* v\} dx = \int_{t=0}^{t=T} \{v \frac{\partial u}{\partial t} - u \frac{\partial v}{\partial t}\} dx \quad (E.7)$$

y en este caso: $L = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $\Omega = (0,1) \times (0,T)$.

Se propone que: $\Phi(x,t) = e^{-kt} U(x)$, $k > 0$. (E.8)

$\tilde{\Phi}(x,t) = e^{kt} \tilde{U}(x)$, $k > 0$. (E.9)

Hay que notar que $L\Phi = 0$ si $U(x)$ es tal que

$$U_{xx} - P_0 U_x + k P_0 U = 0 \quad (E.10)$$

y que $L^* \tilde{\Phi} = 0$ si $\tilde{U}(x)$ es tal que:

$$\tilde{U}_{xx} + P_0 \tilde{U}_x + k P_0 \tilde{U} = 0 \quad (E.11)$$

$U(x)$ se obtiene resolviendo (E.10) en tanto que $\tilde{U}(x)$ resolviendo (E.11) ó bien haciendo una reflexión alrededor del punto $x = 1/2$ de $U(x)$, es decir:

$$\tilde{U}(x) = U(1-x) \quad (E.12)$$

Ahora bien, para el problema (E.1) homogéneo y para el problema adjunto homogéneo, las soluciones tendrán la forma:

$$\Phi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-k_n t} U_n(x) \quad \text{y} \quad \tilde{\Phi}(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{k_n t} \tilde{U}_n(x)$$

respectivamente. Al imponer entonces una condición inicial se tendrá en cuenta lo siguiente:

$$\langle L\phi_n, \tilde{\phi}_m \rangle = \int_0^1 \left\{ \tilde{\phi}_m \frac{\partial \phi_n}{\partial t} - \phi_n \frac{\partial \tilde{\phi}_m}{\partial t} \right\} dx = e^{-(k_n - k_m)t} (k_n + k_m) \int_0^1 U_n \tilde{U}_m dx = 0 \quad (6.13)$$

Si $k_n \neq -k_m$ entonces $\int_0^1 U_n \tilde{U}_m dx = 0$. Aplicando esto se encuentra fácilmente que:

$$A_n = \frac{\int_0^1 \phi_0(x) \tilde{U}_n(x) dx}{\int_0^1 U_n(x) \tilde{U}_n(x) dx} \quad (6.14)$$

Aplicando lo anterior a este problema se encuentra que:

$$A_n = - \int_0^1 \sin n\pi(1-x) e^{\frac{P_0}{2}(1-x)} dx / \int_0^1 \sin n\pi x e^{\frac{P_0}{2}x} \sin n\pi(1-x) e^{\frac{P_0}{2}(1-x)} dx$$

evaluando:
$$A_n = 2n\pi \left((-1)^n e^{-\frac{P_0}{2}} - 1 \right) / \left((n\pi)^2 + (P_0/2)^2 \right)$$

Por lo tanto, la solución del problema (2.1, Cap III) es:

$$u(x,t) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} 2n\pi \left(1 - (-1)^n e^{\frac{P_0}{2}} \right) / \left((n\pi)^2 + (P_0/2)^2 \right) \cdot e^{\frac{P_0}{2}x} \sin n\pi x e^{-\frac{P_0^2 + 4n^2\pi^2}{4P_0}t}$$

La solución analítica utilizada en este trabajo para el problema (2.1, Cap III) y que es válida para los primeros instantes del proceso en tanto se cumpla la condición (Jensen-Finlayson 1980) $u(1,t) \leq 10^{-16}$ es:

$$u(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{x-t}{2\sqrt{t/P_0}} \right) + e^{\frac{P_0}{2}x} \operatorname{erfc} \left(\frac{x+t}{2\sqrt{t/P_0}} \right) \right\}$$

La deducción no se incluye aquí pero puede verse en detalle en Marino 1974.

