

UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS
“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

DOCTORADO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA FÍSICA
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



TESIS

MODELADO DE PROBLEMAS DE CONVECCIÓN NATURAL DIFUSIVA DOBLE NO
LINEAL USANDO DIFERENCIAS FINITAS GENERALIZADAS

*Para obtener el grado de Doctor en Ciencias
en Ingeniería Física*

PRESENTA

M.C. Ricardo Román Gutiérrez
Maestro en Ciencias en Ingeniería Física

ASESOR

Dr. Francisco Javier Domínguez Mota
Doctor en Ciencias en Matemáticas

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Resumen

Las matemáticas nos permiten interpretar los fenómenos físicos de la naturaleza mediante un lenguaje abstracto pero sumamente poderoso. Al construir modelos matemáticos, podemos comprender estos fenómenos y desarrollar una intuición sobre su comportamiento. Dado que la realidad es compleja, los modelos son simplificaciones que omiten factores con poca influencia en el comportamiento general. Sin embargo, estas simplificaciones no implican que los modelos sean ineficaces; a menudo resultan muy útiles para predecir situaciones reales.

El cálculo diferencial establece relaciones entre dos variables, donde un cambio en una afecta a la otra. A esta relación la denominamos derivada, la cual representa movimiento. Por ejemplo, las poblaciones crecen, las divisas fluctúan, la Tierra gira alrededor del Sol, y la presión y la gravedad hacen que el agua fluya. Si estas relaciones entre variables se expresan mediante ecuaciones, obtenemos lo que se conoce como ecuaciones diferenciales.

Los fenómenos físicos donde existe movimiento pueden expresarse mediante sistemas de ecuaciones diferenciales parciales. Al resolver estos sistemas, obtenemos las funciones que describen el comportamiento del fenómeno. En muchos casos, debido a su complejidad, no es posible encontrar una solución analítica, por lo que se recurre a métodos numéricos. Esta dificultad aumenta cuando las ecuaciones están acopladas o son no lineales.

En este trabajo, se implementa el Método de Diferencias Finitas Generalizadas para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales que modelan fenómenos como la difusión de temperatura, la difusión de concentración y el movimiento de un fluido incompresible. Esto se aborda dentro de un dominio lleno de un medio poroso saturado, donde se simula la intrusión de agua salada y el cambio de temperatura a lo largo del tiempo.

Palabras clave: Ecuaciones diferenciales, solución numérica, métodos numéricos, flujo de agua subterránea, difusión.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Abstract

Mathematics allows us to interpret physical phenomena in nature through an abstract yet highly powerful language. By constructing mathematical models, we can understand these phenomena and develop an intuition about their behavior. Since reality is complex, models are simplifications that omit factors with little influence on the general behavior. However, these simplifications do not imply that the models are ineffective; in fact, they are often very useful in predicting real-world situations.

Differential calculus establishes relationships between two variables, where a change in one affects the other. This relationship is called a derivative, which represents movement. For example, populations grow, currencies fluctuate, the Earth orbits the Sun, and pressure and gravity cause water to flow. If these relationships between variables are expressed through equations, we obtain what is known as differential equations.

Physical phenomena involving motion can be expressed in terms of systems of partial differential equations. By solving these systems, we obtain the functions that describe the behavior of the phenomenon. In many cases, due to their complexity, it is not possible to find an analytical solution, so numerical methods are commonly used. This challenge becomes especially pronounced when the equations are coupled or nonlinear.

In this work, the Generalized Finite Differences Method is implemented to solve systems of differential equations that model phenomena such as temperature diffusion, concentration diffusion, and the movement of an incompressible fluid. This is addressed within a domain filled with a saturated porous medium, where the intrusion of saltwater and temperature changes over time are simulated.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Contenido

Resumen	I
Abstract	III
Contenido	V
Dedicatoria	IX
Agradecimientos	XI
Notación	XIII
Índice de figuras	XV
Introducción	1
1. Descripción del problema	7
1.1. Conceptos básicos	8
1.1.1. Grupos adimensionales	8
1.1.2. Ley de Darcy	12
1.1.3. Función de Flujo	13
1.2. Problemas de flujo de agua subterránea	14
1.2.1. Problema de Henry	15
1.2.2. Problema de Elder	18
1.3. Convección Natural Difusiva Doble en un Medio Poroso Saturado	22
2. Metodología	27
2.1. Expansión en serie de Taylor	27
2.2. Método de Diferencias Finitas (FDM) en 1D	30
2.2.1. Obtención de las aproximaciones en diferencias finitas	30
2.2.2. Diferencia de segundo orden	34
2.2.3. Ecuaciones en diferencias en 1D	35
2.2.4. Cambio de la condición de frontera del lado derecho (Condición de frontera de Neumann)	38
2.3. Método de Diferencias Finitas (FDM) en 2D	42
2.3.1. Ecuación en diferencias en 2D	44

2.3.2. Cambio de la condición en una de las fronteras (Condición de frontera de Neumann)	46
2.4. Diferencias Finitas Generalizadas (GFDM)	49
2.4.1. Discretizando un operador diferencial lineal con GFDM	49
2.4.2. Cambios en las fronteras que tengan condiciones de frontera de Neumann . .	55
2.5. Discretización de la parte temporal	59
3. Solución del problema y discusión de resultados	63
3.1. Problema de Henry	63
3.2. Problema de Elder	75
3.3. Convección Natural Difusiva Doble en un Medio Poroso Saturado (CNDD-MPS) . .	81
Conclusiones y trabajo futuro	89
Anexos	93
Anexo A: Métodos usados para la integración temporal	93
Anexo B: Estabilidad de los métodos usados para la integración temporal	113
Bibliografía	121

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

*A mi esposa,
quien me guía y me
da la fuerza para
seguir adelante.*

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Agradecimientos

Quiero agradecer a mi asesor el doctor Francisco Javier Domínguez Mota, por guiarme durante todos estos años. Por tener tanta paciencia y comprensión cuando no lograba obtener resultados. Por sus consejos y por sus clases. También por todo lo que he podido aprender en el doctorado.

Quiero agradecer también a todos mis profesores. Gracias a ellos me he ido formando y he forjado el carácter necesario para enfrentarme a diferentes adversidades. Especialmente al doctor Héctor Igor Pérez Aguilar y al doctor José Gerardo Tinoco Ruiz, quienes me apoyaron con sus observaciones y comentarios a lo largo del desarrollo del presente trabajo.

También a mis compañeros con los que compartimos la experiencia de trabajar en el doctorado. Juntos superamos los retos que se nos presentaron a lo largo de este recorrido.

Quiero agradecer a mi esposa, María Guadalupe, por todos los sacrificios que ha hecho con el objetivo de ayudarme a salir adelante. Gracias por todo tu esfuerzo, dedicación, y el amor que siempre me brindas.

También quiero agradecer a mis padres Jesús Román y Julieta Gutiérrez, y a mis suegros Efraín Neri y Rosario Ponce. Gracias por todo el apoyo que nos han brindado. Gracias por darnos ánimo e impulsarnos a ser mejores.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Notación

En la Tabla 1 se describen brevemente los símbolos utilizados en las ecuaciones que se presentan a lo largo de este trabajo.

Tabla 1: *Notación.*

Símbolo	Significado
a	Parámetro de descarga.
b	Inverso del número de Peclet.
Le	Número de Lewis.
Ra	Número de Rayleigh.
N	Tasa de flotabilidad.
x, y	Dimensiones espaciales.
t	Tiempo, o dimensión temporal.
$\Psi = \Psi(x, y)$	Función de flujo.
T	Temperatura.
C	Concentración.
$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mathbf{j}}$	Operador vectorial nabla.
$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$	Operador laplaciano.
$\mathbf{v} = (v_x, v_y)$	Velocidad de flujo.
Ω	Dominio.
$\partial\Omega$	Fronteras.
θ	Ángulo de inclinación del dominio respecto del eje horizontal.
N, N_{nodos}	Número de nodos.
h_i	Distancia horizontal entre el nodo central con coordenadas p_0 y el i ésimo nodo con coordenadas p_i .
k_i	Distancia vertical entre el nodo central con coordenadas p_0 y el i ésimo nodo con coordenadas p_i .
$p_i = (x_i, y_i)$	Coordenadas en 2D de un nodo cualquiera i .
$p_0 = (x_0, y_0)$	Coordenadas del nodo central.
$p_g = (x_g, y_g)$	Coordenadas del nodo fantasma.
$\frac{\partial u}{\partial n}$	Derivada normal de la función u .
$\hat{\mathbf{n}} = (n_x, n_y)$	Vector normal.
\mathbb{L}	Operador diferencial lineal.
\mathbb{L}_0	Aproximación con GFDM al operador diferencial lineal.

M	Matriz de distancias.
Γ	Vector de pesos.
L	Vector de coeficientes.
D_x	Operador matricial que aproxima a la derivada en dirección x .
D_y	Operador matricial que aproxima a la derivada en dirección y .
D_2	Operador matricial que aproxima al operador laplaciano ∇^2 .
L_x, L_y, L_2	Vectores de coeficientes usados para ensamblar las matrices D_x, D_y y D_2 , respectivamente.
U	Vector solución.
$\frac{dU}{dt}, \dot{U}$	Derivada temporal del vector solución.

