

Carolina Sánchez Guerra

*Métodos Numéricos para Ecuaciones
en Derivadas Parciales de Advección-
Difusión-Reacción Dependientes del
Tiempo*

Numerical Methods for Time-Dependent
Advection-Diffusion-Reaction Partial Differential
Equations

Trabajo Fin de Grado
Grado en Matemáticas
La Laguna, julio de 2023

DIRIGIDO POR
Severiano González Pinto

Severiano González Pinto
Análisis Matemático
Universidad de La Laguna
38200 La Laguna, Tenerife

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer el esfuerzo y la confianza depositada en mí a Severiano, mi tutor, porque este trabajo y todo lo que simboliza y conlleva para mí poder entregarlo y dar por finalizada esta etapa no hubiera sido posible sin su apoyo.

Seguidamente, quiero agradecer a la familia y amigas que han estado a mi lado de forma incondicional, alentándome a seguir por mucho que me abordasen las ganas de abandonar. En especial, agradecer a Helena y a Brenda, que han sido mis fieles compañeras durante todos estos años de carrera y que estoy absolutamente convencida de que si no hubieran aparecido en mi camino, todo hubiera sido diferente.

A mi madre, a Sara y a Violeta, por servirme como mujeres inspiradoras y recordarme **siempre** mi valía, más aún cuando fueron mi sostén en aquellos momentos en los que flaquearon mis fuerzas en esta época tan convulsa de mi vida.

Después de recordarlas a todas, me siento tan afortunada. Una vez más, gracias.

Carolina Sánchez Guerra
La Laguna, 10 de julio de 2023

Resumen · Abstract

Resumen

Las ecuaciones de advección, difusión y reacción son EDPs que describen la evolución de una especie química o biológica respecto de la variable tiempo en un medio fluido. Debido a la complejidad que conlleva obtener soluciones analíticas, por lo general, se recurren a métodos numéricos que buscan arrojar aproximaciones fiables sobre éstas. Entre los diversos métodos numéricos existentes, aquí se estudiará el Método de Líneas (MOL), que consta, en primer lugar, de la elección de una discretización espacial para el problema, de forma que se transforme en un sistema semidiscreto de EDOs -problema de valor inicial-, para luego, resolverlo mediante métodos numéricos adecuados de EDOs. Tanto las discretizaciones espaciales como las integraciones temporales deben atender a una serie de propiedades como son la estabilidad, consistencia y positividad con objeto de poder garantizar la convergencia y fiabilidad del método.

Palabras clave: *Discretización Espacial- Métodos Numéricos - Sistemas de EDOs - Estabilidad.*

Abstract

The advection, diffusion and reaction equations are PDEs that describe the evolution of chemical or biological species with respect to the time variable in a fluid medium. Due to the complexity of obtaining analytical solutions, numerical methods are generally employed to provide reliable approximations for these equations. Among the various existing numerical methods, we will study the Method of Lines (MOL) here. First of all, the MOL is concerned with the choice of a spatial discretization for the problem, transforming it into a semi-discrete ODE system (initial value problem). Then, MOL solves it using appropriate numerical ODE methods. Both spatial discretizations and temporal integrations must satisfy a set of properties such as stability, consistency and positivity to guarantee the convergence and reliability of the method.

Keywords: *Spatial Discretization – Numerical Methods – ODE Systems – Stability.*

Contenido

Agradecimientos	III
Resumen/Abstract	V
Introducción	IX
1. Ecuaciones de Advección-Difusión-Reacción	1
1.1. Ecuaciones de los Modelos	2
1.1.1. Ecuación de Advección	2
1.1.2. Ecuación de Difusión	3
1.1.3. Ecuación de Advección-Difusión	3
1.1.4. Ecuación de Advección-Difusión-Reacción	3
1.1.5. Consideraciones y Condiciones de las Ecuaciones	4
2. Discretizaciones Espaciales Básicas	5
2.1. Descomposiciones de Fourier Discretas	6
2.2. Esquemas de Diferencias Finitas	8
2.2.1. Esquemas para Advección	8
2.2.2. Esquemas para Difusión	10
2.2.3. Esquemas para Advección-Difusión	11
2.2.4. Escalado Espacial	11
3. Convergencia de las Discretizaciones Espaciales	13
3.1. Estabilidad, Consistencia y Convergencia	13
4. Integraciones Temporales	19
4.1. Métodos de Líneas (MOL)	19
4.1.1. Discretizaciones Espacio-Temporales Directas	21
4.2. Estabilidad, Consistencia y Convergencia	22
4.3. Estabilidad de θ -Métodos	24
4.4. Estabilidad de MOL - Regiones de Estabilidad	26

5. Propiedades de Monotonicidad	29
5.1. Positividad	29
5.2. Esquemas de Advección-Difusión Espacial Positivos	31
5.3. Métodos de Pasos de Tiempo Positivos	31
6. Modelos y Ejemplos Numéricos	35
6.1. Sistema EDO Rígido para Química Atmosférica	35
6.2. Modelo de Angiogénesis	38
A. Apéndice	45
A.1. Codificación en Matlab	45
A.1.1. Ejemplo de Química Atmosférica	45
A.1.2. Ejemplo de Angiogénesis	46
A.2. Normas	48
Bibliografía	49
Poster	51

Introducción

En la naturaleza, estamos rodeados de fenómenos que implican el transporte y la difusión de especies químicas, tal es así, que resultan incalculables y parte de ellos pueden ser palpables y visibles para el ojo humano. Imaginemos un cubo de tinta derramado en un canal de agua, las ecuaciones de advección-difusión son capaces de estudiar la variación espacio-temporal de la tinta analizando su transporte y dispersión a lo largo del canal.

Las ecuaciones de advección-difusión-reacción sirven para modelar no solo estos ejemplos tan banales, sino otros asuntos de cierta transcendencia para la evolución y el conocimiento humano, como pueden ser el estudio de la propagación de agentes contaminantes en ciertos medios y más en concreto, la estimación del impacto ambiental por derrames de petróleo o el control de emisiones antropogénicas; entre otras muchas ramas de estudio.

Habiendo motivado brevemente la necesidad de resolver estas ecuaciones, en la presente memoria se dictarán los pasos a seguir para la resolución obtenida mediante el Método de Líneas (MOL) -cada capítulo representará un paso-.

En el primer capítulo, se modelarán las ecuaciones de advección, difusión, reacción y sus posibles combinaciones en términos de las derivadas parciales de la concentración media de una especie. En el segundo capítulo, se abordarán diversas discretizaciones espaciales por medio de esquemas de diferencias finitas y los sistemas semidiscretos lineales de EDOs que producen -relacionados con los problemas de valor inicial-. En el tercer capítulo, se analizarán las propiedades de estabilidad y consistencia de dichas discretizaciones en el marco general de la convergencia. En el cuarto capítulo, se presentarán los métodos de líneas y los métodos adecuados de EDOs para resolver los sistemas provenientes de las discretizaciones espaciales anteriores. De la misma forma que para las discretizaciones espaciales, en este capítulo también se realizará un análisis de la consistencia y convergencia y de forma más extensa, sobre la estabilidad de

MOL. En el quinto capítulo, se explica la relevancia de la positividad, debido a que si esta no se preserva, los resultados numéricos pueden acarrear oscilaciones e inestabilidades. Se describen algunos criterios para discernir si se cumple esta propiedad de positividad en los esquemas de diferencias de advección-difusión y en los métodos de integración temporal. En el último capítulo, se adjuntan dos problemas resueltos en MATLAB con objeto de ejemplificar todo lo anterior, uno ligado a la química atmosférica y el otro relacionado con la angiogénesis.

Es preciso aclarar que esta memoria resulta un trabajo bibliográfico basado en [1] y en el que se ha ampliado la información consultando de manera puntual en [2], [3], [4] y [5]. Y para los ejemplos de MATLAB se ha usado la información que se facilita en [6] y [7].

Ecuaciones de Advección-Difusión-Reacción

Dentro de las ramas de estudio que albergan la física y la química, una gran variedad de problemas puede analizarse bajo el estudio comparativo de tres fenómenos: la advección, la difusión y la reacción.

A grandes rasgos -y bajo los efectos de un medio fluido-, la advección es capaz de simular el transporte o desplazamiento de magnitudes físicas, mientras que la difusión se centra en la dispersión o propagación gradual de las magnitudes en cuestión; asimismo, la reacción describe la interacción de las especies involucradas en los procesos químicos¹.

A continuación, se estudiará cómo estos conceptos conducen a ecuaciones en derivadas parciales que describen la evolución de una especie química o biológica respecto de la variable tiempo. En este sentido, surgen, además, las ecuaciones de advección-difusión o de advección-difusión-reacción, que entran en juego como modelos matemáticos capaces de describir la simultaneidad de dichos fenómenos. Estas ecuaciones pueden obtenerse, por ejemplo, tras efectuar un balance de masas, que no es más que poner en práctica la Ley de Conservación de la Materia.

La relevancia de todos estos modelos matemáticos se despliega desde la química atmosférica, con su aplicación en el estudio de la propagación de sustancias contaminantes en diferentes medios, hasta procesos fisiológicos como el análisis de la concentración de células endoteliales que recubren los vasos sanguíneos bajo los efectos de factores tumorales. Estos dos últimos ejemplos serán estudiados con mayor detalle más adelante.

¹ Se entenderán como especies a las sustancias, contaminantes, agentes químicos, biológicos o moléculas.

1.1. Ecuaciones de los Modelos

Con objeto de modelar ciertos fenómenos mediante las ecuaciones de advección, difusión y reacción, se considera la concentración $u(x, t)$ de cierta especie en la variable espacial $x \in \mathbb{R}$ y la variable temporal $t \geq 0$. Entonces, sea $h > 0$ un número “pequeño”, la concentración media $\bar{u}(x, t)$ en una celda $[x - \frac{1}{2}h, x + \frac{1}{2}h]$ viene dada por

$$\bar{u}(x, t) := \frac{1}{h} \int_{x-\frac{1}{2}h}^{x+\frac{1}{2}h} u(s, t) ds = u(x, t) + \frac{1}{24} h^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) + \dots$$

En lo que sigue, se asumirá que las funciones admiten tantas derivadas con continuidad como requiera el análisis.

1.1.1. Ecuación de Advección

Si la especie es transportada por un medio que fluye con una velocidad $a(x, t)$, atendiendo a la Ley de Conservación de la Materia, la variación de $\bar{u}(x, t)$ por unidad de tiempo es el saldo neto entre la entrada y la salida de la concentración de la materia sobre los límites de la celda:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{u}(x, t) = \frac{1}{h} \left[a \left(x - \frac{1}{2}h, t \right) u \left(x - \frac{1}{2}h, t \right) - a \left(x + \frac{1}{2}h, t \right) u \left(x + \frac{1}{2}h, t \right) \right],$$

donde $a(x \pm \frac{1}{2}h)u(x \pm \frac{1}{2}h)$ son los flujos de masa sobre los límites izquierdo y derecho de la celda. A partir de esta igualdad, si $h \rightarrow 0$, se sigue que la concentración satisface

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (a(x, t)u(x, t)) = 0, \quad (1.1)$$

que puede reescribirse de la siguiente forma cuando $a(x, t)$ es constante

$$u_t + au_x = 0 \quad (1.2)$$

con $a \in \mathbb{R}$. Estas expresiones equivalentes se conocen como ecuaciones de advección, aunque también se denominan ecuaciones de convección. Como apreciación, resulta fácil discernir que $u(x, t) = u(x - at, 0)$ satisface (1.2), lo que muestra que un perfil inicial prescrito $u(x, 0)$ se desplaza en el tiempo con una velocidad a sin ningún cambio de forma. Las líneas $x - at = C$ en el plano (x, t) se llaman curvas características de esta ecuación de advección. A lo largo de estas características, la solución $u(x, t)$ es constante.

1.1.2. Ecuación de Difusión

De la misma forma, puede considerarse el efecto de la difusión, donde el cambio de $\bar{u}(x, t)$ es causado por los gradientes en la solución; y los flujos a través de los límites de la celda son $-d(x \pm \frac{1}{2}h)u_x(x \pm \frac{1}{2}h)$ con $d(x, t)$ el coeficiente de difusión. De modo que

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(d(x, t) \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \right), \quad (1.3)$$

o lo que es lo mismo cuando $d(x, t) = d$ es constante

$$u_t = du_{xx} \quad (1.4)$$

con $d > 0$. Estas expresiones se denominan ecuaciones de difusión. A (1.4) también se le conoce como ecuación del calor, puesto que es un modelo para la evolución de la distribución de la temperatura en una varilla delgada (unidimensional) que se encuentra aislada a lo largo de su extensión, siendo d la conductividad térmica. Principalmente, se interpreta esta ecuación como el resultado de la difusión molecular causada por el movimiento browniano de partículas.

1.1.3. Ecuación de Advección-Difusión

Si se atiende, al unísono, a los efectos de la advección y la difusión sobre las especies químicas, se sigue la ecuación de advección-difusión (unidimensional), que no es más que una combinación de los dos fenómenos:

$$u_t + au_x = du_{xx} \quad (1.5)$$

con $a \in \mathbb{R}$ y $d \geq 0$ constantes simples. Debido a que la ecuación de advección-difusión subyace de la Ley de Conservación de Masa, también se la conoce como ecuación de balance de masas.