Se tiene la ecuación
$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{10} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

con las condiciones: $u(x, 0) = 0$

$u(0, t) = 1$

$u(1, t) = 1$

Suponiendo que $u \in C^k$, se hace un desarrollo en Serie de Taylor:

$$u(x, t+h_t) = u(x, t) + h_t \cdot \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!} h_t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \dots$$

escribiendo en forma compacta mediante notación exponencial e indicial:

$$u^{n+1}(x) = \exp\left(h_t \frac{\partial}{\partial t}\right) u^n(x)$$

Con esta notación es posible hacer una inversión total o parcial del operador en diferencias, esto es:

$$\exp(-\theta h_t \frac{\partial}{\partial t}) u^{n+1}(x) = \exp\left((1-\theta) h_t \frac{\partial}{\partial t}\right) u^n(x), \quad 0 \leq \theta \leq 1$$

De esta expresión es posible desarrollar diferentes esquemas en diferencias.

a). Esquema Crank-Nicolson. ($\theta = 1/2$)

$$\exp\left(-\frac{1}{2} h_t \frac{\partial}{\partial t}\right) u^{n+1}(x) = \exp\left(\frac{1}{2} h_t \frac{\partial}{\partial t}\right) u^n(x)$$

Si $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{10} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}$ entonces:

$$\exp\left(-\frac{h_t}{2} \left(\frac{1}{10} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\right)\right) u^{n+1}(x) = \exp\left(\frac{h_t}{2} \left(\frac{1}{10} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\right)\right) u^n(x)$$

Desarrollando a primer término las exponenciales:

$$\left[1 - \frac{h_t}{2} \left(\frac{1}{10} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\right)\right] u^{n+1}(x) = \left[1 + \frac{h_t}{2} \left(\frac{1}{10} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\right)\right] u^n(x)$$

y aproximando por diferencias a las derivadas espaciales en la forma:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})/h_x^2, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = (u_i - u_{i-1})/h_x$$

se obtendrá después de agrupar adecuadamente el esquema:

$$\begin{aligned} & (-h_x/2h_x - h_x^2/2\rho h_x^2)u_{i-1}^{n+1} + (1 + h_x^2/\rho h_x^2 + h_x/2h_x)u_i^{n+1} + (-h_x^2/2\rho h_x^2)u_{i+1}^{n+1} \\ & = (h_x/2h_x + h_x^2/2\rho h_x^2)u_{i-1}^n + (1 - h_x/2h_x - h_x^2/\rho h_x^2)u_i^{n+1} + (h_x/2\rho h_x^2)u_{i+1}^n \end{aligned}$$

con $u_0^n = 1$, $u_I^n = 1$ y $n = 1, 2, \dots, N$, $i = 1, 2, \dots, I-1$.

Para el problema Dirichlet-Neumann (2.1, Cap III), se tiene que completar el sistema. Aproximando la condición de frontera Neumann:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = (u_{I+1} - u_{I-1})/h_x^2$$

se obtiene la ecuación adicional

$$\begin{aligned} & - (h_x/2h_x + h_x^2/\rho h_x^2)u_{I-1}^{n+1} + (1 + h_x^2/\rho h_x^2 + h_x/2h_x)u_I^{n+1} \\ & = (h_x/2h_x + h_x^2/\rho h_x^2)u_{I-1}^n + (1 - h_x/2h_x - h_x^2/\rho h_x^2)u_I^n \end{aligned}$$

b). Esquema completamente implícito ($\theta = 1$).

Procediendo y aproximando en la misma forma anterior, se encontrará el esquema numérico: (para el problema Dirichlet (1.1, Cap III)).

$$(-h_x^2/\rho h_x^2 - h_x/h_x)u_{i+1}^{n+1} + (1 + 2h_x^2/\rho h_x^2 + h_x/h_x)u_i^{n+1} + (-h_x^2/\rho h_x^2)u_{i+1}^{n+1} = u_i^n$$

con $u_0^n = 1$, $u_I^n = 1$ y $n = 1, 2, \dots, N$, $i = 1, 2, \dots, I-1$.

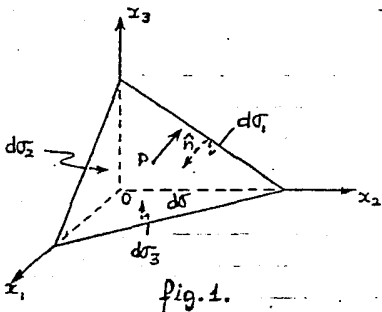
Para el problema Dirichlet-Neumann se tendrá la ecuación adicional:

$$(-2h_x^2/\rho h_x^2 - h_x/h_x)u_{I-1}^{n+1} + (1 + 2h_x^2/\rho h_x^2 + h_x/h_x)u_I^{n+1} = u_I^n$$

I. Mediante argumentos geométricos se puede demostrar la validez de la relación:

$$\underline{I} = \underline{\bar{x}} \cdot \underline{n}$$

Sea B un cuerpo sólido a un cierto sistema coordenado y considérese un elemento de superficie en un punto P del cuerpo; Tómese un pequeño tetraedro elemental dB formado por diferenciales de superficie en los planos coordenados en un origen próximo O y por el elemento de superficie $d\sigma$ (Fig. 1).