Índice de figuras

1.1. Permeámetro de carga constante, utilizado para obtener la permeabilidad de materiales porosos saturados empleando la ley de Darcy.	12
1.2. Flujo en las curvas AP y AP'.	14
1.3. Esquema representativo del problema de Henry.	15
1.4. Sección a través del área de Cutler cerca de Miami, Florida, que muestra las isocloras del 18 de septiembre de 1958, y las interfaces calculadas suponiendo las condiciones como si fueran estables durante las mareas alta, media y baja.	16
1.5. Condiciones de frontera del problema de Henry.	18
1.6. John W. Elder con la placa Hele-Shaw que utilizó para sus experimentos de 1967 en Cambridge (Fotografía tomada el 5 de enero de 2017) [Elder et al., 2017].	19
1.7. Fotografías de las líneas de corriente en la placa de Hele-Shaw de 1967 [Elder, 1967, Elder et al., 2017].	20
1.8. Esquema representativo del Problema de Elder.	20
1.9. Condiciones de frontera del problema de Elder.	21
1.10. Especificaciones del dominio y de las condiciones de frontera del problema CNDD-MPS.	24
1.11. Esquema de un diodo térmico, con inclinación respecto al eje horizontal.	25
2.1. Varias aproximaciones a $u'(x_i)$ interpretadas como la pendiente de líneas entre dos puntos.	31
2.2. Discretización del dominio en 1D.	32
2.3. Solución de la ecuación de Poisson 1D, con fuente $f(x) = 1$, y con condiciones de frontera $u(0) = 0$ y $u(1) = 0$	39
2.4. Nodo fantasma a la derecha del dominio discretizado en 1D para soporte de la ecuación en el último nodo $N + 1$ con coordenada $x = 1$	39

2.5. Solución de la ecuación de Poisson en 1D, con fuente $f(x) = 1$, y con condiciones de frontera $u(0) = 0$ y $u_x(1) = 0$, utilizando FDM.	42
2.6. Dominio en 2D discretizado con $n = 13$ nodos en x y $m = 11$ nodos en y	43
2.7. Nodos de soporte para diferencias clásicas (FDM) en 2D.	43
2.8. Nodos de frontera identificados por color para el problema de Poisson usando FDM, con $n = 13$ nodos en dirección x , y $m = 11$ nodos en dirección y	45
2.9. Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = -5$, con condiciones de frontera: $u(x = 0, y) = 0$, $u(x = 2, y) = 2 + \sin(\pi y)$, $u(x, y = 0) = x$, $u(x, y = 1) = x$, utilizando FDM y empleando un total de $N = 13 \times 11 = 143$ nodos.	46
2.10. Esténcil de un nodo de frontera de Neumann, para una frontera en la parte inferior de un dominio rectangular utilizando nodo fantasma con el método FDM.	48
2.11. Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = -5$, con condiciones de frontera: $u(x = 0, y) = 0$, $u(x = 2, y) = 2 + \sin(\pi y)$, $u_n(x, y = 0) = -10x$, $u(x, y = 1) = x$ utilizando FDM, y empleando un total de $N = 13 \times 11 = 143$ nodos.	49
2.12. Nodo central y nodos de soporte para el esquema de GFDM.	50
2.13. Esquema representativo de una presa de tierra.	54
2.14. Geometría y malla del dominio en forma de trapecio, creada con la librería <code>calfe-m-python</code> , donde se crearon un total de $N = 724$ nodos en la malla.	54
2.15. Diferentes condiciones de frontera identificadas por color en un dominio con forma de trapecio con un total de $N = 724$ nodos.	55
2.16. Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = 0.002$, con condiciones de frontera: $u _{\partial\Omega_{Izq}} = 1 + \frac{1}{4} \sin(\pi \frac{y}{25})$, $u _{\partial\Omega_{Der}} = 0$, $u _{\partial\Omega_{Inf}} = 1 - \frac{x}{100}$, $u _{\partial\Omega_{Sup}} = \frac{1}{80}(130 - x)$. Utilizando GFDM, y empleando un total de $N = 724$ nodos.	55
2.17. Esténcil de un nodo en una frontera de Neumann, y el nodo fantasma p_g como el nodo simétrico al centroide p_m , proyectado en dirección del vector normal $\hat{\mathbf{n}}$	57
2.18. Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = 0$, con condiciones de frontera: $u _{\partial\Omega_{Izq}} = 1 + \frac{1}{4} \sin(\pi \frac{y}{25})$, $u _{\partial\Omega_{Der}} = 0$, $u_n _{\partial\Omega_{Inf}} = 0$, $u_n _{\partial\Omega_{Sup}} = 0$. Utilizando GFDM, y empleando un total de $N = 724$ nodos.	58
3.1. Comparativa de los valores de las matrices D_y^Ψ y $D_y^{\Psi_C}$ para un dominio discretizado de $N = 28$	66
3.2. Fronteras por color para el problema de Henry con $N = 28$ nodos.	66
3.3. Comparativa de la matriz $D_y\Psi$, dejando los valores conocidos dentro de la matriz y pasándolos al lado derecho, usando $N = 28$ nodos.	67
3.4. Dominios discretizados usados para resolver el problema de Henry.	69

3.5. Nodos con fronteras por color para los diferentes dominios del problema Henry. . . .	69
3.6. Solución del problema de Henry ($a = 0.2637$, $b = 0.1$) en diferentes tiempos t , usando $N = 5969$ nodos.	71
3.7. Solución del problema de Henry ($a = 0.2637$, $b = 0.1$) obtenida por [Li et al., 2014] usando $N = 3317$ nodos.	72
3.8. Solución de los problemas de Henry ($a = 0.2637$, $b = 0.1$) y Pinder ($a = 0.2637$, $b = 0.035$) con diferente N , en el tiempo $t = 0.21$	73
3.9. Isoclora $C = 0.5$ para las tres versiones del problema: Original ($a = 0.2637$, $b = 0.1$), Pinder ($a = 0.2637$, $b = 0.035$), Modificado($a = 0.1315$, $b = 0.2$), en el tiempo estacionario $t = 0.21$, empleando $N = 2748$ nodos.	73
3.10. Isoclora $C = 0.5$ en las versiones de Pinder y Modificada, para diferente N , en el tiempo estacionario $t = 0.21$	74
3.11. Función de flujo Ψ , Concentración C , y campo de velocidad, para las tres versiones del problema de Henry: Original ($a = 0.2637$, $b = 0.1$), Pinder ($a = 0.2637$, $b = 0.035$), Modificada ($a = 0.1315$, $b = 0.2$). Empleando $N = 5969$ nodos.	75
3.12. Dominios discretizados, rectángulo $\Omega = [0, 4] \times [0, 1]$, para el problema de Elder, con las diferentes fronteras identificadas por color.	78
3.13. Solución del problema de Elder. Función de flujo Ψ (Izquierda) y Concentración C (Derecha) en diferentes tiempos: $t = 0.000$, $t = 0.015$, $t = 0.050$, $t = 0.100$, $t = 1.239$. Usando un total de $N = 6820$ nodos en el dominio.	79
3.14. Solución del problema de Elder obtenida por [Li et al., 2014], utilizando un total del $N = 6597$ nodos.	80
3.15. Isocloras $C = 0.2$ y $C = 0.6$ del problema de Elder en el tiempo $t = 0.05$, para diferente número de nodos N	81
3.16. Solución del problema de Elder estacionaria ($t = 1.239$), empleando $N = 6820$ nodos.	81
3.17. Dominio discretizado para el problema CNDD-MPS, donde los nodos de frontera están resaltados en diferentes colores.	84
3.18. Solución del problema CNDD-MPS usando $N_{\text{nodos}} = 976$, $Ra = 100$, $Le = 0.8$, $N = 2$, $t_{\text{est}} = 0.13$	85
3.19. Solución del problema estacionario, $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$, de CNDD. Soluciones obtenidas por [Li et al., 2018] (izquierda) y [Costa, 2004] (derecha).	86
3.20. Isocloras $C = 0.2$ y $C = 0.6$ en el tiempo $t = 0.03$	87
3.21. Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$, usando el método de Euler con $N = 11$ nodos.	95

-
- 3.22. Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método de Euler hacia adelante para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 16,000 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$ 96
- 3.23. Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$. usando los método FE y BE con $N = 11$ nodos. 99
- 3.24. Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método de Euler hacia atrás para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 16 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$ 100
- 3.25. Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$. usando los método FE, BE, y CN con $N = 11$ nodos. 102
- 3.26. Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método de Crank-Nicolson para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 16 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$ 104
- 3.27. Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$. usando los método FE, BE, CN, y RK2 con $N = 11$ nodos. 108
- 3.28. Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método RK2 para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 160 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$ 109
- 3.29. Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$. usando los método FE, BE, CN, RK2, y RKF45. Donde las soluciones utilizan $N = 11$ nodos, excepto RKF45 que solamente utiliza $N = 4$ 112
- 3.30. Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método RKF45 para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 95 pasos de tiempo elegidos por el método, usando la fuente $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$ 114
- 3.31. Regiones de A-Estabilidad de los diferentes métodos utilizados para la integración de la parte temporal. 116
-

Introducción

“Los científicos estudian la naturaleza no porque sea útil, sino porque encuentran placer en ello, y encuentran placer porque es hermosa. Si no lo fuera, no merecería la pena conocerla, y si la naturaleza no mereciera la pena, la vida tampoco.”
- Henry Poincaré.

A lo largo de la historia, las matemáticas han experimentado una constante evolución. En los primeros años de la humanidad, los problemas matemáticos se centraban en cuestiones básicas de conteo, como determinar la cantidad de tierras disponibles para el cultivo, el número de cabezas de ganado o las bolsas de arroz y maíz que se poseían. Estas eran las preocupaciones fundamentales de aquellos tiempos, donde las matemáticas contribuían al desarrollo de la vida cotidiana y la organización social.

Sin embargo, a medida que la humanidad ha avanzado y superado obstáculos, nuestras inquietudes y dificultades matemáticas han evolucionado en complejidad y cantidad. Hoy en día, nos enfrentamos a desafíos mucho más intrincados y diversos. Nuestro interés se ha expandido hacia el estudio y la aplicación de las matemáticas en campos tan variados como la predicción del clima, la comprensión de las corrientes marinas, el análisis de los movimientos de las placas tectónicas y el estudio de los objetos cercanos a la Tierra (NEOs¹ [[CNEOS, 2022](#)]), por mencionar algunos.

En la naturaleza, los fenómenos físicos son el resultado de la interacción compleja de diversas fuerzas y variables. Desde el movimiento de los planetas en el sistema solar hasta el flujo de agua en un río. Estos fenómenos exhiben patrones y comportamientos que pueden ser capturados y estudiados mediante el uso de ecuaciones diferenciales.

Las ecuaciones diferenciales son una poderosa herramienta matemática que nos permite comprender y predecir el cambio y la evolución de las funciones en relación con otras funciones o variables. Dentro de estas ecuaciones se expresa la *tasa de cambio* de una función dependiente (función de interés) respecto de una o más variables independientes. En cálculo diferencial, esta “tasa de cambio” se conoce como *derivada*. Si la función de interés depende de una sola variable, la ecuación diferencial tendrá únicamente derivadas totales. Por otro lado, si la función depende de más variables, entonces la ecuación diferencial tendrá derivadas parciales. Además, si el problema tiene dos o más variables dependientes (funciones de interés), se pueden presentar derivadas entre las diferentes variables dependientes [[MathWorld, 2022](#)].

¹Siglas en inglés de “Near-Earth Objects”.

Los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales², junto con sus valores iniciales y condiciones de frontera, constituyen la columna vertebral de los modelos matemáticos que nos permiten describir y entender sistemas continuos en diversas áreas del conocimiento [Hutter, 2004].

La resolución de problemas mediante sistemas de ecuaciones diferenciales es de vital importancia en muchos campos de la ciencia y la ingeniería. Nos brinda la capacidad de comprender y analizar el comportamiento de diversos fenómenos físicos presentes en la naturaleza, permitiendo predecir el comportamiento de sistemas complejos y entender las interacciones fundamentales que moldean nuestro entorno. Esta comprensión profunda y detallada de los fenómenos proporciona una base sólida para la toma de decisiones en una amplia variedad de áreas. Además, nos capacita para proponer soluciones innovadoras y eficientes a problemas prácticos y aplicaciones tecnológicas. Esto, a su vez, juega un papel crucial en el impulso del desarrollo y progreso de la sociedad en general.