1.1.4. Ecuación de Advección-Difusión-Reacción

Si, además de lo anterior, se da un cambio local en $u(x, t)$ debido a fuentes, sumideros o reacciones químicas que son descritas por

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

el cambio general en la concentración, atendiendo a la simultaneidad de los tres fenómenos, conduce a la ecuación de advección-difusión-reacción siguiente

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}(a(x, t)u(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x}\left(d(x, t)\frac{\partial}{\partial x}u(x, t)\right) + f(x, t, u(x, t)) \quad (1.6)$$

o, lo que es lo mismo,

$$u_t + (au)_x = (du_x)_x + f(u), \quad (1.7)$$

donde (1.7) es considerada en un intervalo espacial $\Omega \subset \mathbb{R}$ con tiempo $t > 0$.

1.1.5. Consideraciones y Condiciones de las Ecuaciones

Además de las ecuaciones, se asumirá un estado inicial $u(x, 0) = u_0(x)$ y condiciones de contorno adecuadas. Para llevar a cabo ciertos análisis teóricos -por ejemplo, sobre la estabilidad o la positividad-, los coeficientes $a(x, t)$ y $d(x, t)$ se tomarán constantes e independientes de la concentración de $u(x, t)$. Asimismo, se considerarán las ecuaciones para $x \in \mathbb{R}$, $t \geq 0$ y con condición de periodicidad espacial

$$u(x \pm 1, t) = u(x, t). \quad (1.8)$$

El uso de la condición (1.8) será frecuente durante el transcurso del trabajo puesto que facilita la presentación de las ecuaciones y se entenderá como una condición de frontera periódica. Además, para (1.8) resulta suficiente considerar $u(x, t)$ en el intervalo $[0, 1]$.

A modo de apreciación, en las secciones anteriores se ha considerado el caso escalar donde se ve involucrada la concentración de una sola especie; sin embargo, estas ecuaciones pueden ser extendidas a su forma vectorial en cuyo caso

$$u = (u_1, u_2, \dots, u_s)^T$$

es el vector de las s concentraciones que aparecen en el modelo matemático.

Discretizaciones Espaciales Básicas

En esta sección, se abordarán las discretizaciones espaciales para los problemas de advección y difusión. Aun cuando estas discretizaciones espaciales son aplicables en general -incluso para problemas no lineales-, este trabajo se limitará a desarrollar un análisis para los casos de coeficientes constantes y condiciones de periodicidad espacial.

En este contexto, las discretizaciones en el dominio espacial pretenden reemplazar las derivadas espaciales mediante aproximaciones $w_j(t)$ a $u(x_j, t)$ conduciendo así a esquemas de diferencias finitas. Todo ello con objeto de modelar un sistema semidiscreto donde $w_j(t)$ represente a $u(x_j, t)$ en la malla uniforme $\Omega_h = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ con puntos de malla $x_j = jh$ y paso $h = 1/m$; de modo que la partición que definen los nodos descompone un intervalo $[0, 1]$ en m subintervalos de longitud h .

Debido a su simplicidad, los esquemas de diferencias finitas se usan frecuentemente en las simulaciones numéricas de aquellos fenómenos físicos que se pueden representar mediante modelos matemáticos que involucran EDPs.

La relevancia de los esquemas de discretización del dominio espacial reside en que conducen a sistemas diferenciales -problemas de valor inicial- sobre los que se pueden aplicar integraciones temporales con el fin de aproximar la solución de la ecuación en cuestión.

Más adelante, se modelarán dos tipos de discretizaciones espaciales de los problemas de advección-difusión: el primero a través del esquema de diferencias *upwind* -a favor del viento- de primer orden y el segundo mediante el esquema de diferencias centrales de segundo orden. Se considerarán, en primer lugar, las discretizaciones espaciales de los dos fenómenos por separado, pues son dos fenómenos distintos, donde uno mide la velocidad del transporte -advección- y el otro mide la disipación -difusión-. De modo que, la discretización espacial de

la ecuación de advección-difusión no es más que una combinación de las dos primeras.

2.1. Descomposiciones de Fourier Discretas

Las descomposiciones de Fourier discretas se convertirán en una herramienta útil a la hora de analizar esquemas de diferencias lineales con condiciones de periodicidad espacial. En capítulos venideros, su uso resultará bastante ventajoso para el estudio de las propiedades fundamentales de estabilidad, convergencia, disipación y dispersión.

Sean *los modos de Fourier* o también conocidos como *armónicos* de la forma

$$\varphi_k(x) = e^{2\pi i k x} \quad \text{para } k \in \mathbb{Z}. \quad (2.1)$$

Estos modos conforman una base ortonormal para el espacio de funciones $L_2[0, 1]$, en consecuencia, cualquier función $v \in L_2[0, 1]$ puede ser escrita como

$$v(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \alpha_k \varphi_k(x), \quad (2.2)$$

siendo α_k los coeficientes de Fourier. A (2.2) se le conoce como la célebre serie de Fourier y es convergente en la norma L_2 .

A continuación, se consideran los modos de Fourier discretos

$$\phi_k = (\varphi_k(x_1), \varphi_k(x_2), \dots, \varphi_k(x_m))^T \in \mathbb{C}^m, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (2.3)$$

Estos vectores en \mathbb{C}^m pueden tratarse como una función definida en la malla Ω_h . En este sentido, ϕ_k es simplemente la restricción de φ_k en la malla. Además, se tiene que el conjunto de los modos discretos $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m\}$ forma una base ortonormal para \mathbb{C}^m . Por tanto, cualquier vector $v \in \mathbb{C}^m$ puede ser expresado como

$$v = \sum_{k=1}^m \alpha_k \phi_k. \quad (2.4)$$

Asimismo, sean los vectores $v, w \in \mathbb{C}^m$, en el espacio L_2 el producto interno discreto y la norma son

$$\langle w, v \rangle_2 = h \sum_{j=1}^m \bar{w}_j v_j, \quad \|v\|_2 = \sqrt{\langle v, v \rangle_2}.$$

Aplicando este producto a los modos de Fourier discretos, se tiene que

$$\langle \phi_l, \phi_k \rangle_2 = h \sum_{j=1}^m e^{2\pi i(l-k)x_j} = h \sum_{j=1}^m \rho^j, \quad \rho = e^{2\pi i(l-k)h}.$$

Si $k = l \bmod m$, entonces $\rho = 1$ y $\langle \phi_l, \phi_k \rangle_2 = 1$. De lo contrario,

$$\langle \phi_l, \phi_k \rangle_2 = h\rho \frac{1 - \rho^m}{1 - \rho} = 0 \text{ ya que } \rho^m = e^{2\pi i(l-k)} = 1.$$

Y los coeficientes de Fourier dados por el producto interno L_2 discreto son

$$\alpha_k = \langle v, \phi_k \rangle_2 = h \sum_{j=1}^m (\overline{\phi_k})_j v_j.$$

La demostración de esta última igualdad se basa en (2.4):

$$\alpha_k = \langle v, \phi_k \rangle_2 = \left\langle \sum_{j=1}^m \alpha_j \phi_j, \phi_k \right\rangle_2 = \sum_{j=1}^m \alpha_j \langle \phi_j, \phi_k \rangle_2 = \sum_{j=1}^m \alpha_j \delta_{jk} = \alpha_k,$$

siendo $\delta_{kk} = 1$ cuando $j = k$, mientras que $\delta_{jk} = 0$ para $j \neq k$ puesto que el producto $\langle \phi_j, \phi_k \rangle_2 = 0$ por ser ϕ_j y ϕ_k ortogonales.

Seguidamente, se considera el problema de valor inicial para un sistema de EDOs lineal

$$w'(t) = Aw(t) \quad \text{con} \quad w(0) = \sum_{k=1}^m \alpha_k \phi_k, \quad (2.5)$$

donde la matriz de coeficientes constantes A es de dimensión $m \times m$, real y circulante, que viene dada por

$$\begin{pmatrix} c_0 & c_1 & \cdot & \cdot & c_{m-1} \\ c_{m-1} & c_0 & c_1 & \cdot & c_{m-2} \\ \cdot & c_{m-1} & c_0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & c_1 \\ c_1 & c_2 & \cdot & c_{m-1} & c_0 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Las matrices circulantes son fruto de las discretizaciones en los problemas de EDPs con comportamientos periódicos y coeficientes constantes. Una peculiaridad es que cada modo discreto de Fourier ϕ_k es un autovector de A con su correspondiente autovalor

$$\lambda_k = \sum_{j=0}^{m-1} c_j e^{2\pi i k x_j}.$$

Asimismo, permite expresar la solución $w(t)$ del sistema (2.5) a través de la siguiente descomposición de Fourier discreta

$$w(t) = \sum_{k=1}^m \alpha_k e^{\lambda_k t} \phi_k. \quad (2.7)$$

2.2. Esquemas de Diferencias Finitas

2.2.1. Esquemas para Advección

Sea la ecuación de advección con coeficientes constantes

$$u_t + au_x = 0,$$

con condición de periodicidad espacial $u(x \pm 1, t) = u(x, t)$ y una función inicial $u(x, 0)$ dada. Si la derivada espacial se aproxima mediante la fórmula de diferencias finitas

$$\frac{1}{h}(u(x-h) - u(x)) = -u_x(x) + \mathcal{O}(h), \quad h = \frac{1}{m} \text{ y } h \rightarrow 0,$$

en consecuencia, la aproximación de la derivada temporal queda modelada bajo la siguiente discretización de advección conocida como esquema *upwind* -en el sentido de avance de las líneas características- de primer orden con $a > 0$ por razones de estabilidad:

$$w'_j(t) = \frac{a}{h}(w_{j-1}(t) - w_j(t)), \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (2.8)$$

con $w_0(t) = w_m(t)$ por motivos de periodicidad.

En el caso de que $a < 0$, el esquema *upwind* de primer orden queda de la forma

$$w'_j(t) = \frac{a}{h}(w_j(t) - w_{j+1}(t)), \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (2.9)$$

con $w_{m+1}(t) = w_1(t)$.

Además, en la línea de la sección anterior, se introduce el vector $w = (w_1, w_2, \dots, w_m)^T$ de tal forma que el sistema semidiscreto (2.8) puede reescribirse como $w'(t) = Aw(t)$ siendo A una matriz circulante debido a las condiciones de periodicidad espacial y coeficientes constantes. En esta ocasión, la matriz A viene dada por

$$A = \frac{a}{h} \begin{pmatrix} -1 & & & & 1 \\ & 1 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -1 \\ & & & & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Si del mismo modo se toma la fórmula de diferencias finitas de orden 2

$$\frac{1}{2h}(u(x-h) - u(x+h)) = -u_x(x) + \mathcal{O}(h^2), \quad h = \frac{1}{m} \text{ y } h \rightarrow 0,$$

se sigue entonces que la discretización de advección atiende al siguiente esquema central de segundo orden

$$w'_j(t) = \frac{a}{2h}(w_{j-1}(t) - w_{j+1}(t)), \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (2.11)$$

con $w_0(t) = w_m(t)$ y $w_{m+1}(t) = w_1(t)$ por la condición de periodicidad espacial.

De forma que, el sistema $w'(t) = Aw(t)$ correspondiente a la transcripción de (2.11) contiene, en este caso, la matriz circulante A de la forma

$$A = \frac{a}{2h} \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & 1 \\ 1 & 0 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 0 & -1 \\ -1 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Análisis de Fourier

Como se ha visto, los esquemas de advección *upwind* (2.8) y central (2.11) generan sistemas semidiscretos $w'(t) = Aw(t)$ con la matriz A de naturaleza circulante. Partiendo de un valor inicial de modo de Fourier discreto $w(0) = \phi_k$, la solución del sistema se puede expresar como

$$w(t) = e^{\lambda_k t} \phi_k$$

con λ_k el correspondiente autovalor de A . Bajo un análisis componente a componente, cada aproximación w_j se puede escribir tal que

$$w_j(t) = e^{\lambda_k t} e^{2\pi i k x_j}. \quad (2.13)$$

La sustitución de ϕ_k en el esquema *upwind* (2.8) conduce a los autovalores de la forma

$$\lambda_k = \frac{|a|}{h} (\cos(2\pi k h) - 1) - \frac{ia}{h} \sin(2\pi k h), \quad k = 1, \dots, m \quad (2.14)$$

y en el esquema de diferencias centrales se expresan como

$$\lambda_k = -\frac{ia}{h} \sin(2\pi k h), \quad k = 1, \dots, m. \quad (2.15)$$

2.2.2. Esquemas para Difusión

Considérese la ecuación de difusión con coeficientes constantes

$$u_t = du_{xx},$$

con $d > 0$ y condición de periodicidad espacial $u(x \pm 1, t) = u(x, t)$, nuevamente. Si la derivada espacial se aproxima mediante la fórmula de diferencias finitas

$$\frac{1}{h^2}(u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)) = u_{xx}(x) + \mathcal{O}(h^2),$$

se obtiene la discretización de difusión central de segundo orden

$$w'_j(t) = \frac{d}{h^2}(w_{j-1}(t) - 2w_j(t) + w_{j+1}(t)), \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (2.16)$$

con $w_0(t) = w_m(t)$ y $w_{m+1}(t) = w_1(t)$ por condición de periodicidad espacial.