Siendo \underline{n} el vector unitario normal a la diferencial de superficie $d\sigma$, entonces los elementos de área $d\sigma_i$ en los planos coordenados están dados por

$$d\sigma_i = n_i d\sigma, \quad i=1,2,3$$

donde n_i son las componentes de \underline{n} .

Sean \underline{I}_n la tracción que actúa sobre $d\sigma$ y \underline{I}_i las tracciones que actúan sobre las superficies $d\sigma_i$; las tracciones \underline{I}_n y \underline{I}_i se escriben en función de los vectores base $\{\hat{e}_j\}$, $j=1,2,3$, en la forma:

$$\underline{I}_n = T_j \hat{e}_j$$

$$\underline{I}_i = -\tau_{ij} \hat{e}_j$$

Entonces la condición de equilibrio sobre B exige que todas las fuerzas ejercidas sobre el cuerpo se anulen, esto es:

$$F dB + \underline{I}_n d\sigma + \underline{I}_i d\sigma_i = 0$$

donde $F dB$ denota la fuerza por unidad de volumen que actúa sobre la masa contenida en dB. Haciendo $dB = \rho d\sigma$, con ρ un perímetro que depende de la distancia entre P y O, y expresando a la fuerza por

unidad de volumen en la forma: $\mathbf{F} = F_i \hat{e}_i$, entonces:

$$F_i \hat{e}_i \delta \sigma + T_j \hat{e}_j - \tau_{ij} n_i \delta \hat{e}_j = 0$$

Haciendo a P tender hacia O - manteniendo fija la dirección de \mathbf{n} -, tomando $h \rightarrow 0$, entonces el primer término en la relación anterior se anula puesto que la fuerza \mathbf{F} está acotada, quedando

$$T_j = \tau_{ij} n_i$$

o en notación vectorial: $\mathbf{T} = \underline{\underline{\tau}} \cdot \mathbf{n}$ □

II. El producto exterior de dos vectores $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ y $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ está definido en la forma:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = (a_2 b_3 - a_3 b_2, b_1 a_3 - a_1 b_3, a_1 b_2 - a_2 b_1)$$

Este producto se puede denotar en una forma "más útil" y que permite generalizar el producto exterior a magnitudes de orden superior. Se postula la existencia de un tensor de segundo orden $\underline{\underline{A}}$ antisimétrico tal que:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \underline{\underline{A}} \cdot \mathbf{b} = -\mathbf{b} \times \mathbf{a}$$

ó bien la existencia de un tensor $\underline{\underline{B}}$ de segundo orden, antisimétrico, tal que:

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \underline{\underline{B}} = -\mathbf{b} \times \mathbf{a}$$

Expresando a estos tensores en forma matricial:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} 0 & -b_3 & b_2 \\ b_3 & 0 & -b_1 \\ -b_2 & b_1 & 0 \end{pmatrix}$$

el producto vectorial se expresa entonces como el producto convencional de una matriz por un vector.

Mediante esta convención se determina fácilmente el producto exterior de un vector por un tensor de segundo orden, por ejemplo:

$$\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}}$$

Expresando al tensor $\underline{\underline{\tau}}$ en forma matricial se tendrá entonces que

$$\begin{aligned} \underline{x} \times \underline{\underline{\tau}} &= \begin{pmatrix} 0 & -x_3 & x_2 \\ x_3 & 0 & -x_1 \\ -x_2 & x_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_2 \tau_{31} - x_3 \tau_{21} & x_2 \tau_{12} - x_3 \tau_{22} & x_2 \tau_{33} - x_3 \tau_{23} \\ x_3 \tau_{11} - x_1 \tau_{31} & x_3 \tau_{12} - x_1 \tau_{32} & x_3 \tau_{13} - x_1 \tau_{33} \\ x_1 \tau_{21} - x_2 \tau_{11} & x_1 \tau_{22} - x_2 \tau_{12} & x_1 \tau_{23} - x_2 \tau_{13} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

y cada elemento de esta matriz se puede expresar en la forma abreviada:

$$(\underline{x} \times \underline{\underline{\tau}})_{ij} = \epsilon_{irk} x_r \tau_{kj}$$

donde ϵ_{ijk} son los símbolos de antisimetría (Sokolnikor 1976).