Dentro de los fenómenos que pueden ser modelados mediante sistemas de ecuaciones diferenciales, encontramos una diversidad de casos de estudio fascinantes. Algunos ejemplos notables son el estudio de campos eléctricos y magnéticos, la vibración de estructuras de diversa índole, el análisis de fenómenos sísmicos, el flujo de agua subterránea, la turbulencia en fluidos y las interacciones entre fluidos y estructuras. Estos fenómenos, junto con muchos otros, desempeñan un papel esencial en nuestra comprensión del mundo físico y encuentran aplicaciones en disciplinas como la física teórica, la ingeniería civil, la oceanografía y la aerodinámica.

Obtener una **solución analítica** para estos sistemas de ecuaciones diferenciales es generalmente un desafío considerable y, en muchos casos, incluso imposible. Esto se debe en gran medida al elevado número de grados de libertad que presentan estos sistemas. Además, es común encontrarse con ecuaciones **no lineales**, **acoplamientos** entre las ecuaciones y, en la actualidad, problemas que combinan ambas características. Sumado también a las no linealidades que pueden presentarse en el dominio y en las condiciones de frontera. Por esta razón, en ocasiones resulta más práctico y conveniente utilizar **métodos numéricos** para obtener una aproximación de la solución de estos sistemas. Es importante destacar que los métodos numéricos han experimentado un constante desarrollo y optimización, lo cual ha permitido obtener soluciones más precisas en tiempos de cómputo más reducidos. También es notable la capacidad de los ordenadores actuales para abordar problemas cada vez más complejos, gracias al constante avance y optimización tecnológica.

Algunos de los métodos numéricos más populares para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales son:

- Método de la Ecuación Integral (IEM³) [Na, 1980].
- Método de los Elementos Finitos (FEM⁴) [Gockenbach, 2006].
- Método de Diferencias Finitas (FDM⁵) [LeVeque, 2007].

²También conocidos como sistemas simultáneos de ecuaciones.

³Siglas en inglés de “Integral Element Method”.

⁴Siglas en inglés de “Finite Element Method”.

⁵Siglas en inglés de “Finite Differences Method”

A partir del último mencionado en la lista, se logra una generalización que da lugar al **Método de Diferencias Finitas Generalizadas** (GFDM⁶) [Li et al., 2018, Chávez-Negrete et al., 2018], el cual será utilizado para abordar distintos problemas en el presente trabajo de investigación.

En este trabajo, se resuelven varios problemas relacionados con la convección natural y la difusión. Entre ellos, se destacan los problemas conocidos como **flujo de agua subterránea**⁷, que incluyen el problema de Elder [Elder, 1967, Elder et al., 2017] y el problema de Henry [Cooper Jr. et al., Henry, 1960]. Además, se resolvió el desafiante problema de **convección natural difusiva doble en un medio poroso saturado** (CNDD-MPS) en dos dimensiones.

Estos problemas presentan retos significativos en la obtención de soluciones numéricas debido a su naturaleza no lineal y la presencia de acoplamientos entre las ecuaciones. La resolución exitosa de estos desafíos es esencial para lograr una comprensión precisa y una predicción adecuada del comportamiento del flujo de agua en el subsuelo. A través de este estudio, se busca contribuir al avance del conocimiento en el campo de la convección natural y la difusión, proporcionando nuevas perspectivas y soluciones numéricas efectivas para estos problemas complejos.

Para resolver este problema, diversos autores han utilizado diferentes métodos numéricos. En el estudio de [Bourich et al., 2004], se emplean diferencias finitas centradas para la discretización espacial y el método de direcciones alternas implícitas (ADI⁸) para la discretización temporal. Además, se utiliza el método de sobre-relajación sucesiva (SOR⁹) para calcular la función de flujo. Por otro lado, los autores de [Costa, 2004] adaptan una versión bidimensional laminar del método de elementos finitos basado en el volumen de control para obtener la solución. En [Fan et al., 2013], se combina el método de colocación de funciones de base radial (LRBFCM¹⁰) para la discretización espacial con un algoritmo de homotopía escalar exponencialmente convergente (ECSHA¹¹) para la discretización temporal. En contraste, [Li et al., 2018] emplea un esquema de GFDM diferente al propuesto en este trabajo para la discretización espacial, complementado con el método de Newton-Raphson.

En este estudio, se implementa un esquema de GFDM distinto al presentado en [Li et al., 2018], cuyos detalles completos se describen en la sección 2.4. GFDM ha demostrado su robustez al abordar una variedad de problemas en diferentes estudios. Por ejemplo, en [Chávez-Negrete et al., 2018] se resolvió la ecuación de Richards, que modela el flujo de agua subterránea, en la geometría de una presa utilizando GFDM. En [Tinoco-Guerrero et al., 2022], se presentaron diversos ejemplos de la ecuación de difusión en regiones irregulares, donde se utilizó un método de líneas para resolver la parte temporal del problema. Asimismo, el problema de Motz, ampliamente reconocido para evaluar métodos numéricos de solución de ecuaciones diferenciales, fue resuelto en [Chávez et al., 2021]. En [Tinoco-Guerrero et al., 2018], se resolvió la ecuación de advección en dos regiones irregulares diferentes, empleando un método de líneas para la parte temporal del problema. Existen numerosos casos más en los que se ha implementado el esquema de GFDM, obteniendo resultados satisfactorios en cada uno de ellos.

⁶Siglas en inglés de “Generalized Finite Differences Method”.

⁷En inglés son mejor conocidos como “Groundwater Flow Problems”.

⁸Siglas en inglés de “Alternating Direction Implicit method”.

⁹Siglas en inglés de “Successive Over-Relaxation”.

¹⁰Siglas en inglés de “Local Radial-Basis-Function Collocation Method”.

¹¹Siglas en inglés de “Exponentially Convergent Scalar Homotopy Algorithm”.

Para la solución numérica de los problemas mencionados anteriormente, se empleó el lenguaje de programación python [Van Rossum et al., 2007], en conjunto con varias librerías. A continuación, se presenta una lista de algunas de las librerías utilizadas:

- numpy [Harris et al., 2020]: Una librería de Python ampliamente utilizada para realizar cálculos numéricos y operaciones matemáticas en arreglos multidimensionales. Proporciona una amplia gama de funciones y operadores eficientes para manipular y analizar datos numéricos.
- scipy [Virtanen et al., 2020]: Una librería de Python que se basa en NumPy y proporciona funcionalidades adicionales para la computación científica y técnica. Contiene módulos para optimización, álgebra lineal, procesamiento de señales, estadística y más.
- matplotlib [Barrett et al., 2005, Hunter, 2007, Ari and Ustazhanov, 2014]: Una librería de visualización de Python que se utiliza para crear gráficos y visualizaciones de datos. Proporciona una interfaz similar a MATLAB y permite crear gráficos de alta calidad en diferentes formatos.
- calfem-python [Edholm, 2013, Forsman, 2017]: Una librería de Python que se utiliza para el análisis y la simulación de problemas de mecánica estructural y de elementos finitos. Proporciona funciones y herramientas para resolver problemas de elasticidad lineal, transferencia de calor, dinámica estructural y otros fenómenos físicos, utilizando el método de elementos finitos. En este trabajo fue utilizada para la discretización del dominio en mallas triangulares.

Estructura de la tesis

En el *capítulo 1* se realiza una descripción detallada de los problemas que resolvimos en este trabajo, con el fin de comprender mejor el comportamiento físico descrito por las ecuaciones diferenciales que definen dichos problemas.

En el *capítulo 2* se explican los conceptos básicos para comprender el esquema de GFDM propuesto e implementado para resolver los problemas planteados. Además, se proporciona una breve explicación del método de diferencias finitas clásicas (FDM), a partir del cual se deduce el método de diferencias finitas generalizadas (GFDM).

Los detalles de la implementación del esquema de GFDM propuesto, así como las soluciones obtenidas a los problemas, se presentan en el *capítulo 3*. Sobre todo se hace un análisis a detalle para poder entender el planteamiento de las condiciones de frontera, y se presentan diferentes ejemplos para comprender mejor el comportamiento de la solución, además de demostrar las capacidades del esquema de GFDM propuesto.

Por último, se presenta un capítulo dedicado a las conclusiones planteadas y al trabajo futuro que se desea realizar, enfatizando las posibilidades de extender las capacidades del esquema GFDM utilizado.

Nota: Todos los códigos desarrollados para la solución de los diferentes problemas presentados en este trabajo son de acceso abierto y están disponibles en el repositorio de GitHub: [RicardoRG73/TesisDoctorado](#).

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Capítulo 1

Descripción del problema

“La belleza de las matemáticas sólo se muestra a sus seguidores más pacientes.”
- Maryam Mirzakhani.

En este capítulo, exploraremos algunos de los fundamentos para comprender el problema conocido como Convección Natural Difusiva Doble en un Medio Poroso Saturado (CNDD-MPS). Se presentarán de manera concisa algunos conceptos fundamentales esenciales para entender estos fenómenos. Además, se abordarán brevemente las constantes principales que influyen en este tipo de fenómenos, junto con las ecuaciones gobernantes que rigen estos problemas. Estas ecuaciones, como su nombre indica, son las que gobiernan el comportamiento físico del problema en cuestión.

También se proporcionará una descripción de los conocidos **problemas de flujo de agua subterránea**, los cuales comparten notables similitudes con el problema de CNDD-MPS. Estos problemas comprenden el problema de Henry y el problema de Elder. Ambos describen fenómenos de transporte de agua salada hacia el interior de un dominio saturado con agua dulce. Estos problemas ofrecen perspectivas valiosas para comprender los aspectos fundamentales del flujo subterráneo y brindan un contexto esencial para abordar los desafíos asociados con el problema de CNDD-MPS.

Estos problemas (Henry, Elder, CNDD-MPS) presentan un potencial significativo para investigar la vulnerabilidad y explotación de acuíferos. Al analizar detalladamente el comportamiento del flujo de agua subterránea en situaciones como las planteadas en el problema de Henry y el problema de Elder, se puede obtener información valiosa sobre cómo ciertos factores pueden afectar la calidad y cantidad del agua subterránea. Este conocimiento es esencial para evaluar la sostenibilidad de los acuíferos y desarrollar estrategias efectivas para su gestión.