Del mismo modo que para el problema de advección, se reescribe la discretización (2.16) como un sistema de EDOs $w'(t) = Aw(t)$ para $t \geq 0$ con un valor inicial $w(0)$ dado y una matriz A circulante y simétrica de la forma

$$A = \frac{d}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & 1 & -2 & 1 \\ 1 & & & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Debido a su simetría, la matriz A tiene autovalores reales. Este sistema semidiscreto representa la discretización espacial más simple para la ecuación de difusión lineal $u_t = du_{xx}$.

Análisis de Fourier

Se considera, de nuevo, el sistema semidiscreto $w'(t) = Aw(t)$ con el mismo modo de Fourier discreto como condición inicial $w(0) = \phi_k$ y la solución del sistema componente a componente (2.13):

$$w_j(t) = e^{\lambda_k t} e^{2\pi i k x_j},$$

siendo λ_k el autovalor de A , si se sustituye ϕ_k en la discretización de difusión central de segundo orden (2.16), se obtiene el siguiente autovalor real para cada k de la forma

$$\lambda_k = \frac{2d}{h^2}(\cos(2\pi kh) - 1) = -\frac{4d}{h^2} \sin^2(\pi kh), \quad k = 1, \dots, m. \quad (2.18)$$

2.2.3. Esquemas para Advección-Difusión

Sea el problema de advección-difusión con coeficientes constantes

$$u_t + au_x = du_{xx},$$

con $a \in \mathbb{R}$, $d > 0$ y condición de periodicidad en el espacio $u(x \pm 1, t) = u(x, t)$. Como se mencionó con anterioridad, las discretizaciones espaciales de dicho problema quedan determinadas por la combinación de las discretizaciones espaciales de los fenómenos por separado.

A través de la combinación de (2.11) y (2.16), la discretización espacial por diferencias centrales de segundo orden resulta de la forma

$$w'_j(t) = \left(\frac{d}{h^2} + \frac{a}{2h}\right)w_{j-1}(t) - \frac{2d}{h^2}w_j(t) + \left(\frac{d}{h^2} - \frac{a}{2h}\right)w_{j+1}(t), \quad (2.19)$$

donde $j = 1, 2, \dots, m$ y $w_0(t) = w_m(t)$, $w_{m+1}(t) = w_1(t)$ por motivos de periodicidad espacial. Asimismo, la combinación de la discretización de advección *upwind* de primer orden (2.8) junto con el mismo esquema de difusión (2.16) conduce a una fórmula similar exceptuando que el término d debe ser reemplazado por $d + \frac{1}{2}|a|h$.

2.2.4. Escalado Espacial

En cuanto a la longitud de los intervalos de periodicidad espacial, estos pueden diferir de longitud uno.

Sea el problema de advección-difusión

$$u_t + au_x = du_{xx},$$

con una condición de periodicidad espacial de intervalo de longitud arbitraria L , $u(x \pm L, t) = u(x, t)$. Entonces, si se establece que $\bar{x} = x/L$, la ecuación puede ser transformada en

$$u_t + \bar{a}u_x = \bar{d}u_{xx}, \quad u(\bar{x} \pm 1, t) = u(\bar{x}, t)$$

con coeficientes escalados $\bar{a} = a/L$ y $\bar{d} = d/L^2$. De manera similar, la discretización espacial de la ecuación en $[0, L]$ con $x_j = jh$, $j = 1, \dots, m$ y $h = L/m$ arroja el mismo resultado que la ecuación escalada con $\bar{x}_j = j\bar{h}$, $\bar{h} = h/L = 1/m$.

Convergencia de las Discretizaciones Espaciales

En esta sección, se abordarán las propiedades de estabilidad y consistencia de las discretizaciones espaciales en el marco general de la convergencia.

Por un lado, la consistencia de una discretización espacial hace referencia a la aproximación local de la EDP, en otras palabras, esta propiedad se encarga de comprobar si el esquema utilizado es razonable para aproximar la ecuación en cuestión. Por otro lado, la estabilidad consiste en asegurarse de que los esquemas no amplifiquen los errores iniciales de truncamiento durante su evolución temporal o, al menos, que no lo hagan de manera descontrolada a medida que el ancho del mallado espacial h y el paso temporal τ tienden a cero.

En esta sección, se comprobará que las propiedades de estabilidad y consistencia implican convergencia. Asimismo, por el Teorema de Lax, se sigue que, bajo la hipótesis de consistencia, la convergencia es equivalente a la estabilidad.

3.1. Estabilidad, Consistencia y Convergencia

Las discretizaciones espaciales realizadas en el capítulo (2) sobre las ecuaciones en derivadas parciales sujetas a las condiciones anteriores de periodicidad en el espacio y coeficientes constantes conducen a sistemas de EDOs semidiscretos en \mathbb{R}^m para $t \geq 0$ de la forma

$$w'(t) = F(t, w(t)) \tag{3.1}$$

donde, además, si se dispone de una función inicial $u(x, 0)$ dada y, en consecuencia, de un valor inicial $w(0) \in \mathbb{R}^m$, entonces se puede afirmar que (3.1) es un problema de valor inicial.

La solución numérica semidiscreta $w(t)$ de (3.1) está definida en la malla discreta Ω_h como una aproximación de la solución $u(x, t)$ de la EDP, la cual está

definida en $[0, 1] \times [0, T]$.

A continuación, se evaluará la precisión de dicha aproximación $w(t)$ a través del estudio de las propiedades de estabilidad, consistencia y convergencia. Para ello, es preciso considerar un nuevo término $u_h(t)$, que representa la solución exacta $u(x, t)$ sobre la malla y que juega un papel protagonista en las dos siguientes clases de errores:

Por un lado, el error de discretización espacial, que se formula a través de la expresión

$$\varepsilon(t) = u_h(t) - w(t) \quad (3.2)$$

y, como puede apreciarse, se refiere a la diferencia entre la solución exacta del problema EDP en la malla y la aproximación obtenida mediante la solución exacta de la ecuación diferencial obtenida de la discretización espacial. Claramente, obtener el valor de (3.2) precisa resolver el sistema ODE (3.1).

Por otro lado, el error de truncamiento espacial, que se expresa mediante la fórmula

$$\sigma_h(t) = u'_h(t) - F(t, u_h(t)), \quad (3.3)$$

se trata del residuo obtenido al sustituir la solución de la EDP en el esquema de diferencias. Asimismo, $\sigma_h(t)$ mide el error de discretización espacial (3.2), que resulta fácil de computar al ya disponer del esquema de diferencias.

El error de truncamiento espacial se determina mediante propiedades locales de $u(x, t)$ en el punto de tiempo t^1 . Por otra parte, el error de discretización espacial en este punto tiene un “historial temporal”; este depende de todos los errores de truncamiento $\sigma_h(s)$, $0 \leq s \leq t$. Por esta razón, el error de truncamiento también es conocido ocasionalmente como error espacial local y, de la misma forma, $\varepsilon(t)$ se denomina, a veces, error espacial global.

Seguidamente, se considerará una semidiscretización (3.1) en un intervalo de tiempo fijo $t \in [0, T]$ y la norma vectorial $\|\cdot\|$ adecuada en \mathbb{R}^m .

De modo que el esquema de diferencias se denominará *consistente* de orden q si, para $h \rightarrow 0$, se tiene que

$$\|\sigma_h(t)\| = \mathcal{O}(h^q) \text{ uniformemente para } 0 \leq t \leq T \text{ con } h \rightarrow 0. \quad (3.4)$$

¹ Con discretizaciones espaciales finitas, $\sigma_{h,j}(t)$ dependerá de valores $u(x_{j+k}, t)$, $|k| \leq K_0$, por tanto, en este sentido, $\sigma_h(t)$ es local en el espacio.

El proceso se reduce entonces a verificar si, cuando el paso del mallado tiende a cero, las soluciones regulares² del problema continuo son soluciones aproximadas del problema semidiscreto en la medida en que el error de truncamiento tiende a cero. Cuando esto es así con un error del orden de una potencia q del tamaño del mallado, se dice que el método es de orden q , como se sigue en (3.4).

Lo más habitual es comprobar la consistencia mediante el desarrollo de Taylor. Por lo general, las cotas para $\|\sigma_h(t)\|$ se encuentran fácilmente mediante este desarrollo, para lo cual se supone siempre que la solución de la EDP es suficientemente diferenciable.

Asimismo, el esquema de diferencias se dice *convergente* de orden p si

$$\|\varepsilon(t)\| = \mathcal{O}(h^p) \text{ para } 0 \leq t \leq T.$$

En cuanto a los problemas de valor inicial, los órdenes p y q suelen ser iguales. Con condiciones de contorno, puede darse el caso sorprendente de $p > q$.

A fin de estudiar la estabilidad, se restringirá esta propiedad al análisis del siguiente sistema semidiscreto lineal a partir de la EDO no homogénea

$$w'(t) = Aw(t) + g(t), \quad (3.5)$$

siendo A una matriz de dimensión $m \times m$ con elementos constantes y $g(t)$ puede tanto representar un término fuente en la EDP como emanar de condiciones de contorno. Considerando la secuencia de mallas Ω_h con $h = 1/m$, $m \in \mathbb{N}$, si $h \rightarrow 0$, esto significa que $m \rightarrow \infty$, lo que conlleva que la dimensión del sistema de EDOs semidiscreto se vuelve cada vez mayor en dimensión.

El sistema semidiscreto (3.5) se denomina *estable* si en todas las mallas Ω_h se sigue que

$$\|e^{tA}\| \leq Ke^{\omega t} \text{ para } 0 \leq t \leq T, \quad \forall h \rightarrow 0, \quad (3.6)$$

siendo las constantes $K \geq 1$ y $\omega \in \mathbb{R}$ independientes de h . No obstante, pueden depender de la solución del problema EDP o de sus derivadas parciales y se asume implícitamente que son de tamaño “moderado”.

Teorema 3.1. *Sea el sistema semidiscreto lineal (3.5) cumpliendo la condición de estabilidad (3.6). Asimismo, se supone consistencia de orden q , es decir,*

² Se entiende por solución regular a la hipótesis de soluciones con derivadas parciales sucesivas, tantas como se necesiten en el análisis y que pueden extenderse con continuidad hasta la frontera.

$\|\sigma_h(t)\| \leq Ch^q$ para $0 \leq t \leq T$, y $\|\varepsilon(0)\| \leq C_0h^q$ con constantes $C, C_0 > 0$. Entonces, el sistema es convergente de orden q con cotas de error

$$\|\varepsilon(t)\| \leq KC_0e^{\omega t}h^q + \frac{KC}{\omega}(e^{\omega t} - 1)h^q \text{ si } \omega \neq 0, 0 \leq t \leq T$$

y

$$\|\varepsilon(t)\| \leq KC_0h^q + KCth^q \text{ si } \omega = 0, 0 \leq t \leq T.$$

Demostración. Al restar $w(t)$ a $u_h(t)$ según las ecuaciones (3.1) y (3.3), se obtiene la siguiente ecuación del error global

$$\varepsilon'(t) = A\varepsilon(t) + \sigma_h(t). \quad (3.7)$$

A parte, sea la fórmula de variación de constantes para la solución de problemas no homogéneos como (3.5) de la forma

$$w(t) = e^{tA}w(0) + \int_0^t e^{(t-s)A}g(s)ds. \quad (3.8)$$

Entonces, la solución para (3.7) aplicando la fórmula (3.8) viene dada por

$$\varepsilon(t) = e^{tA}\varepsilon(0) + \int_0^t e^{(t-s)A}\sigma_h(s)ds.$$

De modo que,

$$\|\varepsilon(t)\| \leq \|e^{tA}\|\|\varepsilon(0)\| + \int_0^t \|e^{(t-s)A}\|ds \max_{0 \leq s \leq t} \|\sigma_h(s)\|.$$

Y utilizando la suposición de estabilidad (3.6) se sigue las cotas de errores del Teorema. \square

El Teorema 3.1 es válido en cualquier intervalo de tiempo dado $[0, T]$ con $T > 0$ fijo y, en principio, T debe ser finito para que la cota del error global tenga sentido. Por otra parte, el análisis del signo de la constante ω arroja las siguientes situaciones: si $\omega < 0$, la cota también es válida para $T = \infty$, lo cual indica que para todos los tiempos, el error se mantendrá aproximadamente del mismo tamaño en el sentido de que este último estará determinado principalmente por el error local; si $\omega = 0$, la cota predice un crecimiento lineal del error en el tiempo; y si $\omega > 0$, la cota incluso pronostica un crecimiento exponencial.

La elección de la norma vectorial resulta bastante relevante. Esta norma debe ser razonable en el sentido de que las cotas de error del Teorema 3.1 sean útiles para evaluar la calidad de la discretización. Aquí se considerarán las normas discretas en el espacio L_p con $p = 1, 2$ o ∞ ³.

³ Estas normas se encuentran en la sección (A.2) del apéndice.

En general, la verificación de la condición de estabilidad suele ser el paso más difícil en el análisis de discretización. Para obtener una cota de error correcta es importante encontrar una estimación para ω lo más pequeña posible.