También utilizando esta expresión del producto exterior se puede demostrar la validez de la igualdad (2.13, Cap I). Siendo \underline{x} la matriz que contiene a las componentes del tensor que define al producto

$$\underline{x} \times \underline{r} = \underline{x} \cdot \underline{r}$$

$$\begin{aligned} \text{entonces: } (\underline{x} \times (\underline{p}\underline{v})) \cdot (\underline{v} - \underline{v}_x) - \underline{x} \times (\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{n}) &= (\underline{x} \cdot (\underline{p}\underline{v})) \cdot (\underline{v} - \underline{v}_x) - \underline{x} \cdot (\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{n}) \cdot \underline{n} \\ &= (\underline{x} \cdot (\underline{p}\underline{v}(\underline{v} - \underline{v}_x)) - \underline{x} \cdot (\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{n})) \cdot \underline{n} \\ &= (\underline{x} \cdot (\underline{p}\underline{v}(\underline{v} - \underline{v}_x) - \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{n})) \cdot \underline{n} \end{aligned}$$

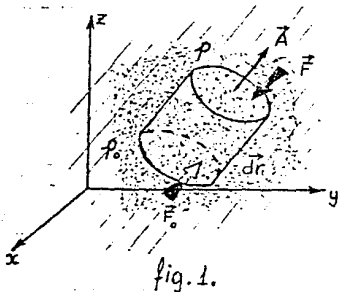
ya que el producto tensorial (de un tensor y dos vectores en este caso) es asociativo y distributivo. Finalmente, por asociatividad en el producto

tenemos, (en este caso de matrices), se tendrá que:

$$\begin{aligned} (\mathbf{x} \times (\rho \mathbf{v}_1)(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - \mathbf{x} \times \frac{\partial}{\partial z} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{x} \cdot [(\rho \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2)(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - (\frac{\partial}{\partial z} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}] \\ &= \mathbf{x} \times [(\rho \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2)(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - \frac{\partial}{\partial z} \cdot \mathbf{n}] \end{aligned}$$

□

III. Supóngase que el medio poroso ocupa una cierta región del espacio y que el fluido "fluye" a través de él, en una cierta dirección \vec{v} .



Considérese la porción del medio poroso situado comprendido en el cilindro de la fig. 1. colocado de tal forma que su eje es paralelo a la dirección del flujo. Sobre las tapas del cilindro se ejercen las presiones p_0 y p ($p_0 \neq p$); como el flujo se supone que ocurre a velocidades muy bajas, entonces se puede aplicar de la hidrostática que relaciona la fuerza y la presión:

$$\vec{F} = -p\vec{A}$$

donde \vec{F} es la fuerza total ejercida sobre una superficie de área A , p la presión sobre esta y \vec{A} un vector cuya magnitud es igual al área de la superficie y tal que $\vec{F} \parallel \vec{A}$. Por lo tanto, la fuerza neta que actúa sobre el cilindro -debida a la presión- y que hace que haya un flujo es:

$$\Delta \vec{F} = p_0 \vec{A} - p \vec{A} = -(p - p_0) \vec{A} = -\Delta p \vec{A}$$

y la fuerza total sobre el cilindro será

$$\vec{F} = -\Delta p \vec{A} + \vec{F}_e$$

donde \vec{F}_e es la fuerza total externa ejercida sobre el fluido contenido en el cilindro; si éste se toma de una altura diferencial:

$$\vec{F} = -dp \vec{A} + \vec{f}_e = -(\nabla p \cdot d\vec{r}) \vec{A} + \vec{f}_e$$

usando la relación $(\vec{a} \cdot \vec{c}) \vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b}) \vec{c} = \vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c})$, se tendrá que:

$$\vec{F} = -(\nabla p \cdot d\vec{r}) \vec{A} + \vec{f}_e = (\nabla p \times \vec{A}) d\vec{r} - \nabla p (\vec{A} \cdot d\vec{r}) + \vec{f}_e$$