Al comprender en profundidad el movimiento del flujo subterráneo en estos contextos específicos, se obtienen perspectivas clave sobre la dinámica de los sistemas acuíferos. Este conocimiento contribuye a mejorar la predicción de impactos ambientales y establece las bases para políticas y prácticas de gestión más informadas y adaptativas en relación con los recursos hídricos subterráneos.

1.1. Conceptos básicos

Antes de comenzar el estudio de los fenómenos que nos ocupan, es esencial establecer una comprensión clara de algunos conceptos básicos. Estos conceptos nos proporcionarán una base sólida para entender mejor los aspectos fundamentales relacionados con dichos fenómenos. Al familiarizarnos con estos conceptos clave, estaremos mejor preparados para explorar y analizar los problemas propuestos de manera más práctica y concreta, lo que nos permitirá obtener una visión más precisa de su funcionamiento y características.

1.1.1. Grupos adimensionales

En las ecuaciones gobernantes de los problemas que nos interesan, encontramos algunas constantes que describen las relaciones existentes entre las diferentes fuerzas presentes en el fenómeno; así como las relaciones entre las propiedades físicas de los materiales.

Los grupos adimensionales son herramientas matemáticas que nos permiten simplificar las ecuaciones y expresar las relaciones entre las variables físicas del problema de manera más general. Esta técnica se conoce como *Análisis Dimensional* y resulta especialmente útil para la escalabilidad de modelos. Si los grupos adimensionales inherentes al fenómeno en estudio se mantienen constantes al escalar los modelos, entonces los modelos en diferentes escalas exhibirán comportamientos muy similares [Fox et al., 1995].

Algunos de estos grupos adimensionales se describen a continuación.

Número de Lewis

El número de Lewis (Le) correlaciona la *difusión de masa* D con la *conductividad térmica* α de un fluido, y se define como

$$Le = \frac{D}{\alpha},$$

donde la interpretación física se refiere a la relación entre el transporte de la concentración de algún componente en el fluido (D) y el transporte de calor debido a la **conducción** dentro del mismo (α),

$$Le = \frac{\text{transporte de masa}}{\text{transporte de calor}}.$$

El número de Lewis es una constante intrínseca del fluido, la cual varía según el material del que esté compuesto. Algunos valores del número de Lewis, de fluidos comunes, se muestran en la Tabla 1.1 [Rapp, 2022].

Fluido	Le
Metanol	127.13
Tolueno	95.55
Etanol	164.47
Glicerol	108.97
Agua	95.55

Tabla 1.1: Valores del número de Lewis para algunos fluidos comunes [Rapp, 2022].

Número de Prandtl

Dentro de los fluidos, ocurren dos procesos de transferencia de calor: la conducción y la convección. Ambos mecanismos compiten en el transporte de calor, siendo impulsados por los gradientes de temperatura presentes en el fluido. El número de Prandtl Pr es un parámetro clave que define cuál de los dos procesos tiene una mayor influencia.

Este número fue nombrado en honor a su inventor, el ingeniero alemán Ludwig Prandtl (1875-1953), quien también es conocido por identificar el concepto de capa límite en la mecánica de fluidos [Anderson, 2005, Prandtl, 1923].

Este número relaciona la *viscosidad cinemática* ν de un fluido con su *conductividad térmica* α , y se define como

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu}{\rho\alpha} = \frac{\mu c_p}{k},$$

donde la difusividad térmica está dada por

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p},$$

y la viscosidad cinemática por

$$\nu = \frac{\mu}{\rho},$$

donde k es la conductividad térmica, c_p es el calor específico, ρ es la densidad, y μ es la viscosidad dinámica [Rapp, 2022, Xie, 2023]. La interpretación física es la relación que hay entre el transporte de momento y el transporte de calor,

$$Pr = \frac{\text{transporte de momento}}{\text{transporte de calor}}.$$

Cuando la viscosidad del fluido es alta, el transporte de momento también es alto. En otras palabras, en un flujo laminar, la velocidad de una capa afecta de manera más significativa a la velocidad de la capa siguiente. Por otro lado, si el transporte de calor es alto, la conducción de temperatura también lo es. Este número nos indica si hay un mayor transporte de velocidad en el flujo (transporte de momento) o un mayor transporte de calor por conducción.

Número de Grashof

Nombrado en honor a Franz Grashof (1826-1893), quien fue profesor de mecánica aplicada en la ciudad de Karlsruhe y uno de los fundadores de la “Verein Deutscher Ingenieure” (Asociación de Ingenieros Alemanes) en 1856. El número de Grashof representa la relación entre las fuerzas de flotabilidad y las fuerzas viscosas en un sistema. Este número se utiliza para determinar el régimen de flujo de una capa límite en sistemas laminares. Para un fluido compresible, el número de Grashof Gr se define como

$$Gr = \frac{gL_c^3 \Delta \rho}{\mu^2} = \frac{(\text{fuerza de inercia})(\text{fuerza flotante})}{(\text{fuerza viscosa})},$$

o como

$$Gr = \frac{gL_c^3 \Delta \rho}{\nu^2 \rho} \quad \text{Grashof para fluidos compresibles,}$$

donde g es la aceleración de la gravedad, L_c es la longitud característica que generalmente se encuentra en la dirección vertical, ya que es en esta dirección donde ocurre la flotabilidad. El número Gr se vuelve importante cuando el número de Reynolds Re es bajo ($Re < 2100$). Un número Gr de aproximadamente 4×10^8 señala el umbral entre una capa límite laminar (Gr menor) y una capa límite turbulenta (Gr mayor).

En fluidos en los que se pueden considerar como incompresibles, la definición del número Gr puede simplificarse reemplazando la diferencia de densidad $\Delta \rho$ por la diferencia de temperatura ΔT y multiplicada por el coeficiente de expansión térmica β_T , quedando entonces como

$$Gr = \frac{gL_c^3 \beta_T \Delta T}{\nu^2} \quad \text{Grashof para fluidos incompresibles,}$$

donde el coeficiente de expansión térmica se expresa como

$$\beta_T = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T},$$

el cual representa el cambio en el volumen causado por una variación en la temperatura $\frac{\partial V}{\partial T}$.

Los valores de β_T son usualmente del orden de 10^{-4} a $10^{-3} K^{-1}$ para muchos líquidos [Bird et al., 2015, Smith et al., 2013]. Debido al gradiente de temperatura, se genera un gradiente de densidad, lo cual resulta en las fuerzas de flotabilidad. Por otro lado, la viscosidad actúa como fricción, oponiéndose a la flotabilidad. Por lo tanto, un número de Grashof grande indica una mayor fuerza de flotación, mientras que un número de Grashof pequeño indica una mayor viscosidad. El gradiente de densidad también puede originarse a partir de un gradiente de concentración en el fluido.

Número de Rayleigh

El número de Rayleigh lleva el nombre de John William Strutt (1842-1919), tercer barón de Rayleigh. Lord Rayleigh fue un físico británico que realizó importantes contribuciones en el campo

de la óptica y la acústica. Fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1904 por su trabajo sobre los gases y el descubrimiento del argón [Strutt et al., 2005].

El número de Rayleigh Ra se interpreta como la relación entre las fuerzas gravitacionales y las fuerzas generadas por la difusión térmica. Este número se utiliza en condiciones de flujo laminar para determinar la naturaleza de la capa límite, de manera similar al número de Grashof Gr . Se obtiene comparando el flujo de calor por convección dado por $\beta_T g \Delta T^2 L_c^2 / \nu$ con el flujo de calor por conducción expresado como $\alpha \Delta T / L_c$. En consecuencia, el número de Rayleigh está definido como

$$Ra = \frac{\text{flujo de calor por convección}}{\text{flujo de calor por conducción}} = \frac{\beta_T g \Delta T^2 L_c^2 / \nu}{\alpha \Delta T / L_c} = \frac{\beta_T g \Delta T L_c^3}{\nu \alpha} = Gr \cdot Pr.$$

Cuando el Ra es pequeño, las fuerzas de difusión térmica dominan, y el flujo tiende a ser laminar y ordenado. En este caso, el transporte de calor se produce principalmente a través de la conducción térmica. A medida que el Ra aumenta, las fuerzas gravitacionales se vuelven más significativas y se producen corrientes de convección más intensas. En valores elevados de Ra , el flujo puede volverse turbulento con la formación de estructuras más complejas y caóticas.

Es particularmente relevante en situaciones de convección natural, donde los fluidos se mueven debido a las diferencias de densidad causadas por gradientes de temperatura, siendo especialmente útil para prever la transición entre flujos laminar y turbulento en la transferencia de calor por convección.

Un número de Rayleigh Ra de aproximadamente 1×10^9 marca el umbral de una capa límite en flujo laminar (Ra menor) y una capa límite en flujo turbulento (Ra mayor) [Cushman-Roisin and Beckers, 2011, Smith et al., 2013].

Tasa de Flotabilidad (Buoyancy Ratio)

La tasa de flotabilidad, representada por la constante N , se emplea comúnmente en la caracterización de problemas de Difusión Doble. Llamados así debido a que estos problemas modelan de manera simultánea la difusión de la temperatura T del fluido y la difusión de la concentración C de algún compuesto en el interior del fluido.

La tasa de flotabilidad N se define como el cociente entre el número de Rayleigh de concentración Ra_C y el número de Rayleigh térmico Ra_T . Así, la tasa de flotabilidad N queda definida como

$$N = \frac{Ra_C}{Ra_T} = \frac{\beta_C \Delta C}{\beta_T \Delta T},$$

donde los números de Rayleigh están dados por

$$Ra_C = \frac{\beta_C g \Delta C L_c^3}{\nu \alpha},$$

$$Ra_T = \frac{\beta_T g \Delta T L_c^3}{\nu \alpha},$$

donde β_T y β_C son los coeficientes de expansión térmica y de concentración, respectivamente. El término β_T determina la expansión causada por el gradiente de temperatura, mientras que β_C describe la expansión provocada por el gradiente de concentración [Trevisan and Bejan, 1985].

Una forma alternativa de interpretarlo es como la relación entre las fuerzas de flotabilidad generadas por el soluto y las fuerzas de flotabilidad térmica. Este parámetro puede adoptar valores positivos o negativos según los coeficientes de expansión térmica β_T y de concentración β_C . Si el signo es negativo, indica que estas fuerzas actúan en direcciones opuestas; mientras que un signo positivo implica una combinación de los efectos de flotabilidad [Costa, 2004].

1.1.2. Ley de Darcy

La ley de Darcy recibe su nombre en honor al ingeniero francés Henry Darcy (1803-1858). En 1856, Darcy fue responsable de estudiar la red de abastecimiento de agua en la ciudad de Dijon, Francia. Además, lideró el diseño de filtros de arena para la purificación del agua. Este contexto lo llevó a investigar el flujo de agua a través de materiales arenosos.