A continuación, se presentan los siguientes resultados del Teorema 3.1 aplicando la norma L_2 para las discretizaciones más importantes de advección y difusión

- Los esquemas de advección *upwind* de primer orden (2.8) y (2.9) son convergentes de orden 1 para $u_t + au_x = 0$.
- El esquema de advección central de segundo orden (2.11) es convergente de orden 2 para $u_t + au_x = 0$.
- El esquema de difusión central de segundo orden (2.16) es convergente de orden 2 para $u_t = du_{xx}$.

Integraciones Temporales

Hasta ahora, solo han sido estudiadas las discretizaciones espaciales, las cuales se ha visto que conducen a sistemas semidiscretos de EDO. Una vez que se garantiza la efectividad de una discretización espacial -por medio de un análisis de convergencia a medida que el paso del mallado espacial tiende a cero, como se ha discutido en el capítulo (3)-, se abre camino al siguiente paso en el proceso de obtención de aproximaciones numéricas para las EDPs: la aplicación de las integraciones temporales. El proceso completo de discretización realizado de este modo es lo que se conoce como Método de Líneas (MOL).

En este contexto, las integraciones temporales se basan en métodos numéricos para la discretización de la variable tiempo en un número finito de pasos con objeto de resolver dichos sistemas de EDO que resultan complicados de computar desde un punto de vista analítico. En esencia, las integraciones temporales avanzan desde un estado inicial conocido del sistema y describen la evolución del mismo mediante pequeños incrementos de tiempo, arrojando, durante el proceso, aproximaciones numéricas para cada nodo temporal. Esto se logra empleando esquemas numéricos que actualizan el estado del sistema en cada paso de tiempo. Aunque existe una gran variedad de métodos numéricos para la integración temporal, este trabajo se centrará, sobre todo, en los denominados θ -métodos por su simplicidad y porque proporcionan aproximaciones razonables.

Habiendo motivado ya la necesidad de proceder al desarrollo de integraciones temporales para la resolución de las EDPs, se presenta, a continuación, el Método de Líneas.

4.1. Métodos de Líneas (MOL)

Grosso modo, los métodos de líneas son técnicas para la resolución de EDPs que empiezan por la elección de la discretización espacial para el problema, de

forma que se transforme en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, para luego, resolverlo utilizando métodos numéricos adecuados de EDO. La popularidad de este enfoque se debe principalmente al hecho de que es fácil combinar varias discretizaciones para los términos de advección, difusión y reacción. Otro punto práctico y atractivo es que en la actualidad existen muchos métodos de EDO bien desarrollados y *software* sofisticados disponibles de forma gratuita para estos métodos.

Del mismo modo que en los capítulos precedentes, se considera la discretización en el espacio de un problema de EDP con solución $u(x, t)$, posiblemente sujeta a condiciones de contorno, en una cierta malla Ω_h con ancho de malla $h > 0$, que conduce al siguiente sistema de EDO semidiscreto

$$w'(t) = F(t, w(t)), \quad 0 < t \leq T, \quad \text{con } w(0) \text{ dado}, \quad (4.1)$$

donde $w(t) = (w_j(t))_{j=1}^m \in \mathbb{R}^m$, siendo m proporcional al número de puntos de la malla espacial. Se supone, además, que las condiciones de contorno discretizadas están contenidas en F .

Según el enfoque del MOL, las aproximaciones totalmente discretas $w_j^n \approx u(x_j, t_n)$ se obtienen aplicando algún método adecuado de EDO con un tamaño de paso $\tau > 0$ constante para los niveles de tiempo $t_n = n\tau$ con $n = 0, 1, 2, \dots$. Una clase popular dentro de los métodos de líneas son los conocidos como θ -métodos, cuya fórmula general atiende a la siguiente expresión

$$w_{n+1} = w_n + \tau(1 - \theta)F(t_n, w_n) + \tau\theta F(t_{n+1}, w_{n+1}) \quad (4.2)$$

con $\theta \in [0, 1]$, este parámetro controla la ponderación entre los términos explícitos e implícitos en la formulación del método y su valor dependerá de las propiedades del problema y de los requisitos de estabilidad y precisión numérica. De forma que, para $\theta = 0$, el método se vuelve completamente explícito siendo el método de Euler, donde la solución en el siguiente paso de tiempo se computa completamente a partir de la solución actual y los términos ya conocidos, de manera que (4.2) ahora se reformula como

$$w_{n+1} = w_n + \tau F(t_n, w_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.3)$$

Este método puede considerarse como el truncamiento de la serie de Taylor

$$w(t_{n+1}) = w(t_n) + \tau w'(t_n) + \frac{\tau^2}{2} w''(t_n + \eta t), \quad \eta \in (0, 1),$$

después del término de la primera derivada. Como avance, este método de Euler converge a la solución exacta en cualquier intervalo de tiempo acotado $[0, T]$ si

F satisface la condición de *Lipschitz* en los siguientes términos:

Sea $\|\cdot\|$ una norma vectorial en \mathbb{R}^m y un intervalo de tiempo $[0, T]$. Para $K_0 > 0$, se considera el cilindro C_0 dado por:

$$C_0 = \{(t, v) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m : 0 \leq t \leq T, \|v - w_0\| \leq K_0\},$$

y se toma la condición

$$\|F(t, \tilde{v}) - F(t, v)\| \leq L\|\tilde{v} - v\| \quad \text{para todo } (t, \tilde{v}), (t, v) \in C_0. \quad (4.4)$$

El término L en (4.4) se refiere a la constante de *Lipschitz*. Si F es continua en C_0 , entonces (4.1) tiene solución única en algún intervalo $[0, T^*]$ con $T^* > 0$.

Retomando el estudio de los valores de θ , con $\theta = 1$, el método presenta un carácter totalmente implícito siendo el método de Euler regresivo -*Backward Euler*-, donde la solución en el siguiente paso de tiempo se obtiene resolviendo una ecuación implícita que involucra la solución en el paso de tiempo actual y los términos futuros.

Por último, para $0 < \theta < 1$, los métodos combinan características explícitas e implícitas, ya que w_{n+1} se obtiene mediante una relación algebraica que atiende a las aproximaciones ya conocidas y las futuras. Una de las opciones más notables es el caso de $\theta = 1/2$, conocido como regla trapezoidal¹. Estos métodos pueden tener una buena estabilidad numérica y precisión más adecuada en comparación con los completamente explícitos o implícitos, dependiendo de la naturaleza del problema y los términos dominantes en la EDP discretizada.

Asimismo, debido a sus caracteres implícitos, la regla trapezoidal y el método de Euler regresivo resultan más costosos de manejar que el método de Euler. Sin embargo, para problemas estables con constantes de *Lipschitz* grandes, los implícitos ofrecen ventajas referentes a la estabilidad muy importantes.

En resumen, los θ -métodos combinan la discretización espacial con una discretización temporal para aproximar la solución de la EDP en pasos de tiempo sucesivos.

4.1.1. Discretizaciones Espacio-Temporales Directas

De ahora en adelante, es preciso mencionar que $w_n = (w_j^n)_{j=1}^m \in \mathbb{R}^m$ denotará el vector que contiene la solución numérica completamente discreta en el

¹ Por analogía con la regla del trapecio de cuadratura para integrales.

nivel de tiempo $t = t_n$.

Las integraciones temporales para los esquemas de diferencias finitas para ecuaciones lineales pueden reescribirse como esquemas de dos niveles de la forma

$$B_0 w_{n+1} = B_1 w_n + G(t_n, t_{n+1}), \quad n = 0, 1, \dots, \quad (4.5)$$

resultando una combinación de discretizaciones espaciales y temporales para un problema de valor inicial y de contorno para una EDP lineal con coeficientes constantes. Estos esquemas son de gran utilidad a la hora de analizar la estabilidad y la consistencia como se podrá ver más adelante.

Las matrices $B_0, B_1 \in \mathbb{R}^{m \times m}$ y el término no homogéneo $G(t_n, t_{n+1}) \in \mathbb{R}^m$ dependen del tamaño de malla h y del paso temporal τ . Como nota, si el esquema es explícito, B_0 es el operador identidad. De lo contrario, B_0 debe “invertirse” para encontrar w_{n+1} asumiendo entonces que B_0 no es singular.

A modo de ejemplo, al aplicar el θ -método (4.2) a un sistema semidiscreto lineal $w'(t) = Aw(t) + g(t)$, se tiene que

$$w_{n+1} = w_n + (1 - \theta)\tau(Aw_n + g(t_n)) + \theta\tau(Aw_{n+1} + g(t_{n+1})),$$

que en forma de esquema de dos niveles (4.5), cada término resulta como

$$\begin{aligned} B_0 &= I - \theta\tau A, & B_1 &= I + (1 - \theta)\tau A, \\ G(t_n, t_{n+1}) &= (1 - \theta)\tau g(t_n) + \theta\tau g(t_{n+1}). \end{aligned}$$

4.2. Estabilidad, Consistencia y Convergencia

De la misma forma con la que se procedió para las discretizaciones exclusivamente espaciales, se examinarán ahora los errores globales y de truncamiento, pero, en este caso, desde un punto de vista espacio-temporal debido al carácter de la discretización que se maneja. De modo que, por un lado, se presenta el error de truncamiento ρ_n para el esquema (4.5) en el tiempo $t = t_n$ mediante la relación

$$B_0 u_h(t_{n+1}) = B_1 u_h(t_n) + G(t_n, t_{n+1}) + \tau \rho_n, \quad (4.6)$$

donde $\tau \rho_n$ se refiere al residuo que arroja el sistema cuando se integra a partir de la solución exacta de la EDP. En este sentido, al evaluar este término, se es capaz de medir cuán efectivo es el esquema a la hora de generar aproximaciones.

Por otro lado, el error global, que se formula a través de

$$\varepsilon_n = u_h(t_n) - w_n. \quad (4.7)$$

Como puede apreciarse, se refiere a la diferencia entre la solución exacta y la aproximación obtenida mediante la discretización espacio-temporal, en otras palabras, se trata de la resta de (4.6) menos (4.5). Y este error satisface la igualdad

$$B_0\varepsilon_{n+1} = B_1\varepsilon_n + \tau\rho_n,$$

que se puede reescribir como la relación de recurrencia

$$\varepsilon_{n+1} = B\varepsilon_n + \delta_n \quad (4.8)$$

con un operador de amplificación

$$B = B_0^{-1}B_1$$

y el error local de discretización espacio-temporal

$$\delta_n = \tau B_0^{-1}\rho_n. \quad (4.9)$$

A fin de evitar posibles confusiones, es preciso enfatizar la sutil diferencia entre el error de truncamiento y el local. Mientras que el error de truncamiento se trata de un residuo, el error local cometido en un paso parte de la solución exacta, de modo que se obtiene de (4.8), $\varepsilon_n = 0$.

En la ecuación (4.8), el valor de ε_{n+1} está expresado en términos de valores anteriores provocando una relación de recurrencia. Si se resuelve la fórmula, se obtiene la expresión familiar del error global para esquemas de un paso o de dos niveles

$$\varepsilon_n = B^n\varepsilon_0 + B^{n-1}\delta_0 + \dots + B\delta_{n-2} + \delta_{n-1},$$

que suma todos los errores locales previamente cometidos, ponderados con potencias de B , al error global en el nivel de tiempo actual.

En consecuencia, técnicas y razonamientos similares pueden ser usados para estudiar la convergencia a través del Teorema de Lax

$$\textit{estabilidad y consistencia} \implies \textit{convergencia}.$$

Sea un intervalo de tiempo $[0, T]$, un análisis de convergencia implica evaluar los errores globales ε_n para todo $n \geq 0$, cuando $\tau \rightarrow 0$ tal que $t_n = n\tau \leq T$ y, además, $h \rightarrow 0$. A menudo, se asume una cierta dependencia de τ en h *a priori*, de modo que $\tau = \tau_h$.

El esquema de dos niveles (4.5) se dice *estable* si para una constante positiva K de tamaño moderado e independiente de τ y h , se tiene que

$$\|B^n\| \leq K \quad n \geq 0, \quad n\tau \leq T. \quad (4.10)$$

La estabilidad generalmente dependerá de la relación entre h y $\tau = \tau_h$.

La consistencia puede ser definida a través del error de truncamiento ρ_n . Una suposición natural es la siguiente

$$\|B_0^{-1}\| \leq C,$$

siendo C una constante independiente de τ y h . La existencia y acotación de la inversa implica que el esquema tiene una única solución numéricamente bien definida. En consecuencia, se tiene que

$$\|\delta_n\| \leq C\tau\|\rho_n\|.$$

El esquema de dos niveles (4.5) se dice *consistente* si $\|\rho_n\| \rightarrow 0$, para $\tau, h \rightarrow 0$, posiblemente con diferentes órdenes en el tiempo y en el espacio. Al combinar todo esto, se obtiene la siguiente estimación del error global de la forma

$$\|\varepsilon_n\| \leq K\|\varepsilon_0\| + K \sum_{k=0}^{n-1} \|\delta_k\| \leq K\|\varepsilon_0\| + KCt_n \max_{0 \leq k \leq n-1} \|\rho_k\|,$$

probando la convergencia para $t_n \in [0, T]$ a partir de la estabilidad y la consistencia. En general, la consistencia se encuentra fácilmente mediante expansiones de Taylor.