Suponiendo que el medio poroso es homogéneo e isotrópico y que el gradiente ∇p "indica" la dirección del flujo, entonces $\nabla p \parallel \vec{A}$ (las tapas del cilindro son perpendiculares a la dirección del flujo). Así:

$$\vec{F} = -\nabla p (\vec{A} \cdot d\vec{r}) + \vec{f}_e$$

Por la segunda ley de Newton: $\vec{F} = m\vec{a} = m \frac{d\vec{v}}{dt}$, se tendrá:

$$-\nabla p (\vec{A} \cdot d\vec{r}) + \vec{f}_e = m \frac{d\vec{v}}{dt}$$

En este caso: $\vec{A} \cdot d\vec{r} = A dr \cos \theta$, (aquí $\theta = 0$ por que $\vec{A} \parallel d\vec{r}$), representa el volumen del cilindro: V , dividiendo todo entre V :

$$-\nabla p + \vec{f}_e/V = m/V \frac{d\vec{v}}{dt}$$

denotando $\rho = m/V$ y $\vec{F}_e = \vec{f}_e/V$ se llega a:

$$-\nabla p + \vec{F}_e = \rho \frac{d\vec{v}}{dt}$$

Se descompone ahora a \vec{F}_e como la suma de la fuerza debida a la gravedad - que se supone actúa en la dirección \hat{z} -, más algunas otras que actúan sobre el fluido:

$$\vec{F}_e = -\rho g \hat{k} + \vec{F}' \quad , \quad \hat{k} \text{ vector unitario en la dirección } \hat{z}.$$

Substituyendo:

$$-\nabla p - \rho g \hat{k} + \vec{F}' = \rho \frac{d\vec{v}}{dt}$$

y multiplicando escalarmente por $d\vec{r}$:

$$\begin{aligned}
 -\nabla p \cdot d\vec{r} - \rho g \hat{k} \cdot d\vec{r} + \vec{F} \cdot d\vec{r} &= \rho \frac{d\vec{v}}{dt} \cdot d\vec{r} = \rho \frac{d\vec{v}}{dt} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} dt = \rho \vec{v} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} dt \\
 &= \rho \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{v} \right) dt = \rho d\left(\frac{1}{2} v^2\right)
 \end{aligned}$$

Dividiendo entre ρ (ya si $dz = \hat{k} \cdot d\vec{r}$): $d\left(\frac{1}{2} v^2\right) = -\frac{dp}{\rho} - g dz + \frac{1}{\rho} \vec{F} \cdot d\vec{r}$

e integrando:

$$\int_{v_0}^v d\left(\frac{1}{2} v^2\right) = -\int_{p_0}^p \frac{dp}{\rho} - \int_{z_0}^z g dz + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \frac{1}{\rho} \vec{F} \cdot d\vec{r}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{2} (v^2 - v_0^2) = -\int_{p_0}^p \frac{dp}{\rho} - (z - z_0)g + \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \frac{1}{\rho} \vec{F} \cdot d\vec{r}$$

Suponiendo que el fluido es incompresible ($\rho = \text{cte.}$), entonces:

$$\frac{1}{\rho} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{F} \cdot d\vec{r} = \frac{1}{2} (v^2 - v_0^2) + (z - z_0)g + \frac{1}{\rho} (p - p_0)$$

Denotando: $W = \frac{1}{\rho} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{F} \cdot d\vec{r}$, que se puede interpretar como "trabajo por unidad de masa":

$$W = \frac{1}{2} (v^2 - v_0^2) + (z - z_0)g + \frac{1}{\rho} (p - p_0)$$

Obsérvese que en este caso el trabajo solo depende de los valores en los puntos "final e inicial de la trayectoria", lo que significa que la fuerza que lo produce es conservativa y esta se puede obtener como el gradiente de un potencial; utilizando el Teorema del Trabajo y la Energía para fuerzas conservativas:

$$W = \Delta K = -\Delta U = U - U_0$$

con K representando a la energía cinética y U representando a la energía potencial. Tomando por simplicidad: $v_0 = 0$, $v_0 = 0$, $z_0 = 0$ y $U = \Phi$ se tendrá finalmente la ecuación de Bernoulli:

$$\Phi = gz + \frac{1}{2} v^2 + \frac{1}{\rho} (p - p_0)$$

□

Se obtendrán aquí en forma directa los operadores P, B, Q^* y C^* para un operador diferencial simple, con condiciones de frontera Dirichlet sobre un dominio continuo. Posteriormente se trabajará la misma ecuación sobre un dominio discontinuo. Se tiene inicialmente el problema:



Fig. 1.

$$\Delta u = \nabla^2 u + r \cdot \nabla u = f \quad \text{en } \Omega \quad r = \text{cte.} \quad (1)$$

$$u = g \quad \text{en } \partial \Omega$$

Se define primero al operador P . Sea

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\Omega} v \Delta u \, dV = \int_{\Omega} v (r \cdot \nabla u + \nabla^2 u) \, dV \quad (2)$$

Integrando por partes se obtiene que:

$$\langle Pu, v \rangle = \int_{\partial \Omega} \{uv r \cdot \hat{n} + u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n}\} ds + \int_{\Omega} u (v \nabla^2 r - r \cdot \nabla v) \, dV$$

Sea:

$$\langle Q^* u, v \rangle = \int_{\Omega} u (v \nabla^2 r - r \cdot \nabla v) \, dV \quad (3)$$

Para determinar B , se selecciona a u de la integral sobre $\partial \Omega$, así:

$$\langle Bu, v \rangle = \int_{\partial \Omega} \{u \{v r \cdot \hat{n} + \frac{\partial v}{\partial n}\}\} ds \quad (4)$$

Finalmente, con los términos restantes que contienen a la condición de frontera complementaria, se determina a C^* , así:

$$\langle C^* u, v \rangle = \int_{\partial \Omega} v \frac{\partial u}{\partial n} \, ds \quad (5)$$

Por lo tanto, con los operadores P, B, Q^* y C^* así definidos, se puede demostrar que la relación $P - B = Q^* - C^*$ es una fórmula de Green en el sentido de la Aproximación Unificada.

Se divide ahora en dos partes a la región Ω , y sea el problema:

Si $\partial \Omega = \partial \Omega_1 \cup \partial \Omega_2$, $B_{y_1} C^*$ con los miembros (4) y (5), quedando entonces que:

$$\int_{\partial \Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right) \psi - u \frac{\partial \psi}{\partial n} + \int_{\Omega} \nabla^2 u \cdot \nabla \psi + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \psi = \int_{\Omega} \nabla^2 u \cdot \nabla \psi + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \psi$$

y teniendo en cuenta que $\partial \Omega_1 = \partial \Omega_2 = \partial \Omega$ y $\partial \Omega_1 \cup \partial \Omega_2 = \partial \Omega$:

$$\int_{\partial \Omega} (\psi \nabla u - u \nabla \psi) dV = \int_{\Omega} (\nabla^2 u \cdot \nabla \psi - \nabla u \cdot \nabla \psi) dV$$

Resumiendo:

$$\int_{\partial \Omega} (\psi \nabla u - u \nabla \psi) dV = \int_{\Omega} (\nabla^2 u \cdot \nabla \psi - \nabla u \cdot \nabla \psi) dV$$

Integrando nuevamente por partes:

$$\int_{\partial \Omega} \psi \nabla u \cdot \nu = \int_{\Omega} \nabla^2 \psi \cdot u + \int_{\partial \Omega} \psi \nabla u \cdot \nu$$

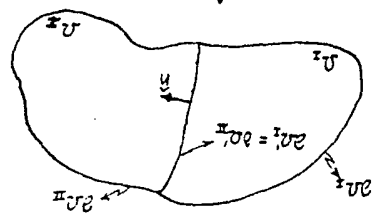
con M_1 la parte de Ω sobre Ω_1 y M_2 la parte de Ω sobre Ω_2 . Se define nueva- mente al operador ∇ en la forma:

$$[\nabla u] = M_1 (\nabla u_1) - M_2 (\nabla u_2) ; \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right] = \frac{\partial u_1}{\partial n_1} (\partial \Omega_1) - \frac{\partial u_2}{\partial n_2} (\partial \Omega_2) \quad (6)$$

frontera $\partial \Omega_1 = \partial \Omega_2$, es decir:

donde $[\nabla u]$, $[\frac{\partial u}{\partial n}]$ denotan los saltos de la solución y su derivada normal en la inter-

Fig. 2.