En la actualidad, se emplean dispositivos llamados *permeámetros de carga constante*, que guardan similitud con los dispositivos que Darcy utilizaba en su época. El esquema de uno de estos dispositivos se presenta en la Figura 1.1. Este sistema incorpora un depósito elevado con un nivel constante que suministra agua al recipiente contenedor del material arenoso. Al circular agua a través del material poroso saturado, se mide la diferencia de presión (altura piezométrica) Δh en una longitud determinada Δl del material.

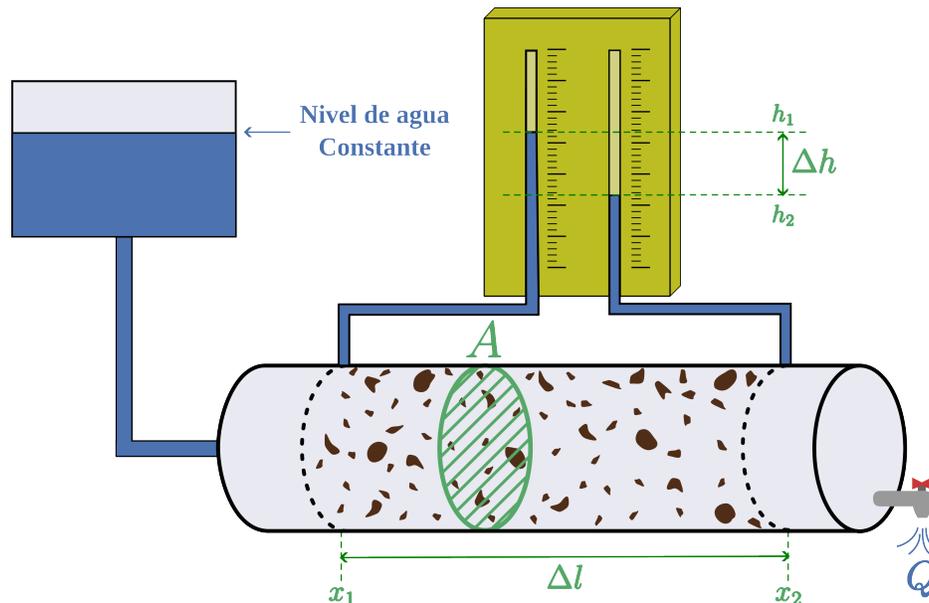


Figura 1.1: *Permeámetro de carga constante, utilizado para obtener la permeabilidad de materiales porosos saturados empleando la ley de Darcy.*

Darcy comprobó que el caudal Q que se hace circular a través del material poroso saturado es

proporcional al área A y a la diferencia de altura Δh dividida por la longitud Δl , tal que

$$Q = kA \frac{\Delta h}{\Delta l},$$

donde la constante k es conocida como *permeabilidad* o *conductividad hidráulica*, y representa una propiedad intrínseca de cada tipo de material. En la actualidad, la ley de Darcy se expresa de la siguiente manera:

$$q = -k \frac{dh}{dl},$$

donde q representa el caudal dividido por el área transversal, es decir, $q = \frac{Q}{A}$, mientras que $\frac{dh}{dl}$ denota el gradiente hidráulico (a veces también llamado gradiente de carga hidráulica o gradiente de presión) en una dimensión. La presencia del signo negativo se debe a que el flujo ocurre en la dirección del descenso del gradiente. La ley de Darcy puede ser expresada de manera vectorial de la siguiente forma

$$q = -\mathbf{K} \cdot \nabla h.$$

En dos dimensiones, tenemos el vector de conductividad hidráulica $\mathbf{K} = K_x \hat{\mathbf{i}} + K_y \hat{\mathbf{j}}$ y el gradiente de presión $\nabla h = \frac{\partial h}{\partial x} \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial h}{\partial y} \hat{\mathbf{j}}$, donde el operador ∇ se define como $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mathbf{j}}$ [Sánchez San Román, 2023].

1.1.3. Función de Flujo

La función de flujo $\Psi = \Psi(x, y)$ define un flujo potencial, mediante la cual se puede representar el campo de velocidades, con la condición de que sea un flujo irrotacional y que sea un fluido incompresible [UNAM, 2023]. Ψ es constante a lo largo de una línea de flujo (línea de contorno). Entonces el flujo puede ser representado por una serie de líneas de flujo a incrementos iguales de Ψ (líneas de contorno), al igual que las curvas de nivel en un mapa topográfico.

Para ver de donde surge consideremos el esquema mostrado en la Figura 1.2. Considerando el punto fijo en el plano A (usualmente en el origen) y cualquier punto en el plano P se tiene una cierta cantidad de flujo que cruza la curva AP . Si se traza un punto P' en la misma dirección del flujo entonces el flujo que pasa por la curva AP' es el mismo que pasa por AP . Ahora si se considera otro punto P'' tal que PP'' es una distancia pequeña δn perpendicular a la línea de flujo en P , y $AP'' > AP$. El flujo que hay en AP'' es mayor que el que pasa por AP por un incremento $\delta\Psi$ que pasa por PP'' . Si la velocidad promedio perpendicular a δn es v , entonces $\delta\Psi = v\delta n$, y como $\delta n \rightarrow 0$ entonces

$$v = \frac{\partial \psi}{\partial n}.$$

La dirección positiva de la velocidad normal a una línea es obtenida girando 90° en dirección anti-horaria, respecto a la dirección en que la línea incrementa su longitud. Entonces se pueden

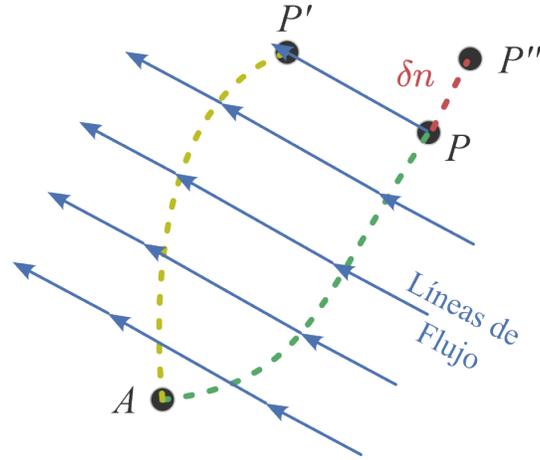


Figura 1.2: Flujo en las curvas AP y AP' .

obtener las expresiones para las componentes de la velocidad v_x y v_y como [Massey and Ward-Smith, 1998]

$$v_x = +\frac{\partial\Psi}{\partial y},$$

$$v_y = -\frac{\partial\Psi}{\partial x}.$$

En la resolución de problemas de flujo bidimensional o flujo plano de un fluido incompresible, a veces es conveniente expresar la velocidad en función de la función de flujo [Landau and Lifshitz, 2013].

1.2. Problemas de flujo de agua subterránea

Los problemas de flujo de agua subterránea, como su nombre indica, modelan el comportamiento del agua en el subsuelo. Específicamente, estudian las velocidades de flujo utilizando la *función de flujo* Ψ para representarlas como un campo potencial. Al mismo tiempo, examinan el transporte de *concentración* C o *temperatura* T , ya que la difusión de masa y la difusión de calor se comportan de manera similar. Estos problemas se describen mediante sistemas de ecuaciones diferenciales parciales. La dificultad en su resolución radica en que son ecuaciones **no lineales** y están **acopladas**.

En el estudio de los flujos de agua subterránea, existen dos problemas de referencia principales: el problema de Henry [Henry, 1960, Henry, 1964a] y el problema de Elder [Elder, 1967, Elder et al., 2017]. A continuación, se describen estos problemas en detalle.

1.2.1. Problema de Henry

El problema de Henry lleva ese nombre en honor a Harold R. Henry, quien en 1960 estaba estudiando la interfaz entre agua salada y agua dulce en acuíferos costeros [Henry, 1960]. En años posteriores, también continuó su trabajo en relación con la intrusión de agua salada en este tipo de acuíferos [Henry, 1964a, Henry, 1964b]. El problema de Henry modela la intrusión de agua salada del mar en un manto acuífero de agua dulce. Específicamente, analiza una sección transversal rectangular de este acuífero costero, donde la frontera derecha tiene contacto directo con el agua salada del mar. Un esquema representativo del problema de Henry se puede observar en la Figura 1.3.

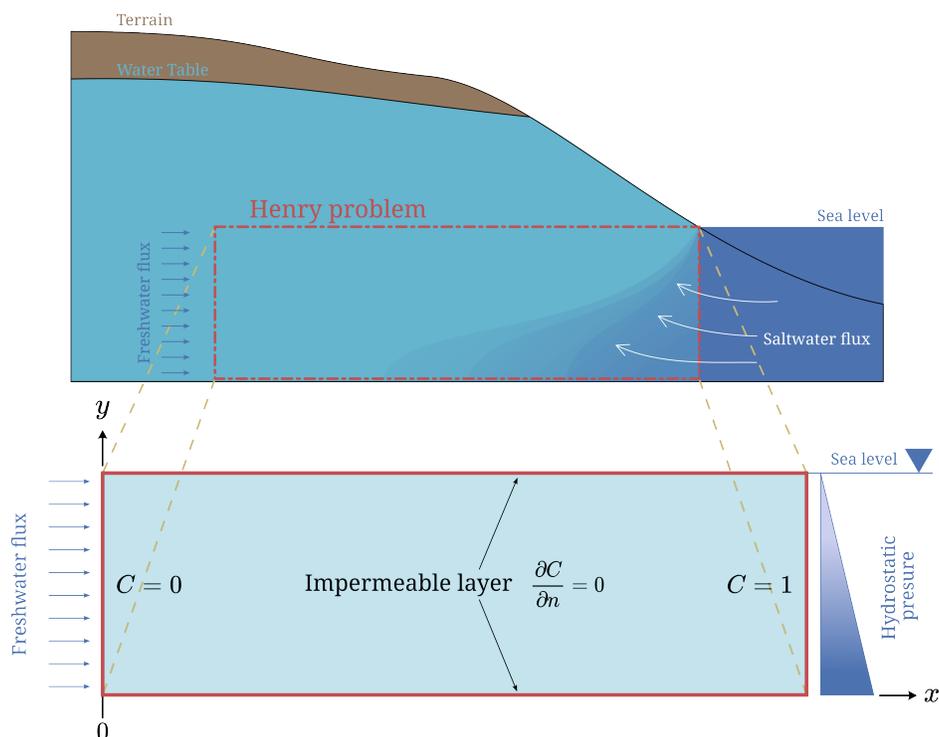


Figura 1.3: Esquema representativo del problema de Henry.