4.3. Estabilidad de θ -Métodos

Un método es considerado estable si pequeñas perturbaciones no dan lugar a errores numéricos significativos que además se amplifiquen a medida que se avanza en el tiempo.

Con objeto de comprender las propiedades de estabilidad de los θ -métodos, se considera, a continuación, un problema de valor inicial (4.1) para un sistema EDO lineal

$$w'(t) = Aw(t) + g(t), \quad t > 0 \quad (4.11)$$

con $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ y un término fuente continuo $g : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^m$. Asimismo, se cumple la condición de *Lipschitz* (4.4) con $L = \|A\|$ y siendo el cilindro C_0 todo $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^m$. En consecuencia, para cualquier valor inicial dado $w(0) = w_0 \in \mathbb{R}^m$, existe una única solución en el intervalo $[0, \infty)$.

Si se asume que A es diagonalizable de la forma $A = S \Lambda S^{-1}$ con $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$, entonces el comportamiento del θ -método está relacionado con el comportamiento sobre el problema test escalar

$$w'(t) = \lambda w(t) \quad \text{con } \lambda \in \mathbb{C}.$$

La aplicación del θ -método sobre esta ecuación de prueba arroja las aproximaciones

$$w_{n+1} = R(\tau\lambda)w_n \quad \text{con } R(z) = \frac{1 + (1 - \theta)z}{1 - \theta z}. \quad (4.12)$$

Si el dato inicial w_0 sufre una perturbación a \tilde{w}_0 , se obtiene la recursión

$$\tilde{w}_{n+1} = R(\tau\lambda)\tilde{w}_n$$

para la secuencia perturbada \tilde{w}_n con $n \geq 0$. Del mismo modo, para las diferencias $\tilde{w}_n - w_n$ se produce la misma expresión de recurrencia, revelando que $R(\tau\lambda)$ determina cómo se desarrolla la perturbación inicial a medida que evoluciona el tiempo. Por lo tanto, R es lo que se conoce como la *función de estabilidad* del método. Cerca de $z = 0$, se tiene que

$$R(z) = 1 + z + \theta z^2 + \mathcal{O}(z^3),$$

en consecuencia,

$$R(z) = e^z + \mathcal{O}(z^{p+1}), \quad z \rightarrow 0$$

con $p = 2$ si $\theta = 1/2$ y $p = 1$ para el resto de valores de θ .

Por otra parte, la *región de estabilidad* del método se expresa mediante el conjunto \mathcal{S} en el plano complejo de la forma

$$\mathcal{S} = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| \leq 1\}.$$

Un método de EDO se llama *A-estable* si su región de estabilidad \mathcal{S} contiene al semiplano izquierdo $\mathbb{C}^- = \{z \in \mathbb{C} : \text{Re } z \leq 0\}$. La *A-estabilidad* es importante para los problemas rígidos, en inglés conocidos comúnmente como *stiff problems*. Los θ -métodos con $\theta \geq 1/2$ son *A-estables*. Precisamente, si $\theta = 1/2$, entonces \mathcal{S} es el semiplano izquierdo cerrado \mathbb{C}^- .

Con todo esto, si $\tau\lambda \in \mathcal{S}$ para todo $\lambda = \lambda_k$ con $k = 1, 2, \dots, m$, entonces la recursión (4.12) presenta estabilidad. En consecuencia, si $\text{Re } \lambda \in \mathbb{C}^-$ y el método es *A-estable*, existe *estabilidad incondicional*, en otras palabras, estabilidad sin ninguna condición sobre el tamaño de paso τ ; de modo que, los θ -métodos para $\theta \geq 1/2$ no precisan de dichas restricciones al ser *A-estables*.

4.4. Estabilidad de MOL - Regiones de Estabilidad

En esta sección, se abordarán algunas consideraciones sobre la estabilidad de MOL para problemas lineales (4.1) de la forma

$$F(t, v) = Av + g(t),$$

siendo A un operador de advección-difusión discretizado. Dado que la estabilidad se refiere a la diferencia de dos soluciones, puede ignorarse el término $g(t)$ no homogéneo. La aplicación del θ -método arroja, como en la sección anterior, la relación de recurrencia

$$w_{n+1} = R(\tau A)w_n, \quad (4.13)$$

donde R es la función de estabilidad. Cualquier restricción de τ en términos de h debe ser obtenida a través de la función de estabilidad y las propiedades de A .

Sea A una matriz normal -las matrices circulantes son normales-, λ_k el k -ésimo autovalor de A y \mathcal{S} la región de estabilidad. Debido a la normalidad de A , en la norma L_2 se sigue que

$$\|R(\tau A)^n\|_2 = \max_{1 \leq k \leq m} |R(\tau \lambda_k)^n|,$$

de modo que se dará la estabilidad si se cumple el siguiente *criterio de autovalores*

$$\tau \lambda_k \in \mathcal{S} \text{ para todo } k. \quad (4.14)$$

Realmente, este criterio es un poco más estricto de lo necesario puesto que implica que

$$\|R(\tau A)^n\|_2 \leq K \quad \text{para } n \geq 0, \quad n\tau \leq T$$

con $K = 1$. En realidad, para la estabilidad es suficiente con tener una constante positiva K de tamaño moderado e independiente de n y h . Si se considera un intervalo de tiempo fijo $[0, T]$, esto se cumple para el criterio de autovalores siguiente

$$|R(\tau \lambda_k)| \leq 1 + K'\tau \quad \text{con } K' > 0.$$

Hablando en términos generales, esto conlleva que se consienta que λ_k se encuentre a una distancia $\mathcal{O}(\tau)$ fuera de \mathcal{S} .

La siguiente tabla enumera las restricciones de tamaño de paso τ en base al criterio de autovalores (4.14) para los θ -métodos con las discretizaciones espaciales del capítulo (2) para las ecuaciones de advección y difusión. Los autovalores λ_k están dados en (2.14), (2.15) y (2.18).

Para $\theta \geq 1/2$ ya se explicó que no existen restricciones en el tamaño de paso. Para $\theta < 1/2$, la región de estabilidad \mathcal{S} es el siguiente disco cerrado

$$\mathcal{S} = \{z \in \mathbb{C} : |z + \alpha| \leq \alpha\} \quad \text{con} \quad \alpha = \frac{1}{1 - 2\theta}.$$

Con este disco acotado aparecen restricciones, dándose solo *estabilidad condicional*. Además, para la advección central incluso existe inestabilidad para todo $\tau > 0$ debido a que el disco no tiene intersección con el eje imaginario y todos los autovalores de la discretización de advección central son puramente imaginarios como se puede apreciar en (2.15).

Discretización	$\theta < \frac{1}{2}$	$\theta \geq \frac{1}{2}$
Advección <i>Upwind</i> (2.8) y (2.9)	$ a \tau/h \leq 1/(1 - 2\theta)$	$\tau \leq \infty$
Advección Central (2.11)	inestabilidad	$\tau \leq \infty$
Difusión Central (2.16)	$d\tau/h^2 \leq 1/(2 - 4\theta)$	$\tau \leq \infty$

Tabla 4.1. Restricciones del tamaño de paso τ para el criterio del autovalor (4.14).

Propiedades de Monotonicidad

En ocasiones, los métodos numéricos aplicados sobre las EDOs que describen reacciones químicas pueden experimentar inestabilidades a causa de que generan valores negativos en las concentraciones de las especies. Por otra parte, debido a que en muchas discretizaciones espaciales de EDPs donde aparecen términos de reacción pueden producirse sistemas de EDOs con soluciones negativas, las cuales son imposibles en la práctica, es preciso realizar un análisis sobre la positividad. En esta sección, se examinarán los sistemas de EDO con el objetivo de identificar aquellos sistemas en los que se puedan esperar estos indeseables resultados y se indicará cómo puede evitarse esto.

5.1. Positividad

Para las ecuaciones de advección-difusión-reacción cuyas soluciones son concentraciones de especies químicas, se tiene que

$$u(x, 0) \geq 0 \text{ para todo } x \implies u(x, t) \geq 0 \text{ para todo } x \text{ y } t > 0.$$

Como no hay garantía de que las discretizaciones espaciales mantengan esta propiedad, a continuación, se pretende buscar un criterio que indique cuándo se conserva la positividad -en realidad, no negatividad-.

En lo siguiente, se considera $v \geq 0$ un vector $v \in \mathbb{R}^m$ con todas sus componentes no negativas y un sistema de EDO en \mathbb{R}^m para $t \geq 0$ de la forma

$$w'(t) = F(t, w(t)). \tag{5.1}$$

Este sistema se dice *positivo* -como abreviación de no negativo- si

$$w(0) \geq 0 \implies w(t) \geq 0 \text{ para todo } t > 0.$$

El siguiente teorema proporciona un criterio sencillo sobre F que esclarece si el sistema es positivo.

Teorema 5.1. *Sea $F(t, v)$ un sistema continuo que satisface la condición de Lipschitz (4.4) con respecto de v , entonces el sistema (5.1) es positivo si y solo si para cualquier vector $v \in \mathbb{R}^m$ y para todo $i = 1, \dots, m$ se sigue que*

$$v \geq 0, \quad v_i = 0 \implies F_i(t, v) \geq 0 \quad \text{con } t \geq 0.$$

Demostración. Por un lado, para “ \implies ”. Supóngase que $v \geq 0$, $v_i = 0$ y $F_i(t_0, v) < 0$. Asimismo, por el método de Euler se tiene que

$$w_i(t_0 + \varepsilon : t_0, v) = v_i + \varepsilon F_i(t_0, v) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) < 0.$$

Esto contradice la positividad de $w(t)$. □

Por otro lado, para “ \impliedby ”. Considérese

$$\begin{aligned} w'_\varepsilon(t) &= F(t, w_\varepsilon) + \varepsilon \cdot I, \\ w_\varepsilon(0) &= v \geq 0 \quad \text{para } t \in [0, T]. \end{aligned}$$

Además, cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, $w_\varepsilon(t) = w(t)$. De modo que

$$\begin{aligned} w'(t) &= F(t, w), \\ w(0) &= v \geq 0 \quad \text{para } t \in [0, T]. \end{aligned}$$

Se quiere probar que $w_\varepsilon(t) > 0$ para todo t . De lo contrario, existe un primer $t_0 > 0$ tal que $w_{\varepsilon,i}(t_0) = 0$. En ese caso, $w'_{\varepsilon,i}(t_0) \leq 0$ ya que $w_{\varepsilon,i}(t_0 - \delta) \geq 0$ para $0 < \delta \ll 1$. No obstante,

$$w'_{\varepsilon,i}(t_0) = F_i(t_0, w_{\varepsilon,i}(t_0)) + \varepsilon \cdot I > 0.$$

Por tanto, esto es una contradicción. □

Teorema 5.2. *El sistema lineal $w'(t) = Aw(t)$ es positivo si y solo si*

$$a_{ij} \geq 0 \quad \text{para todo } j \neq i.$$

Demostración. Esto es una consecuencia del Teorema 5.1. Una prueba directa para los sistemas lineales se deduce de la relación

$$e^{\tau A} = I + \tau A + \mathcal{O}(\tau^2)$$

para mostrar la necesidad. Y

$$e^{t_n A} = \lim_{n \rightarrow 0} (I + \tau A)^n \quad \text{con } t_n = n\tau \text{ fijo}$$

para mostrar la suficiencia. Por tanto, la suficiencia se concluye a partir de la convergencia del método de Euler. □

5.2. Esquemas de Advección-Difusión Espacial Positivos

Sea la ecuación de advección-difusión con coeficiente variable

$$u_t + (a(x, t)u)_x = (d(x, t)u_x)_x,$$

con $d(x, t) > 0$ y se asume periodicidad espacial. La discretización central de segundo orden en forma de flujo se expresa como

$$w'_j = \frac{1}{2h} \left(a_{j-\frac{1}{2}}(w_{j-1} + w_j) - a_{j+\frac{1}{2}}(w_j + w_{j+1}) \right) + \frac{1}{h^2} \left(d_{j-\frac{1}{2}}(w_{j-1} - w_j) - d_{j+\frac{1}{2}}(w_j - w_{j+1}) \right),$$

para $j = 1, \dots, m$ donde $w_j = w_j(t)$, $w_0 = w_m$, $w_{m+1} = w_1$ y

$$a_{j\pm\frac{1}{2}} = a(x_{j\pm\frac{1}{2}}, t), \quad d_{j\pm\frac{1}{2}} = d(x_{j\pm\frac{1}{2}}, t).$$

Atendiendo al Teorema 5.1 y después de un cálculo elemental, se sigue que esta discretización es positiva si y solo si los números de celda de Péclet ah/d satisfacen la desigualdad siguiente

$$\max_{x,t} \frac{|a(x, t)|h}{d(x, t)} \leq 2.$$

Otra opción, si se discretiza la parte de advección aplicando un esquema *upwind* de primer orden en forma de flujo y la parte de difusión se mantiene como antes, se obtiene que

$$w'_j = \frac{1}{h} \left(a_{j-\frac{1}{2}}^+ w_{j-1} + (a_{j-\frac{1}{2}}^- - a_{j+\frac{1}{2}}^+) w_j - a_{j+\frac{1}{2}}^- w_{j+1} \right) + \frac{1}{h^2} \left(d_{j-\frac{1}{2}}(w_{j-1} - w_j) - d_{j+\frac{1}{2}}(w_j - w_{j+1}) \right),$$

donde $a^+ = \max(a, 0)$ y $a^- = \min(a, 0)$. Este sistema semidiscreto es positivo sin la restricción en el número de Péclet.