$$[\nabla u] = f_1, \left[\frac{\partial u}{\partial n} \right] = f_2 \text{ en } \partial \Omega_1 = \partial \Omega_2$$

$$u = g \text{ en } \partial \Omega_1 \cup \partial \Omega_2$$

$$\Delta u + \nabla u = f \text{ en } \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$$

$$\langle (P-Q^*)u, v \rangle = \langle (B-C^*)u, v \rangle + \int_{\Omega_I} (uvr \cdot \hat{n}_I + u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n_I}) ds + \int_{\Omega_{II}} (uvr \cdot \hat{n}_I + u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n_{II}}) ds$$

La normal en la primera integral apunta de Ω_I a Ω_{II} y en la segunda de Ω_{II} a Ω_I ; tomando a una como el negativo de la otra, $\partial \Omega_I = \partial \Omega_{II} = \Gamma$ y denotando con (u_I, v_I) , (u_{II}, v_{II}) a u y v en las subregiones Ω_I y Ω_{II} respectivamente, se encuentra, luego de agrupar convenientemente al tener en cuenta que $\hat{n}_{II} = -\hat{n}_I = -\hat{n}$, que:

$$\langle (P-Q^*)u, v \rangle = \langle (B-C^*)u, v \rangle - \int_{\Gamma} \{ (u_I v_I - u_{II} v_{II}) r \cdot \hat{n} + (u \frac{\partial v}{\partial n} - u \frac{\partial v}{\partial n_I}) - (v \frac{\partial u}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n_{II}}) \} ds$$

Denotando los saltos sobre la interfaz Γ en la forma (6), se encuentra la expresión:

$$\langle (P-Q^*)u, v \rangle = \langle (B-C^*)u, v \rangle - \int_{\Gamma} \{ [uv] r \cdot \hat{n} + [u \frac{\partial v}{\partial n}] - [v \frac{\partial u}{\partial n}] \} ds \quad (7)$$

Es muy simple demostrar que: $[ab] = [a]b + [b]a$, con $[s] = s_I - s_{II}$ y $\hat{s} = \frac{1}{2}(s_I + s_{II})$. Utilizando esta relación se desarrolla la expresión (7):

$$\langle (P-Q^*)u, v \rangle = \langle (B-C^*)u, v \rangle - \int_{\Gamma} \{ [u][v] + [u]v \} r \cdot \hat{n} + [u] \frac{\partial v}{\partial n} + u \frac{\partial v}{\partial n} - [v] \frac{\partial u}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \} ds$$

Seleccionando los términos que contienen saltos de u y $\frac{\partial u}{\partial n}$, se determina al operador J :

$$\langle Ju, v \rangle = - \int_{\Gamma} \{ [u] (v r \cdot \hat{n} + \frac{\partial v}{\partial n}) - v \frac{\partial u}{\partial n} \} ds$$

y de los términos restantes se obtiene al operador $-K^*$:

$$\langle Ku, v \rangle = \int_{\Gamma} \{ u ([v] r \cdot \hat{n} + \frac{\partial v}{\partial n}) - [v] \frac{\partial u}{\partial n} \} ds$$

Por lo tanto, la relación $\langle (P-B-J)u, v \rangle = \langle (Q^*-C^*-K^*)u, v \rangle$ con P, B, J, Q^*, C^* y K^* dados en la forma anterior, es una fórmula de Green en el sentido de la Aproximación Unificada.

Bibliografía.

- Allen, B. M. 1984: "Allocation Techniques for Modeling Compositional Flows in Oil Reservoirs". Springer-Verlag.
- Arfken, G. 1970: "Mathematical Methods for Physicists". Academic Press, N. Y.
- Alonso-Fern. 1976: "Física". (vol. I y II). Fondo Educativo Interamericano.
- Bear, J. 1972: "Dynamics of Fluids in Porous Media". American Elsevier P. Co.
- Bronshtein - Samundiaev, 1975: "Manual de Matemáticas". E. C. P. S. A.
- Carnahan - Luther - Wilkes, 1979: "Cálculo Numérico, Métodos, Aplicaciones". Editorial Reuda, Madrid.
- Conte-De Boor, 1973: "Elementary Numerical Analysis". Mc Graw-Hill. I. S. E.
- De Wiest, J. 1969: "Flow Through Porous Media". Academic Press.
- Davis - De Wiest. 1971: "Hidrogeología". Editorial Ariel. Barcelona.
- Douglas, J. 1959: "Round-Off Error in the Numerical Solution of the Heat Equation". Journal of the A. C. M., Vol. 6, 48-58.
- Ebeck - White. 1958: "Mixing of Fluids Flowing Through Beds of Packed Solids". Amer. Inst. Chem. Eng. J., 4, No 2.
- Freeze - Cherry. 1979: "Groundwater", Prentice-Hall, Inc.
- Gavruin, M. K. 1973: "Conferencias Sobre los Métodos de los Cálculos". Edit. MIR.
- Gurtin, M. E. 1981: "An Introduction to Continuum Mechanics". Academic Press.
- Gasser - Lasalle - Sullivan, 1977: "Análisis Matemático I". Trillas, México.