Este problema modela un acuífero costero en el que un flujo constante de agua dulce hacia el océano limita la intrusión de agua salada. Se asume que no existe difusión entre el agua dulce y el agua salada, lo que genera una interfaz bien definida. El flujo se analiza en dos dimensiones bajo condiciones estacionarias. La ubicación de esta interfaz es crucial para el uso práctico del agua subterránea, ya que el flujo de agua dulce hacia el mar es esencial para prevenir una mayor infiltración de agua salada en el acuífero. Se han desarrollado soluciones exactas para determinar la posición de la interfaz en diversas condiciones de contorno, partiendo de la suposición de un flujo constante, sin mezcla entre el agua dulce y la salada, y sin tensión interfacial.

Los primeros estudios [Badon-Ghyben, 1889, Herzberg, 1901] abordaron el fenómeno de la intrusión salina como un problema de flotabilidad, donde el agua dulce estática flota sobre el agua salada, que es más densa. Este enfoque se basa en la suposición de que las condiciones hidrostáticas

se aplican verticalmente bajo un punto de observación del nivel piezométrico del agua dulce [Henry, 1960].

La extensión de la intrusión de agua de mar y la ubicación de la zona de agua salobre son factores significativos para determinar el uso del agua subterránea en áreas costeras. Utilizando una descripción de las condiciones en la interfaz en términos del potencial de velocidad del agua dulce, [Hubbert, 1940] estableció las condiciones de contorno en esta interfaz [Henry, 1964a].

La Figura 1.4 presenta una simulación obtenida por Henry de las líneas de concentración de agua salada en Cutler, una zona costera cerca de Miami, Florida. Muestra las isocloras del 18 de septiembre de 1958 y las interfaces calculadas suponiendo condiciones estables durante las mareas alta, media y baja.

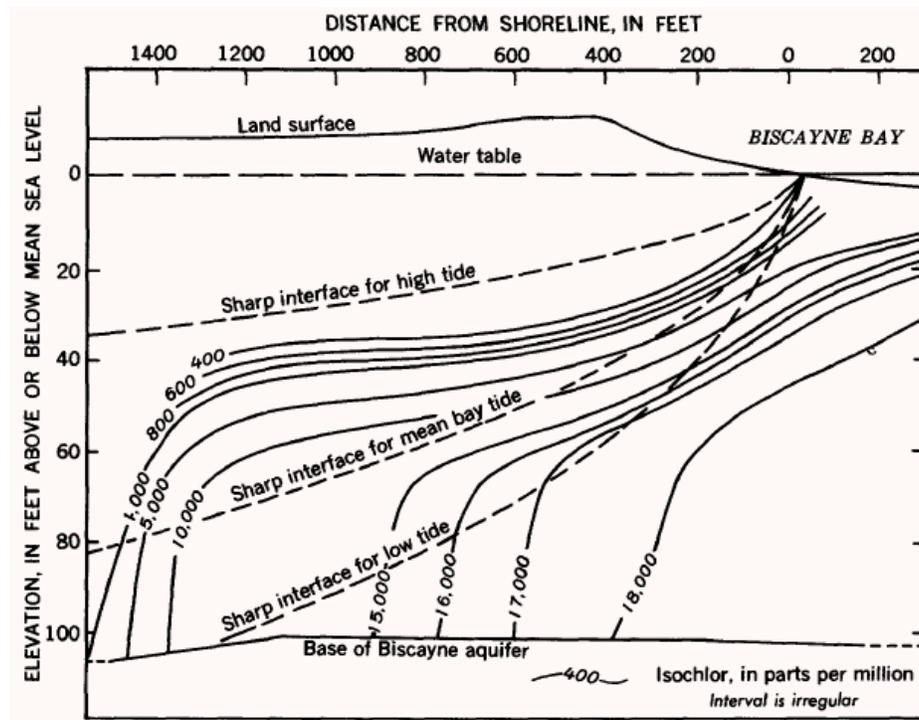


Figura 1.4: Sección a través del área de Cutler cerca de Miami, Florida, que muestra las isocloras del 18 de septiembre de 1958, y las interfaces calculadas suponiendo las condiciones como si fueran estables durante las mareas alta, media y baja.

Las ecuaciones gobernantes que rigen este problema son muy parecidas a las ecuaciones gobernantes del problema de Elder y describen fenómenos similares, aunque con condiciones de frontera muy diferentes. Debido a sus similitudes tanto en las ecuaciones gobernantes como en los fenómenos que modelan, es que estos problemas son conocidos como *problemas de flujo de agua subterránea*. En ambas situaciones, hay un movimiento del fluido, también denominado convección, que está descrito por la función de flujo Ψ . Además, simultáneamente se presenta la difusión de concentración de agua salada $C = 1$ en agua dulce $C = 0$.

Las ecuaciones gobernantes para el problema de Henry son

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = \frac{1}{a} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{1}{b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1.2)$$

donde a representa el parámetro de descarga y b es el inverso del número de Peclet de filtración. El término *parámetro de descarga* generalmente se refiere a un coeficiente o valor que describe la cantidad de agua que fluye a través de una unidad de área y tiempo en un acuífero, a menudo se asocia con la Ley de Darcy modificada para el flujo en acuíferos no confinados.

El número de Peclet es un parámetro adimensional utilizado en el estudio del transporte de solutos en medios porosos. Se define como la relación entre la velocidad de advección y la tasa de difusión. Su valor proporciona información sobre la predominancia de la advección y la difusión en el transporte de sustancias. Cuando $Pe \ll 1$, la difusión domina; cuando $Pe \gg 1$, la advección es predominante; y cuando $Pe \approx 1$, ambos procesos son significativos en el transporte de solutos.

Se puede observar que la ecuación (1.1) define el comportamiento de la función de flujo Ψ . Los dos términos del lado izquierdo de la ecuación pueden expresarse como $\nabla^2 \Psi$, donde el operador ∇ se define como $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mathbf{j}}$, y su cuadrado es $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. Este operador ∇^2 es conocido como el operador laplaciano.

Por otro lado la ecuación (1.2) gobierna el comportamiento de la concentración C , y los dos primeros términos pueden ser expresados como $\nabla^2 C$. El operador laplaciano ∇^2 tiene la propiedad de suavizar las variaciones espaciales de una función. Por esta razón, el término que involucra al laplaciano comúnmente se denomina término de difusión.

Volviendo a la ecuación (1.1), además del término de difusión, también se presenta el término $\frac{\partial C}{\partial x}$, que al trasladarse al lado izquierdo de la ecuación adquiere un signo negativo. Este término actúa como fuente para la función de flujo Ψ , pero también representa la componente en la dirección x del gradiente de la concentración C . Por lo tanto, el gradiente de concentración influirá en las velocidades del flujo, y debido al signo negativo, las velocidades se verán afectadas en la dirección del descenso del gradiente, pero únicamente en la dirección x .

Por otro lado en la ecuación (1.2) se presenta una derivada temporal $\frac{\partial C}{\partial t}$, la cual indica que la concentración C cambiará con el tiempo t acorde al término de difusión $\nabla^2 C$ y a los términos de advección que están entre paréntesis. En este contexto, el término *advección* se refiere al proceso de difusión causado por alteraciones en la velocidad del flujo. Por definición las componentes de la velocidad del flujo están dadas por $v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}$ y $v_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}$, entonces los términos entre paréntesis se pueden escribir como $v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y}$, de aquí se puede interpretar que la concentración en dirección x se verá modificada por la velocidad v_x y la concentración en dirección y se modificará debido al efecto de la velocidad v_y . A este proceso de difusión debido a los cambios en la velocidad de flujo se le llama advección.

Como se había mencionado anteriormente, este problema describe un dominio rectangular dentro de un acuífero de agua dulce. Este dominio está en contacto con agua salada en la frontera derecha $x = 2$, que es donde se presenta la máxima concentración de sal $C = 1$; mientras que

la frontera izquierda $x = 0$ se asume que tienen la concentración mínima $C = 0$. Además, en el dominio se establece un flujo constante de izquierda a derecha, denotado como v_x . Este flujo es el resultado del flujo natural del propio acuífero. Dado que la componente horizontal de la velocidad $v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y}$ es generada por el gradiente vertical de la función de flujo Ψ , se asigna un valor $\Psi = 1$ en la frontera superior $y = 1$ y un valor $\Psi = 0$ en la frontera inferior $y = 0$, con el objetivo de que se genere una velocidad horizontal v_x positiva. Estas condiciones de frontera pueden expresarse como

$$\begin{aligned} \Psi_x(x = 0, y, t) = 0 & \quad , \quad C(x = 0, y, t) = 0, \\ \Psi_x(x = 2, y, t) = 0 & \quad , \quad C(x = 2, y, t) = 1, \\ \Psi(x, y = 0, t) = 0 & \quad , \quad C_y(x, y = 0, t) = 0, \\ \Psi(x, y = 1, t) = 1 & \quad , \quad C_y(x, y = 1, t) = 0. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Las condiciones de frontera (1.3) se pueden observar a detalle en la Figura 1.5.

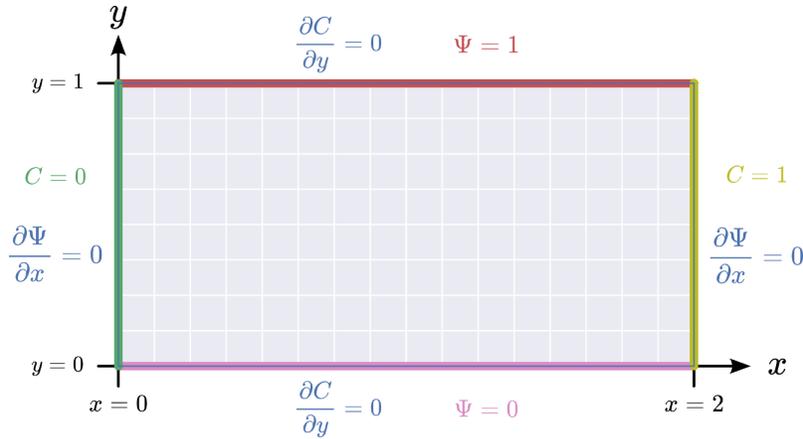


Figura 1.5: Condiciones de frontera del problema de Henry.

Se supone un dominio inicialmente saturado con agua dulce, con lo cual las condiciones iniciales de este problema quedan definidas como [Pinder and Cooper Jr, 1970, Segol et al., 1975, Gotovac et al., 2003]

$$\Psi(x, y, t = 0) = 0, \quad (1.4)$$

$$C(x, y, t = 0) = 0. \quad (1.5)$$

Con las ecuaciones gobernantes del problema (1.1)-(1.2), las condiciones de frontera para la función de flujo Ψ y concentración C (1.3). Así como las condiciones iniciales para ambas funciones (1.4)-(1.5) es posible emplear métodos numéricos para obtener la solución del problema.