5.3. Métodos de Pasos de Tiempo Positivos

Considérese un sistema semidiscreto lineal $w'(t) = Aw(t)$ donde A satisface lo siguiente

$$a_{ij} \geq 0 \text{ para } i \neq j \quad \text{y} \quad a_{ii} \geq -\alpha \text{ para todo } i, \quad (5.2)$$

con $\alpha > 0$ un número fijo. Por el Teorema 5.2, la positividad de este sistema está garantizada independientemente del valor de α . Naturalmente, lo lógico sería querer mantener esta positividad cuando la integración temporal se realice. Sin embargo, garantizar esto para cualquier vector inicial $w(0) \geq 0$ es mucho

más restrictivo para el tamaño de paso τ que en el estudio que se realizó anteriormente para analizar la estabilidad de los sistemas de EDOs.

A continuación, se consideran los métodos de Euler y Euler regresivo. Por un lado, aplicando el método de Euler a un sistema lineal se obtiene que

$$w_{n+1} = (I + \tau A)w_n,$$

donde $I + \tau A \geq 0$ siempre y cuando suceda que $1 + \tau a_{ii} \geq 0$ para todo i . Esto se cumplirá si el tamaño de paso está restringido de tal manera que $\alpha\tau \leq 1$.

Por otro lado, el método de Euler regresivo proporciona la siguiente recurrencia

$$w_{n+1} = (I - \tau A)^{-1}w_n.$$

Supóngase que

$$A \text{ no tiene autovalores en el eje positivo real.} \quad (5.3)$$

Entonces, $I - \tau A$ es invertible para todo $\tau > 0$, de modo que esta relación implícita por el método regresivo presenta una única solución. Es más, esta solución es positiva debido a que las condiciones (5.2) y (5.3) conllevan que

$$(I - \tau A)^{-1} \geq 0 \quad \text{para todo } \tau > 0.$$

Con estas conclusiones para los métodos de Euler y Euler regresivo, los resultados de positividad para los θ -métodos

$$w_{n+1} = w_n + (1 - \theta)\tau Aw_n + \theta\tau Aw_{n+1} \quad (5.4)$$

se obtienen también de forma inmediata, puesto que son una combinación de Euler con tamaño de paso $(1 - \theta)\tau$ y Euler regresivo con $\theta\tau$.

Lema 5.3. *La positividad para (5.4) está asegurada si τ está restringido de forma que*

$$\alpha\tau \leq \frac{1}{1 - \theta}.$$

Demostración. Considerando (5.4), si se aglutinan los términos w_{n+1} a un lado de la igualdad, se tiene que

$$(I - \theta\tau A)w_{n+1} = w_n + (1 - \theta)\tau Aw_n.$$

Despejando de nuevo w_{n+1} , se toma la inversa $(I - \theta\tau A)^{-1}$

$$\begin{aligned} w_{n+1} &= (I - \theta\tau A)^{-1}w_n + (I - \theta\tau A)^{-1}(1 - \theta)\tau Aw_n. \\ w_{n+1} &= ((I - \theta\tau A)^{-1} + (I - \theta\tau A)^{-1}(1 - \theta)\tau A)w_n. \end{aligned}$$

De modo que, si se busca que $w_{n+1} > 0$ para todo n , entonces

$$(I - \theta\tau A)^{-1} + (I - \theta\tau A)^{-1}(1 - \theta)\tau A > 0$$

$$(I - \theta\tau A)^{-1}(1 + (1 - \theta)\tau A) > 0$$

Sabiendo que $(I - \theta\tau A)^{-1} > 0$, solo queda probar que $(1 + (1 - \theta)\tau A) > 0$. Por la condición (5.2), se dan dos posibilidades según los elementos de la matriz A

$$1 + (1 - \theta)\tau a_{ij} > 0 \quad \text{para todo } i \neq j,$$

$$1 + (1 - \theta)\tau a_{ii} > 1 - (1 - \theta)\tau\alpha > 0 \quad \text{para todo } i.$$

Luego, mediante la última desigualdad, queda demostrada la restricción de tamaño de paso. \square

En otras palabras, para la función de estabilidad

$$R(z) = \frac{1 + (1 - \theta)z}{1 - \theta z}$$

del θ -método, se sigue que

$$R(\tau A) \geq 0 \quad \text{si} \quad \alpha\tau \leq \frac{1}{1 - \theta}.$$

Como nota, para sistemas lineales con un término fuente no negativo de la forma

$$w'(t) = Aw(t) + g(t)$$

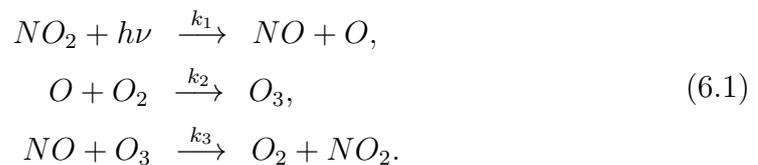
con A satisfaciendo la condición (5.2), las conclusiones anteriores para los métodos de Euler y θ -métodos se mantienen sin cambios.

Modelos y Ejemplos Numéricos

6.1. Sistema EDO Rígido para Química Atmosférica

En la rama de estudio de la química atmosférica, se consideran reacciones químicas donde participan gases traza como pueden ser el ozono o el metano, entre otros. En la actualidad, un problema latente y alarmante es la contaminación del aire debido a las emisiones producidas por el factor humano. Los niveles de ozono en la troposfera son motivo de especial preocupación ya que el ozono es una sustancia perjudicial para los seres humanos. Como nota, el ozono en sí no se emite, sino que es formado tras diversas reacciones químicas.

A continuación, se adjunta un ejemplo de reacciones fundamentales en cualquier modelo de contaminación del aire en la troposfera. Aquí entrará en juego la Ley de Conservación de la Materia mediante tres reacciones en las que interactúan el oxígeno O_2 , el oxígeno atómico O , el monóxido de nitrógeno NO y dióxido de nitrógeno NO_2 de la forma:



Los coeficientes k_j con $j = 1, 2, 3$ hacen alusión a las constantes de velocidad de reacción, que pueden depender del tiempo debido a factores externos como la temperatura o la luz solar -es el caso de k_1 -. La primera reacción es de carácter fotoquímico y señala que NO y O son formados por NO_2 mediante la fotodisociación causada por la radiación solar medida por $h\nu$. Esto depende de la hora del día a través de la expresión $k_1 = k_1(t)$.

Seguidamente, se consideran las concentraciones $u_1 = [O]$, $u_2 = [NO]$, $u_3 = [NO_2]$ y $u_4 = [O_3]$, donde la concentración $[O_2]$ se tomará como una

constante y se asumirá un término fuente constante σ_2 que simula la emisión de monóxido de nitrógeno. Atendiendo a la Ley de Acción de Masas de la cinética química, las funciones de velocidad son proporcionales al producto de todas las concentraciones en el lado izquierdo de la reacción:

$$g(t, u) = \begin{pmatrix} k_1(t)u_3 \\ k_2u_1 \\ k_3u_2u_4 \end{pmatrix}.$$

Por otro lado, la matriz estequiométrica luce de la forma

$$S = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

En consecuencia, el correspondiente sistema EDO de la forma $u'(t) = S \cdot g(t, u(t))$ tiene como aspecto

$$\begin{aligned} u_1'(t) &= k_1(t)u_3(t) - k_2u_1(t), \\ u_2'(t) &= k_1(t)u_3(t) - k_3u_2(t)u_4(t) + \sigma_2, \\ u_3'(t) &= k_3u_2(t)u_4(t) - k_1(t)u_3(t), \\ u_4'(t) &= k_2u_1(t) - k_3u_2(t)u_4(t). \end{aligned} \tag{6.2}$$

Se puede apreciar fácilmente que

$$u_1'(t) + u_3'(t) + u_4'(t) = 0, \quad u_2'(t) + u_3'(t) = \sigma_2.$$

De modo que la suma de concentraciones $[O] + [NO_2] + [O_3]$ resulta una cantidad constante, mientras que $[NO] + [NO_2]$ crece acorde con $\sigma_2 t$. La naturaleza fotoquímica de la primera reacción crea un ciclo diurno con cambios rápidos en los valores de concentración en cada atardecer y amanecer. Las unidades físicas empleadas serán segundos para el caso de la variable tiempo y número de moléculas por cm^3 para las concentraciones.

Sea el conjunto de valores iniciales y fuentes siguiente

$$u(0) = (0, 1.3 \cdot 10^8, 5.0 \cdot 10^{11}, 8.0 \cdot 10^{11})^T, \quad \sigma_2 = 10^6,$$

con los coeficientes de reacción

$$k_3 = 10^{-16}, \quad k_2 = 10^5, \quad k_1(t) = \begin{cases} 10^{-5}e^{7.0sec(t)} & \text{durante el día,} \\ 10^{-40} & \text{durante la noche,} \end{cases}$$

donde

$$sec(t) = \left(\sin\left(\frac{1}{16}\pi(\bar{t}_h - 4)\right) \right)^{0.2}, \quad \bar{t}_h = t_h - 24[t_h/24], \quad t_h = t/3600.$$

En este problema, se considera que la etapa diurna empieza a las 4 a.m. y termina a las 8 p.m. La expresión t_h convierte los segundos en horas y $[t_h/24]$ denota el entero más grande menor o igual que $t_h/24$. De modo que, $sec(t)$ resulta periódico con un periodo de 24 horas, pero definido solo durante el día. El máximo para k_1 es igual a ≈ 0.01 y ocurre al mediodía.

A partir de estos datos, las siguientes figuras presentan la evolución temporal de las concentraciones sobre aproximadamente 6 días. El sistema se ha integrado en MATLAB con el *solver* *ode15s*, que integra el sistema de ecuaciones diferenciales (6.2) desde el tiempo inicial, que es la salida del Sol del primer día, hasta el tiempo final, que se refiere a la puesta de Sol del último; implementando, además, las condiciones iniciales presentadas anteriormente.

El método *ode15s* aquí presentado está basado en las *Backward Differentiation Formulas* (BDFs). Las BDFs son métodos multipaso que emplean la información de algunos pasos anteriores cercanos. Estos métodos son L -estables hasta un número de pasos $k \leq 2$ y tienen amplias regiones de estabilidad en el semiplano complejo izquierdo para los otros valores $k = 3, 4, 5$.

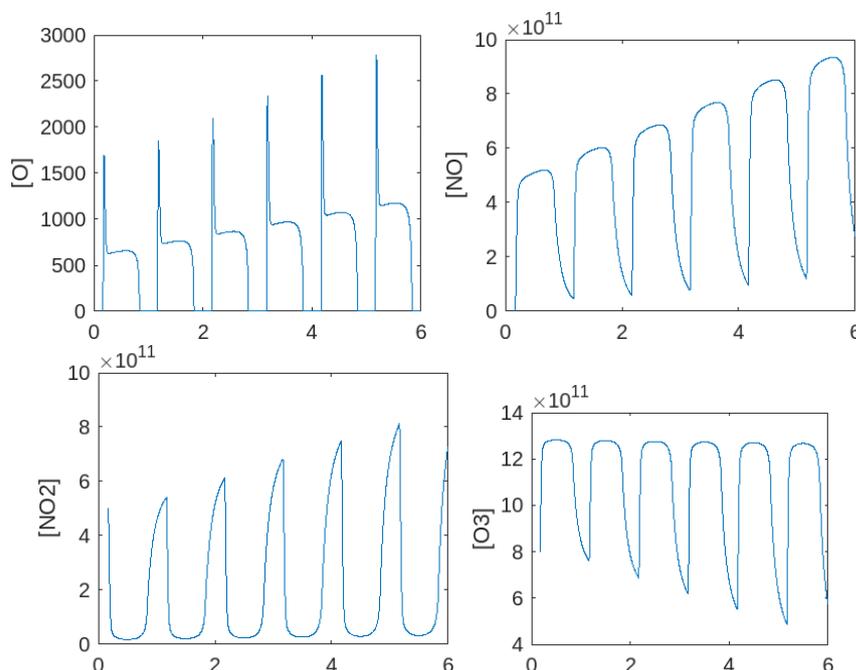


Figura 6.1. Concentraciones de las especies del problema (6.1) en dependencia del tiempo.

Este ciclo es típico para cada sistema de química cinética atmosférica. La solución tiene grandes saltos durante todo el intervalo de tiempo debido a la reacción fotoquímica que se activa al amanecer y se apaga al atardecer.

Los problemas rígidos -*stiff problems*- se caracterizan por su gran disparidad entre las escalas de tiempo de las diferentes variables o componentes del sistema modelado. Con respecto a esto, la concentración $[O_2]$ es considerada constante y k_2 contiene el número total de moléculas de O_2 por cm^3 , entonces esta constante de velocidad es mucho mayor que k_1 y k_3 . Para el sistema, esto implica que el producto O_3 se forma mucho más rápido que los productos de la primera y la segunda reacción. Estas diferencias tan grandes entre las constantes de velocidad producen una gran dispersión en las escalas de tiempo, provocando que este problema de química atmosférica se considere un problema rígido. Obviamente las soluciones numéricas deben proporcionar siempre cantidades positivas como resulta patente en las gráficas.