- Henrici, I. - Spence, D. 1981: "Framework for Biotransz. 'Fraser Series'. Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., Vol 78, No. 12, pp. 7240-7244.
- Henrici, I., Montalvo, A. 1965: "Modelos Matemáticos de Campos Geotérmicos". Comunicaciones Internas IIMAS, U.N.A.M.
- Henrici, I. 1964: "Boundary Methods, an algebraic Theory". Pitman Publishing Co.
- Henrici, I. 1984: "Hybrid Methods From a New Perspective". Finite Elements in Water Resources. Springer-Verlag, p.p. 37-44.
- Henrici, I. 1985 I: "Unified Formulation of Numerical Methods. I. Green's Formulas for Operators in Discontinuous Fields". Numerical Methods for Partial Differential Equations. 1. (25-44).
- Henrici, I. 1985 II: "Unified Approach to Numerical Methods. II. Finite Elements, Boundary Methods and their coupling". Numerical Methods for Partial Differential Equations. 1. (159-186).
- Henrici, I. 1985 III: "Unified Approach to Numerical Methods. III. Finite Differences and Ordinary Differential Equations". Numerical Methods for Partial Differential Equations. 1, (241-258).
- Jensen - Feinlayson, 1980: "Solution of the Transport Equation Using a Moving Coordinate System". Adv. in Wat. Res. Vol 3 (1), 9-18.
- Kikoin, A.K - Kikoin, I.K. 1979: "Física Molecular". Edit. MIR Moscú.
- Landau - Lifschitz, 1970: "Lehrbuch der Theoretischen Physik. Band V. Statistische Physik. Akademie-Verlag-Berlin.
- Levi, E. 1980: "Técnicas y Métodos de las Matemáticas Aplicadas". U.N.A.M. (F.I)
- Levent, W. 1951: "On the Convergence of Approximate Solutions of the Heat Eq. to the Exact Solution". Proc. Amer. Math. Soc. - 2, 433-439.

- Lohman, S. W. 1977: "Hidráulica Subterránea". Editorial Ariel, Barcelona.
- Luthi, R. 1981: "Manual de Lenguaje Fortran". Editorial Limusa, México.
- Marino, M. A. 1974: "Numerical and Analytical Solutions of Dispersion in finite, absorbing Porous Medium". Water Resources Bulletin, 10, 81.
- McCracken, D. 1981: "Programación Fortran". Editorial Limusa, México.
- Ogata-Banks, 1961: "A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media". U.S. Geol. Surv. Prof. Paper., 411-A.
- Ogata, A. 1970: "Theory of dispersion in a granular medium". U.S. Geol. S. P. P. 411-I.
- Pinder-Gray. 1977: "Finite Element Simulation in Surface and Subsurface Hydrology". Academic Press.
- Pinder-Huyakorn. 1983: "Computational Methods in Subsurface Flow". Academic Press.
- Prager, W. 1961: "Introduction to Mechanics of Continua". Dover Publications INC. N.Y.
- Prenter, P. M. 1975: "Splines and Variational Methods". John Wiley and Sons.
- Ralston, A. 1978: "Introducción al Análisis Numérico". Editorial Limusa, México.
- Rifai-Kaufman-Todd, 1956: "Dispersion phenomena in laminar flow through porous media". Report 3, I. E. R. Series 90, San. Eng. Res. Lab. U. C. B.
- Samusky-Anduler, 1974: "Métodos en Diferencias para las ecuaciones elípticas" M.I.R.
- Taylor-Wade. 1976: "Cálculo Diferencial e Integral". Editorial Limusa, México.
- Tejonero-Samarsky, 1980: "Ecuaciones de la Física-Matemática". Edit. MIR Moscú.
- Sokolnikov, I. S. 1976: "Análisis Tensorial". Editorial Limusa, México.