1.2.2. Problema de Elder

John W. Elder [Elder, 1967] estaba estudiando la convección libre (térmica) en una celda Hele-Shaw, en el viejo sótano de la Prensa de la Universidad de Cambridge (CUP¹), en el laboratorio de

¹Siglas en inglés de “Cambridge University Press”.

mecánica de fluidos del Departamento de Matemáticas Aplicadas y Física Teórica (DAMTOP²). Este experimento fundó las bases del conocido Problema de Elder, el cual se ha convertido en un punto de referencia para los códigos de modelación de flujos de densidad variable y transporte de masa [Elder et al., 2017].

En el trabajo de [Elder et al., 2017] se presenta un relato histórico autobiográfico y biográfico, referente al nacimiento, evolución y solución del problema de Elder. De este trabajo se tomaron las fotografías mostradas en las Figuras 1.6 y 1.7. En la Figura 1.6 se muestra una fotografía actual de John W. Elder sosteniendo la placa Hele-Shaw de los experimentos que realizó originalmente en el año 1967 en Cambridge [Elder et al., 2017]. En la Figura 1.7 se muestran dos fotografías de las líneas de flujo obtenidas en el experimento que realizó en 1967 [Elder, 1967, Elder et al., 2017].



Figura 1.6: *John W. Elder con la placa Hele-Shaw que utilizó para sus experimentos de 1967 en Cambridge (Fotografía tomada el 5 de enero de 2017) [Elder et al., 2017].*

En la Figura 1.8 se ilustra el esquema del problema. En la parte superior, se muestra el gradiente de temperatura generado dentro de la placa Hele-Shaw al aplicar calor en la zona inferior-central del dominio; mientras que se mantiene la frontera superior a temperatura ambiente. Las demás fronteras están aisladas, lo que puede lograrse mediante el uso de un material aislante, como algún tipo de polímero. En la parte inferior de la Figura 1.8 se representa el Problema de Elder de infiltración. Aquí, se introduce agua salada en la zona superior-central del dominio, lo que resulta en una concentración máxima en esa área. Por otro lado, en la frontera inferior se establece la presencia de agua dulce, lo que lleva a una concentración mínima. Las demás fronteras están aisladas al flujo de concentración. Es importante notar que en la Figura 1.8, las unidades están normalizadas.

El experimento de Elder se planteó inicialmente para temperatura, donde las ecuaciones go-

²Siglas en inglés de “Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics.”

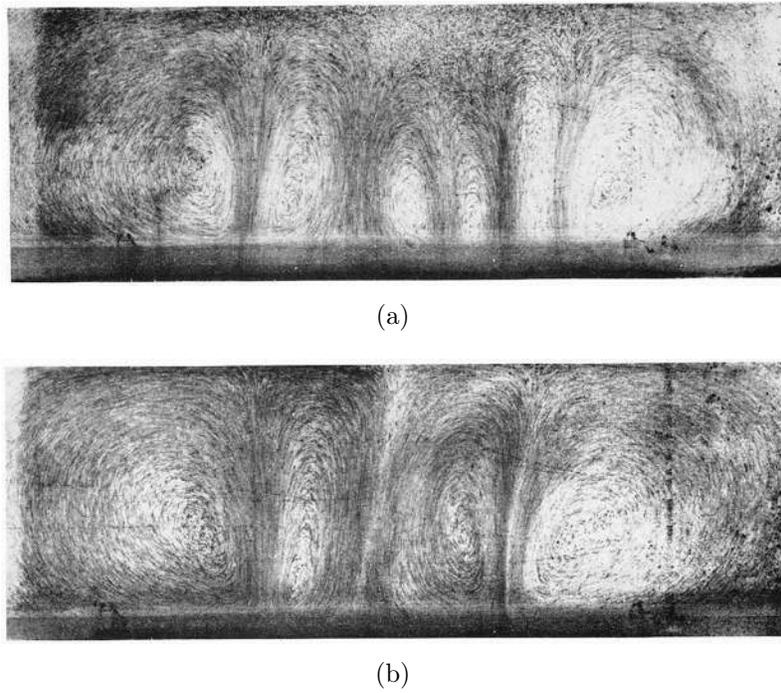


Figura 1.7: Fotografías de las líneas de corriente en la placa de Hele-Shaw de 1967 [Elder, 1967, Elder et al., 2017].

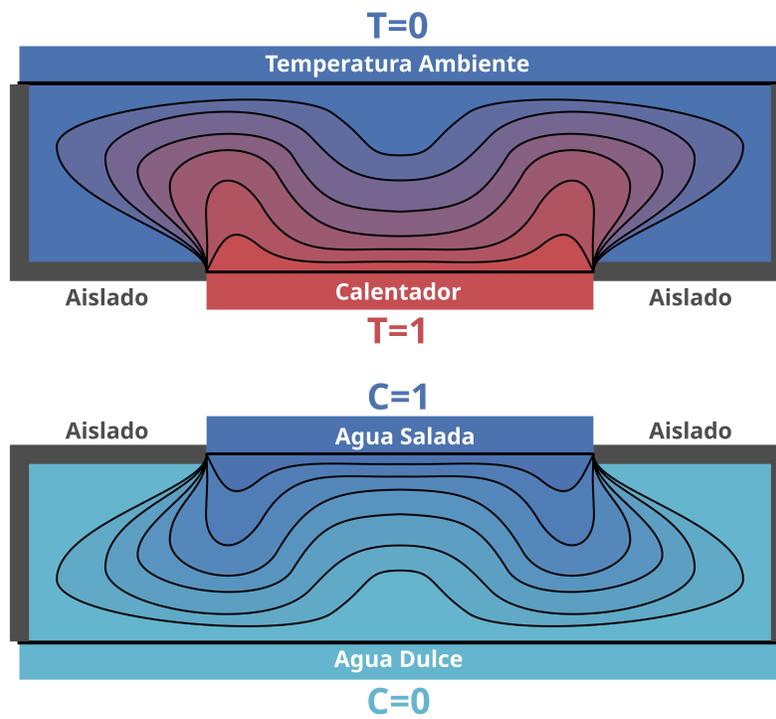


Figura 1.8: Esquema representativo del Problema de Elder.

bernantes propuesta eran³

$$\begin{aligned}\nabla^2\Psi &= RaT_x, & \omega &= RaT_x, \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \nabla^2 T - J(\Psi, \theta),\end{aligned}$$

donde J es el operador jacobiano, la velocidad del flujo es $\mathbf{v} = (-\Psi_y, \Psi_x)$, la vorticidad es $\omega = \nabla \times \mathbf{v} = \hat{\mathbf{k}}\omega$. Las condiciones de frontera se pueden observar en la Figura 1.9(a), donde se nota que el fluido es calentado en la frontera inferior, pero solo en la parte central de dicha frontera. Las condiciones de frontera están dadas por

$$\begin{aligned}\Psi|_{\partial\Omega} &= 0, \\ T|_{\partial\Omega} &= 0, \quad \text{excepto que } T = 1 \quad \text{en} \quad \left(|x| \leq \frac{1}{4}L, y = 0\right),\end{aligned}$$

donde L es la longitud del dominio en dirección x , y $H = \frac{L}{4}$ es la altura del dominio en dirección y [Elder, 1967, Elder et al., 2017].

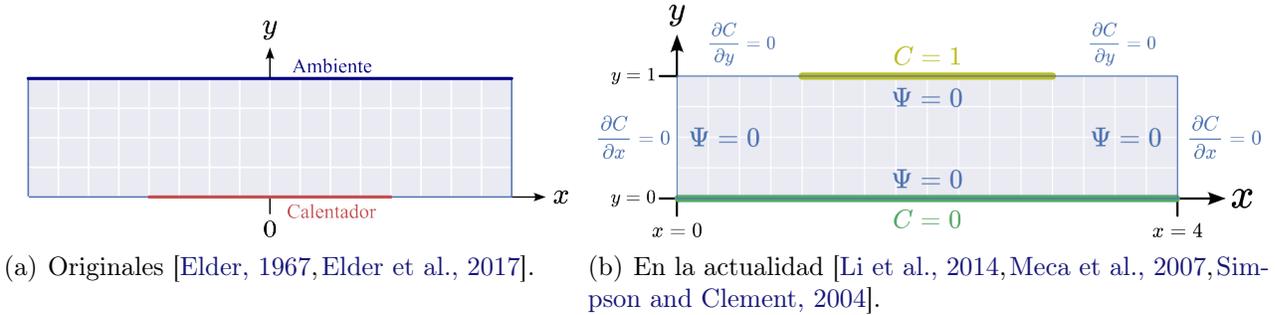


Figura 1.9: Condiciones de frontera del problema de Elder.

Este problema describe el flujo de temperatura T desde la frontera inferior, donde está ubicado el calentador, hacia la superficie más fría en la parte superior de la celda Hele-Shaw. La densidad del fluido será inversamente proporcional a la temperatura, ya que el líquido se expande con el calor. Esto da lugar a un gradiente de densidad que induce el movimiento del fluido, debido a que el líquido de menor densidad flota.

En la actualidad, las ecuaciones que rigen el problema de Elder se expresan en función de la concentración C , en lugar de la temperatura T . Esto permite modelar difusión de masa en lugar de difusión térmica. Además, las condiciones de frontera se reflejan verticalmente, debido a que ahora C representa la concentración de sal, la cual aumenta la densidad del fluido. Esto genera un gradiente en la densidad que provoca el movimiento del fluido, debido al hundimiento del fluido más denso.

Este movimiento inducido por el gradiente en la densidad del fluido, el cual se mencionó que puede ser provocado por un gradiente de temperatura T o de concentración C , se conoce como

³Se utilizó la notación del presente trabajo para describir estas ecuaciones.

convección natural, ya que la fuerza impulsora que induce el movimiento es provocada por las condiciones internas del fluido y no por un agente externo.

Las ecuaciones gobernantes de este problema están definidas por

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = Ra \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (1.7)$$

En la ecuación (1.6), Ra representa el número de Rayleigh. Las condiciones iniciales para la función de flujo y la concentración en el problema son

$$\Psi(x, y, 0) = 0, \quad (1.8)$$

$$C(x, y, 0) = 0, \quad (1.9)$$

respectivamente, lo cual representa que inicialmente el dominio se encuentra saturado con agua dulce y que la velocidad de flujo inicial es cero.

Respecto a las condiciones de frontera, la función de flujo Ψ es igual a 0 en las cuatro fronteras. En cuanto a la concentración C , es 0 en la parte inferior y 1 en la parte central superior. En las demás fronteras, el flujo de concentración es nulo ($\frac{\partial C}{\partial n} = 0$). Pueden observarse las condiciones de frontera con mayor detalle en la Figura 1.9(b) [Li et al., 2014, Meca et al., 2007, Simpson and Clement, 2004].