6.2. Modelo de Angiogénesis

A continuación, se considera el modelo unidimensional para la angiogénesis tumoral de Chaplain y Stuart (1993). La angiogénesis es el proceso de desarrollo de los vasos sanguíneos. El modelo describe el caso de que este proceso sea inducido por un tumor que tiene como objetivo establecer una conexión con la red sanguínea y, por lo tanto, con el suministro de nutrientes a fin de seguir creciendo.

El modelo presenta dos componentes: la primera, ρ , que es la concentración de la células endoteliales que revisten los vasos sanguíneos y, en consecuencia, ρ es una medida de la densidad de la red en desarrollo; la segunda, c , que es la concentración de un factor de angiogénesis tumoral (FAT) que es secretado por el tumor y estimula el crecimiento de los vasos sanguíneos. Con $x \in [0, 1]$, el sistema EDP es de la forma

$$\begin{aligned}\rho_t &= \varepsilon \rho_{xx} - \kappa(c_x \rho)_x + \mu \rho(1 - \rho) \max(0, c - c^*) - \beta \rho, \\ c_t &= \delta c_{xx} - \lambda c - \frac{\alpha \rho c}{\gamma + c},\end{aligned}\tag{6.3}$$

describiendo la quimiotaxis¹ -advección- para ρ ; y difusión, pérdidas y reacciones bioquímicas para ρ y c .

¹ Movimiento de células u organismos a favor o en contra de una sustancia, en respuesta a su gradiente de concentración.

Siguiendo a Chaplain y Stuart (1993), se simula la siguiente configuración. En el tiempo inicial $t = 0$, el tumor está localizado en $x = 0$, dada la condición inicial para la concentración de FAT $c(x, 0) = \cos(\frac{1}{2}\pi x)$. En $t = 0$, un vaso sanguíneo está localizado en $x = 1$, dado por la siguiente concentración inicial

$$\rho(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x < 1, \\ 1 & \text{si } x = 1. \end{cases}$$

Las condiciones iniciales, que siguen las de tipo Dirichlet son

$$\rho(0, t) = 0, \quad \rho(1, t) = 1 \quad \text{y} \quad c(0, t) = 1, \quad c(1, t) = 0,$$

y los valores de los parámetros:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= 10^{-3}, \quad \delta = 1, \quad \alpha = 10, \quad \beta = 4, \quad \gamma = 1, \\ \kappa &= 0.75, \quad \lambda = 1, \quad \mu = 100, \quad c^* = 0.2. \end{aligned}$$

El tiempo de simulación para el modelo descrito es $T = 0.7$. Para tiempos muchos más largos, las suposiciones subyacentes del modelo ya no se sostienen porque el vaso sanguíneo ha alcanzado el tumor y otros procesos toman el control.

En cuanto a las discretizaciones que se emplearán en este modelo, se puede resaltar que:

Por un lado, sobre los términos difusivos c_{xx} y ρ_{xx} de las ecuaciones del factor de angiogénesis tumoral y la densidad celular de los vasos sanguíneos, respectivamente, se aplican diferencias centrales de segundo orden, de manera que

$$\begin{aligned} (c_j)_{xx} &= \frac{1}{h^2}(c_{j-1} - 2c_j + c_{j+1}), \\ (\rho_j)_{xx} &= \frac{1}{h^2}(\rho_{j-1} - 2\rho_j + \rho_{j+1}), \end{aligned}$$

siendo c_j y ρ_j las aproximaciones para cada punto de malla x_j con $j = 1, \dots, m$ y $h = 1/(m + 1)$.

Por otro lado, para el término advectivo $(c_x \rho)_x$, se considera la discretización conservativa en las celdas $[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ que viene dada por

$$-(c_x \rho)_x \Big|_{x=x_j} \approx \frac{1}{h} \left(a_{j-\frac{1}{2}} \rho_{j-\frac{1}{2}} - a_{j+\frac{1}{2}} \rho_{j+\frac{1}{2}} \right), \quad a_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h} (c_{j+1} - c_j),$$

donde los valores $\rho_{j+1/2}$ son escogidos acorde con los esquemas *upwind* de primer y tercer orden y el central de segundo orden que siguen las fórmulas de la tabla

Esquema	Fórmula
<i>Upwind</i> Primer Orden	$\rho_{j+\frac{1}{2}} = \rho_{j+1}, \quad j = 0, 1, \dots, m$
Central Segundo Orden	$\rho_{j+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_{j+1} + \rho_j}{2}, \quad j = 0, 1, \dots, m$
<i>Upwind</i> Tercer Orden	$\rho_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{6}(2\rho_j + 5\rho_{j+1} - \rho_{j+2}), \quad j = 0, 1, \dots, m-1$

En el caso de querer realizar *upwind* de tercer orden con $j = m$,

$$\rho_{m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{6}(-\rho_{m-1} + 5\rho_m + 2\rho_{m+1}).$$

Esto se justifica por un proceso de interpolación.

En su forma actual, el término $\mu\rho(1 - \rho)$ conduce rápidamente a inestabilidades cuando se encuentran pequeños valores negativos para ρ . A fin de evitar estas inestabilidades, este término de reacción es sustituido por $\mu|\rho|(1 - \rho)$. Incluso así, el problema es bastante difícil de resolver y se necesita un número bastante considerable de puntos de malla. Las dificultades numéricas son causadas principalmente por una interacción sutil de los operadores diferenciales espaciales con los términos de reacción.

A continuación, se adjuntan las ilustraciones de las soluciones numéricas de $\rho(x, T)$ con los siguientes tres esquemas aplicados de izquierda a derecha: el esquema *upwind* de primer orden, el esquema central de segundo orden y el esquema *upwind* de tercer orden, donde las tres primeras soluciones están trazadas para $\delta = 10^{-3}$, $T = 0.5$ y $h = 1/50$; y las restantes con $\delta = 1$, $T = 0.7$ y $h = 1/100$. Para consultar la solución de referencia es preciso acudir al libro [1].

La ecuación se ha integrado en MATLAB gracias al *solver* ode23t, que integra problemas moderadamente rígidos usando pares encajados de métodos *Runge-Kutta* de órdenes 2 y 3².

Para ambos valores del coeficiente de difusión δ , la solución de la densidad celular ρ ha formado un frente que viaja hacia la izquierda en el tiempo T . Este frente es bastante más pronunciado para $\delta = 10^{-3}$.

Para $\delta = 10^{-3}$, el esquema *upwind* de primer orden proporciona una solución un tanto suave y donde el frente viaja demasiado rápido con respecto al frente real. Esto en parte es debido al hecho de que el esquema agrega difusión

² *Grosso modo*, un par encajado avanza con un método de orden 3, pero usa un método de orden 2 para estimar el error.

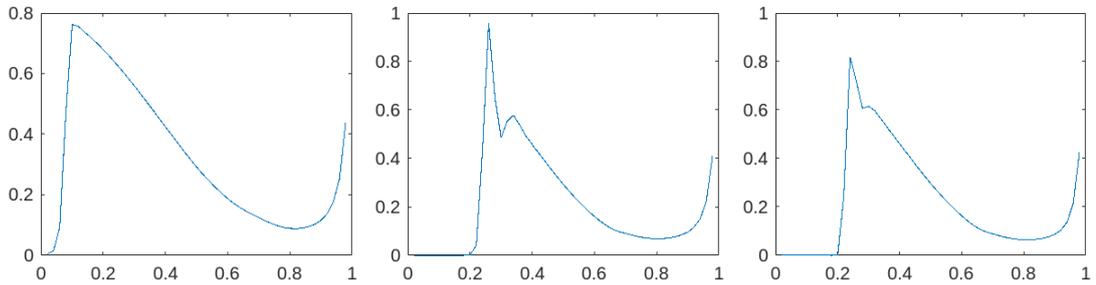


Figura 6.2. Soluciones para $\rho(x, T)$ con $\delta = 10^{-3}$, $h = 1/50$ y $T = 0.5$. Orden de izquierda a derecha: esquema *upwind* de primer orden, esquema central de segundo orden y esquema *upwind* de tercer orden.

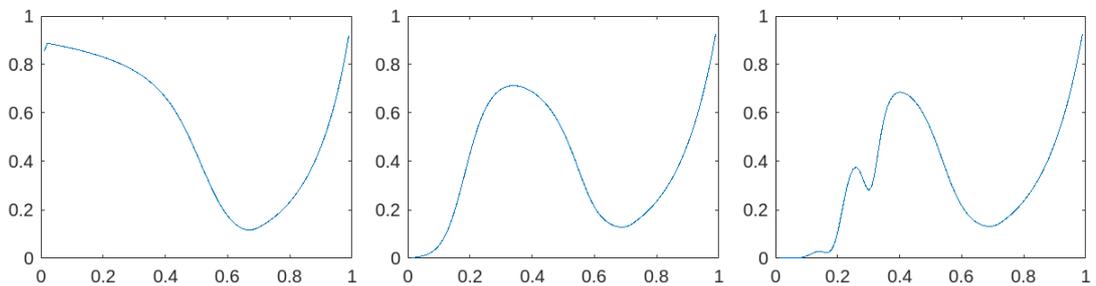


Figura 6.3. Soluciones para $\rho(x, T)$ con $\delta = 1$, $h = 1/100$ y $T = 0.7$. Orden de izquierda a derecha: esquema *upwind* de primer orden, esquema central de segundo orden y esquema *upwind* de tercer orden.

numérica, lo que lleva a un aumento artificial de ε , y esto produce que la velocidad del frente incremente a través del término de reacción. Los esquemas de segundo y tercer orden producen oscilaciones relativamente precisas detrás del frente.

Para $\delta = 1$, las soluciones para los tres esquemas son razonablemente suaves, pero producen aproximaciones inexactas. El esquema *upwind* de primer orden arroja un resultado de mala calidad causado, nuevamente, por la difusión numérica, que afecta a la velocidad del frente. Para el esquema central de segundo orden, su carácter dispersivo produce cierta difusión delante del frente y oscilaciones detrás de él. Esto, junto con el término de reacción, provoca que la velocidad del frente sea demasiado grande. Las oscilaciones detrás del frente no son visibles por la suavidad del perfil. El esquema de tercer orden produce oscilaciones -relativamente pequeñas- delante del frente, estas oscilaciones se amplifican algo por el término de reacción.

En los dos casos, el esquema de tercer orden resulta el más fiable. Es evidente que, tras estos resultados, ninguno de los esquemas aquí considerados arroja buenas aproximaciones en las mallas gruesas. El motivo principal podría ser la carencia de precisión en el esquema *upwind* de primer orden y la falta de monotonía en los otros dos esquemas. Sin embargo, cuando la resolución espacial

h disminuye razonablemente, los resultados son cada vez más aceptables, principalmente cuando se usa el esquema *upwind* de tercer orden para discutir la advección.

Conclusiones

Cabe destacar, en primer lugar, la relevancia de los modelos de las ecuaciones de advección, difusión y reacción, puesto que se ha visto que son capaces de trasladar comportamientos físico-químicos que describen ciertas especies a expresiones matemáticas que, una vez resueltas, facilitan la interpretación de estos fenómenos.

Al final, este trabajo no deja de ser una muestra más de que las matemáticas proporcionan un lenguaje preciso y estructurado capaz de describir y modelar fenómenos naturales. Precisamente, estas ecuaciones aparecen como un ejemplo del enorme e irrefutable beneficio que conllevan las matemáticas para la predicción y el pronóstico de eventos naturales. A mi juicio, la comprensión de estas ecuaciones conlleva, en cierto sentido, concienciar a los seres humanos incluso de la huella que dejan en este planeta, a través, por ejemplo, del estudio previo relacionado con la química atmosférica, puesto que arroja resultados contundentes que permiten cuantificar el perjuicio generado por las acciones contaminantes de la mano del hombre. Por otro lado, también se ha visto que las ecuaciones pueden colaborar en la investigación de procesos fisiológicos, como ha ocurrido en el modelo de angiogénesis, lo que lleva a concluir que estas ecuaciones contribuyen de manera positiva en estudios científicos para la medicina y la comprensión del cuerpo humano.

La aportación de las matemáticas en la interpretación de estos fenómenos naturales es evidente, por eso, es preciso valorar también la labor de MATLAB u otros *software* que, si no arrojan soluciones exactas de estas ecuaciones debido a su complejidad, al menos, sugieren aproximaciones fiables cuando los métodos escogidos son convergentes; de forma que permitan hacer un boceto de las soluciones que, de otra manera, resultarían indescifrables.

En conclusión, la aproximación MOL proporciona un mecanismo flexible y relativamente simple para integrar los modelos basados en EDPs de advección-

difusión-reacción, los cuales abundan en todos los campos de la ciencia. Para obtener resultados fiables se precisa de métodos numéricos estables, consistentes y con buenas propiedades de positividad.

A

Apéndice

A.1. Codificación en Matlab

A.1.1. Ejemplo de Química Atmosférica

```
1 function f=atmosfera(t,u)
2 %Reaction rate constants
3 k2=1.e5; k3=1.e-16; s2=1.e6;
4 th=t/3600; tt=th-24*floor(th/24);
5 c=pi/16; st=sin(c*(tt-4)); sect=sign(st)*sin(abs(st)
   ^0.2)*;
6 k1=max(1.e-40,1.e-5*exp(7*sect));
7 %ODE system
8 f(1)=k1*u(3)-k2*u(1);
9 f(2)=k1*u(3)-k3*u(2)*u(4)+s2;
10 f(3)=k3*u(2)*u(4)-k1*u(3);
11 f(4)=k2*u(1)-k3*u(2)*u(4);
12 f=f';
13 end
```

```
1 %Initial concentrations
2 u0 = [0, 1.3*power(10, 8), 5.0*power(10, 11), 8.0*
   power(10, 11)];
3 %Vector of time in seconds from day 1 to day 6
4 t = linspace(4*3600, 24*6*3600, 3600);
5 [t, u] = ode15s(@atmosfera, t, u0);
6 t = t/3600;
7 %Concentration graph for each species
8 plot(t/24, u(:,4))
9 ylabel(' [O3]')
```

A.1.2. Ejemplo de Angiogénesis

```

1 function u0=initialAngio(m)
2 % Initial condition for Angiogenesis problem
3 h=1/(m+1);
4 x=h:h:1-h;pi2=pi/2;
5 c=cos(pi2*x);
6 rho=zeros(1,m);
7 rho(m)=1;
8 u0=[c rho]';
9 end

```

```

1 function f=Angiogenesis(t,u)
2 % Angiogenesis problem
3 % Discretization in space of Advection (c_x rho)_x
4 % iop=1 (upwind first order)
5 % iop=2 (central second order)
6 % iop=3 (upwind third order)
7 delta=1.e-3;iop=3;
8 %
9 m=length(u)/2;
10 eps=1.e-3;alfa=10;beta=4;gamma=1;kappa=0.75;mu=100;
    cstar=0.2;lambda=1;
11 h=1/(m+1);
12 u=u';
13 c(1:m)=u(1:m);rho(1:m)=u(m+1:2*m);
14 c0=1;c(m+1)=0;
15 rho0=0;rho(m+1)=1;
16 difc=delta/h^2;
17 % equations for dc/dt
18 fc(2:m)=difc*(c(1:m-1)-2*c(2:m)+c(3:m+1))-lambda*c(2:m
    )-...
19     alfa*rho(2:m).*c(2:m)./(gamma+c(2:m));
20 fc(1)=difc*(c0-2*c(1)+c(2))-lambda*c(1)-alfa*rho(1)*c
    (1)/(gamma+c(1));
21 % equations for drho/dt
22 ajmas12(1:m)=(c(2:m+1)-c(1:m))/h;
23 aj0mas12=(c(1)-c0)/h;
24 if iop==1
25     rjmas12(1:m)=rho(2:m+1);
26     rj0mas12=rho(1);
27 elseif iop==2

```

```

28     rjmas12(1:m)=(rho(2:m+1)+rho(1:m))/2;
29     rj0mas12=(rho0+rho(1))/2;
30 elseif iop==3
31     rjmas12(1:m-1)=(2*rho(1:m-1)+5*rho(2:m)-rho(3:m+1)
32         )/6;
33     rjmas12(m)=(-rho(m-1)+5*rho(m)+2*rho(m+1))/6;%
34     interpolation on 3 previous points
35     rj0mas12=(2*rho0+5*rho(1)-rho(2))/6;
36 end
37 arjmas12(1:m)=ajmas12(1:m).*rjmas12(1:m);
38 arj0mas12=aj0mas12*rj0mas12;
39 %
40 react(1:m)=mu*abs(rho(1:m)).*(1-rho(1:m)).*max(0,c(1:m)
41     )-cstar)-...
42     beta*rho(1:m);
43 %
44 difr=eps/h^2;kh=kappa/h;
45 fr(2:m)=difr*(rho(1:m-1)-2*rho(2:m)+rho(3:m+1))-...
46     kh*(arjmas12(2:m)-arjmas12(1:m-1))+react(2:m);
47 fr(1)=difr*(rho0-2*rho(1)+rho(2))-...
48     kh*(arjmas12(1)-arj0mas12)+react(1);
49 f=[fc(1:m) fr(1:m)]';
50 end

```

```

1 function [tout,c,rho,x]=AngiogOde23t(m,tend,odefun)
2 % This program solves the Angiogenesis problem by
3   using ode23t (Matlab integrator)
4 h=1/(m+1);
5 x=h:h:1-h;
6 tspan=[0 tend];
7 u0=initialAngio(m);
8 options=odeset('RelTol',1.e-4,'AbsTol',1.e-6);
9 [tout,yout]=ode23t(odefun,tspan,u0,options);
10 c(:,1:m)=yout(:,1:m);rho(:,1:m)=yout(:,m+1:2*m);
11 end

```

Para ejecutarlo, en la ventana de comandos se ha de escribir

```
>> [tout,c,rho,x]=AngiogOde23t(m,tend,@Angiogenesis).
```

Teniendo en cuenta que $h = 1/(m + 1)$, las soluciones de los ejemplos han sido calculadas para $\delta = 10^{-3}$, con $tend = 0.5$ y $m = 49$; y para $\delta = 1$, con $tend = 0.7$ y $m = 99$.

Luego, para generar las gráficas previas solo se ha de escribir en la ventana de comandos

```
» plot(x,rho(end,:)).
```

Si se desea ejecutar para otros valores de δ o con otros esquemas de diferencias, se debe acudir a la función *Angiogenesis* y, en las primeras líneas, modificar *delta* o cambiar la opción de *iop* siguiendo lo indicado en los comentarios del código.

A.2. Normas

Sea el espacio vectorial \mathbb{C}^m y $h = 1/m$. Las normas vectoriales usadas en este trabajo son las normas discretas en el espacio L_p con $p = 1, 2, \infty$, donde

$$\|v\|_1 = h \sum_{j=1}^m |v_j|, \quad \|v\|_2 = \left(h \sum_{j=1}^m |v_j|^2 \right)^{1/2}, \quad \|v\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq m} |v_j|$$

para $v = (v_1, v_2, \dots, v_m)^T \in \mathbb{C}^m$.

Bibliografía

- [1] HUNSDORFER, Willem y VERWER, Jan. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Equations*. 1st edition. Nueva York: Springer, 2003. ISBN 978-3-642-05707-6.
- [2] ZUAZUA, Enrique. *Métodos Numéricos de resolución de Ecuaciones en Derivadas Parciales* [en línea]. Notas de Lectura. Bilbao: Basque Center for Applied Mathematics (BCAM), 2009 [Consulta: 01-06-2023] Disponible en: https://verso.mat.uam.es/web/ezuazua/documentos_public/archivos/personal/comites/notas-05_065-complete.pdf.
- [3] SAMAMÉ JIMENEZ, Hilda Ana. *Solución Numérica de la Ecuación Advección-Difusión* [en línea]. Tesis doctoral. Perú: Universidad Nacional Mayor de San Marcos, 2016 [fecha de consulta: junio de 2023]. Disponible en: <https://core.ac.uk/download/323352008.pdf>
- [4] PEINADO ASENSI, Ivan. *Resolución de Ecuaciones de Convección-Difusión en 2D Usando el Método de las Diferencias Finitas Compactas*. Trabajo de fin de máster. Valencia: Universidad Politécnica de Valencia, 2019. [fecha de consulta: junio de 2023]. Disponible en: <https://m.riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/129534/Peinado%20-%20Resoluci%C3%B3n%20de%20ecuaciones%20de%20convecci%C3%B3n-difusi%C3%B3n%20en%202D%20usando%20el%20m%C3%A9todo%20de%20las%20diferenci...pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- [5] PARRA GUEVARA, David. *Solución Numérica de la Ecuación de Difusión-Advección-Reacción con un Esquema de Separación de Operadores* [en línea]. Trabajo. México: Universidad Nacional Autónoma de México, 2004. Disponible en: https://miscelaneamatematica.org/download/tbl_articulos.pdf2.bcaf3ef94be792bb.50617272615f642e706466.pdf
- [6] *ode15s*. Recuperado de <https://es.mathworks.com/help/matlab/ref/ode15s.html>.
- [7] *ode23t*. Recuperado de <https://es.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23t.html>.

Numerical Methods for Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Partial Differential Equations

Carolina Sánchez Guerra

Facultad de Ciencias • Sección de Matemáticas
Universidad de La Laguna

alu0101265292@ull.edu.es

Abstract

The advection-diffusion-reaction equations describe the time evolution of chemical species in a fluid medium. Obtaining their exact solutions is quite complex, which motivates the use of numerical methods to give approximations to the solutions of the equations. This work develops this idea and studies the most suitable methods according to the equation and its convergence by studying its stability, positivity and consistency properties.

1. Introduction

THE ADVECTION-DIFFUSION-REACTION equations are related to natural phenomena such as the study of the propagation of polluting substances or physiological processes. Each chapter of this work is a step in the Method of Lines process to solve these equations. The main steps are: choosing the correct spatial discretization so that the PDE becomes an ODE system. Then, choose the appropriate method to temporally integrate the previous ODE and study the stability, consistency and convergence of the whole process. Finally, a positivity analysis should also be performed to avoid oscillations and instabilities.

2. Outline

CHAPTERS 1 AND 2. For the **advection-diffusion** equation

$$u_t + au_x = du_{xx},$$

we consider the **spatial discretizations** schemes with:

- Second-order central differences:

$$w'_j(t) = \left(\frac{d}{h^2} + \frac{a}{2h}\right)w_{j-1}(t) - \frac{2d}{h^2}w_j(t) + \left(\frac{d}{h^2} - \frac{a}{2h}\right)w_{j+1}(t).$$

- First-order advection upwind and second-order central diffusion we have the same but $d = d + \frac{1}{2}|a|h$.

CHAPTER 3. The spatial discretizations lead to

$$w'(t) = F(t, w(t)) \in \mathbb{R}^m, \quad t \geq 0,$$

which is a **semi-discrete ODE system**.

- Spatial discretization error:** $\varepsilon(t) = u_h(t) - w(t)$
- Spatial truncation error:** $\sigma_h(t) = u'_h(t) - F(t, u_h(t))$

The ODE system is:

- Consistent of order q** if

$$\|\sigma_h(t)\| = \mathcal{O}(h^q) \text{ uniformly for } 0 \leq t \leq T.$$

- Convergent of order p** if

$$\|\varepsilon(t)\| = \mathcal{O}(h^p) \text{ for } 0 \leq t \leq T.$$

And for the system $w'(t) = Aw(t) + g(t)$, this is **stable** if

$$\|e^{tA}\| \leq Ke^{\omega t} \text{ for } 0 \leq t \leq T, \quad K \geq 1, \quad \omega \in \mathbb{R} \text{ and } \forall h \rightarrow 0.$$

CHAPTER 4. The **Method of Lines (MOL)** involves:

1st Spatial Discretization \rightarrow 2nd Time Integration

Here, we study only the **θ -methods**, which formula is

$$w_{n+1} = w_n + (1 - \theta)\tau F(t_n, w_n) + \theta\tau F(t_{n+1}, w_{n+1}).$$

The **Stability of θ -methods**: If we have $w'(t) = Aw(t) + g(t)$ with $A = S \wedge S^{-1}$ and diagonal $\wedge = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)$, then

$$w'(t) = \lambda w(t)$$

and

$$w_{n+1} = R(\tau\lambda)w_n \text{ with } R(z) = \frac{1 + (1 - \theta)z}{1 - \theta z}.$$

where R is the **stability function** of the method.

Also, the **stability region** of the method is

$$S = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| \leq 1\}.$$

The **Stability of MOL**: Consider $F(t, v) = Av + g(t)$. Then,

$$w_{n+1} = R(\tau A)w_n$$

and we have stability if the **eigenvalue criterion** is satisfied

$$\tau\lambda_k \in S,$$

being λ_k the eigenvalue of the matrix A .

The restrictions for step size by the eigenvalue criterion:

Discretization	$\theta < 1/2$	$\theta \geq 1/2$
Upwind Advection	$ a \tau/h \leq 1/(1 - 2\theta)$	$\tau \leq \infty$
Central Advection	instability	$\tau \leq \infty$
Central Diffusion	$d\tau/h^2 \leq 1/(2 - 4\theta)$	$\tau \leq \infty$

CHAPTER 5. The **positivity of the Spatial Discretizations** of the advection-diffusion equation can be classified into:

- The second-order central discretization is positive iff the Péclet numbers satisfy

$$\max_{x,t} \frac{|a(x,t)|h}{d(x,t)} \leq 2.$$

- The first-order advection upwind is positive without the Péclet restriction.

The **positivity of Time Stepping Methods**:

- For $w_{n+1} = (I + \tau A)w_n$, this is positive if $\alpha\tau \leq 1$.
- For $w_{n+1} = w_n + (1 - \theta)\tau Aw_n + \theta\tau w_{n+1}$, this is positive if $\alpha\tau \leq \frac{1}{1 - \theta}$.

CHAPTER 6. The work integrates two models: one related to atmospheric chemistry and the other on tumour growth.

References

- [1] HUNSDORFER, Willem y VERWER, Jan. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Equations*. 1st edition. Nueva York: Springer, 2003. ISBN 978-3-642-05707-6.