La ecuación (1.6) describe la difusión de las velocidades dentro del fluido, las cuales se verán modificadas por el término de advección dado por la derivada de la concentración C_x . Por otro lado, la ecuación (1.7) describe la difusión de la concentración, la cual se ve afectada por los términos de advección no lineales. Estos términos hacen referencia al desplazamiento de la concentración con el fluido, siendo este movimiento del fluido dado por la velocidad del flujo $\mathbf{v} = (\Psi_y, -\Psi_x)$. La ecuación (1.7) también tiene la derivada temporal C_t , la cual representa que es un problema no estacionario. Por lo tanto, en cada paso de tiempo, la solución se ve afectada por los términos de difusión y advección mencionados anteriormente.

1.3. Convección Natural Difusiva Doble en un Medio Poroso Saturado

El problema de la Convección Natural Difusiva Doble (CNDD) en un Medio Poroso Saturado (MPS) ha sido utilizado como un punto de referencia para evaluar el comportamiento de diversos métodos numéricos. Como su nombre indica, en este problema ocurre el fenómeno de convección natural, que implica el movimiento del fluido dentro del dominio debido a fuerzas impulsoras creadas por gradientes de densidad, provocados en este caso por gradientes de temperatura T y concentración C . Además, se presenta el fenómeno de difusión, que en este caso es doble, ya que abarca tanto la difusión de temperatura como la de concentración. Los fenómenos de difusión

ocurren de manera simultánea junto con la convección [Khanafer and Vafai, 2002, Costa, 2004, Li et al., 2018].

El estudio de la CNDD-MPS ha recibido considerable atención en diversas áreas. Se han identificado aplicaciones específicas en campos como el procesamiento de alimentos, los sistemas geofísicos, el transporte de contaminantes en aguas subterráneas y el almacenamiento de granos, lo que subraya su relevancia en la investigación y la práctica [Coulter and Güçeri, 1987].

Las aplicaciones de la CNDD se extienden tanto a contextos naturales como tecnológicos. Por ejemplo, este fenómeno es fundamental en el crecimiento de cristales, los sistemas de energía solar, los procesos de soldadura y los aislamientos térmicos, destacando su versatilidad en diferentes sectores [Khanafer and Vafai, 2002, Coulter and Güçeri, 1987, Nishimura et al., 1994, Markham and Rosenberger, 1984, Bergman et al., 1986, Carlsson, 1985].

En el ámbito de la energía solar, la convección natural desempeña un papel crucial en el transporte de energía. Se manifiesta en diversas aplicaciones, como unidades de almacenamiento térmico y colectores solares inclinados, donde su efecto es significativo para el rendimiento del sistema.

Para el diseño de sistemas solares eficientes, es esencial contar con información detallada sobre el movimiento del fluido y la distribución de temperatura. Esta información es clave no solo para el diseño adecuado de los sistemas, sino también para evaluar con precisión las pérdidas de calor y medir el rendimiento global del sistema. Así, la comprensión de la convección natural se convierte en un elemento fundamental para optimizar las aplicaciones en el ámbito de la energía solar [Coulter and Güçeri, 1987].

Las ecuaciones gobernantes que rigen este problema son similares a aquellas que gobiernan los problemas de flujo de agua subterránea. Sin embargo, la diferencia radica en que ahora se considera tanto la difusión de temperatura T como la de concentración C , lo que requiere la incorporación de una ecuación adicional para describir completamente este fenómeno.

Las ecuaciones gobernantes del problema CNDD-MPS son [Li et al., 2018, Fan et al., 2013, Bourich et al., 2004, Costa, 2004]

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + Ra \frac{\partial}{\partial x} (T + NC) = 0, \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - Le \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (1.12)$$

donde Ra es el número de Rayleigh, N es la tasa de flotabilidad, y Le es el número de Lewis.

El dominio computacional de este problema puede verse en la Figura 1.10(a). Por otro lado, las condiciones de frontera pueden observarse detalladamente en la Figura 1.10(b).

Inicialmente se asume que el dominio tiene velocidad cero, además de temperatura y concen-

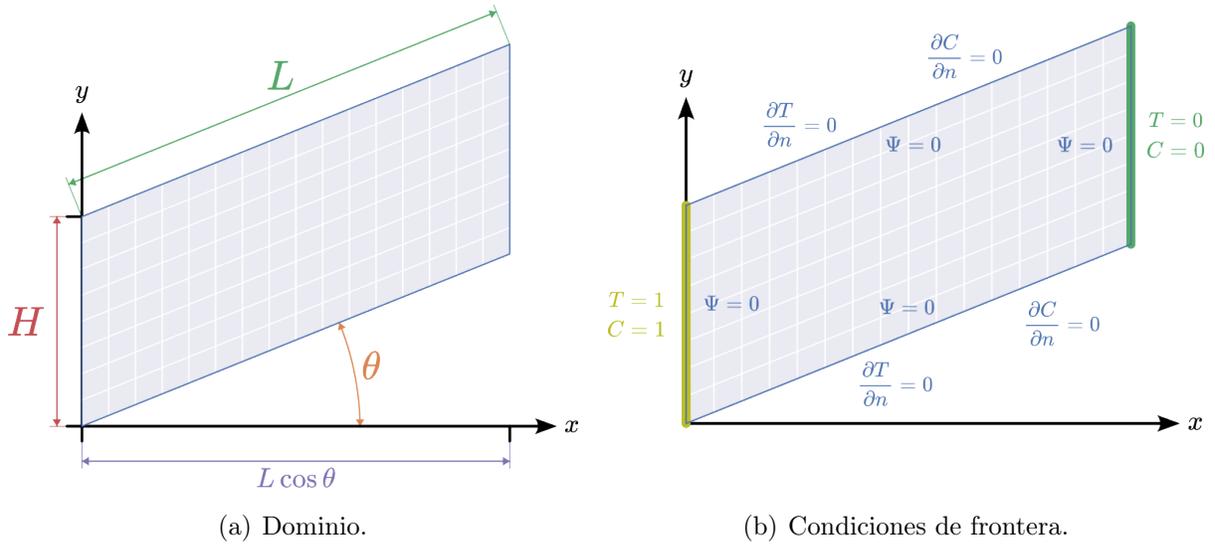


Figura 1.10: Especificaciones del dominio y de las condiciones de frontera del problema CNDD-MPS.

tracción cero. Por lo cual las condiciones iniciales pueden expresarse de la forma

$$\Psi(x, y, t = 0) = 0, \quad (1.13)$$

$$T(x, y, t = 0) = 0, \quad (1.14)$$

$$C(x, y, t = 0) = 0. \quad (1.15)$$

Para abordar este problema, varios autores han empleado diversos métodos numéricos para obtener soluciones. En [Bourich et al., 2004], se utilizan diferencias finitas centradas para discretizar la parte espacial y el método de direcciones alternas implícitas (ADI⁴) para discretizar la parte temporal del problema. Además, implementan el método de sobre-relajación sucesiva (SOR⁵) para calcular la función de flujo. Los autores de [Costa, 2004] obtienen la solución mediante una adaptación de una versión bidimensional laminar del método de elementos finitos basados en el volumen de control. En [Fan et al., 2013], se emplea el método de colocación de funciones de base radial (LRBFCM⁶) para la discretización de la parte espacial, combinado con un algoritmo de homotopía escalar exponencialmente convergente (ECSHA⁷) para la discretización de la parte temporal. En contraste, en [Li et al., 2018], los autores emplean un esquema de GFDM distinto al propuesto en este trabajo para discretizar la parte espacial del problema, complementando con el método de Newton-Raphson. En este estudio, se implementa un esquema de GFDM diferente al presentado en [Li et al., 2018]. Detalles completos sobre este esquema se describen en la sección 2.4. Cabe resaltar que este enfoque ha demostrado su robustez al resolver una amplia gama de problemas definidos por sistemas de ecuaciones diferenciales parciales [Chávez-Negrete et al., 2018, Chávez et al., 2021, Tinoco-Guerrero et al., 2018, Tinoco-Guerrero et al., 2022, Tinoco-Guerrero et al., 2023, Román-Gutiérrez et al., 2022].

⁴Siglas en inglés de “Alternating Direction Implicit method”.

⁵Siglas en inglés de “Successive Over-Relaxation”.

⁶Siglas en inglés de “Local Radial-Basis-Function Collocation Method”.

⁷Siglas en inglés de “Exponentially Convergent Scalar Homotopy Algorithm”.

El problema de CNDD-MPS tiene potencial para simular diodos térmicos, los cuales permiten el paso de calor en una dirección preferente. Tales diodos tienen una gran variedad de aplicaciones para el manejo y control de temperatura en diversos sistemas, como paneles solares, refrigeración, calefacción, entre otros [Wong et al., 2021]. En la Figura 1.11 se presenta un esquema en 2D de un diodo térmico, el cual presenta un ángulo de inclinación θ respecto del eje horizontal.

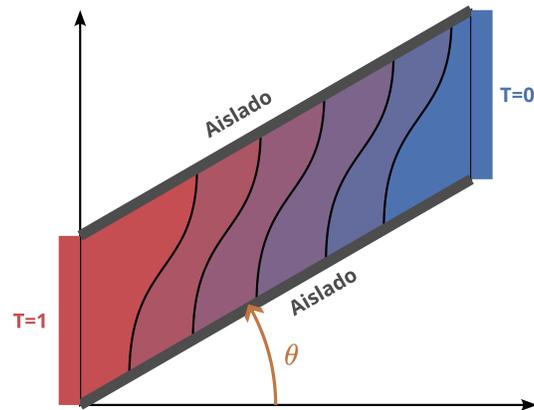


Figura 1.11: Esquema de un diodo térmico, con inclinación respecto al eje horizontal.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Capítulo 2

Metodología

“El gran arquitecto parece ser un matemático; a aquellos que no saben matemáticas les resulta realmente difícil sentir la profunda belleza de la naturaleza.”
- Richard Feynman.

2.1. Expansión en serie de Taylor

Podemos aproximar una función dada $f = f(x)$, centrada en un punto de su dominio x_0 , utilizando una serie de potencias. La serie de potencias es una representación matemática que nos permite expresar una función como una suma infinita de términos de potencias de $(x - x_0)$. Esta serie es especialmente útil cuando queremos obtener una aproximación precisa de la función alrededor de un punto específico. La serie de potencias se define como

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x - x_0)^n, \quad (2.1)$$

o de forma expandida como

$$f(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + a_3(x - x_0)^3 + \dots. \quad (2.2)$$

Para que la serie sea igual a f en el punto x_0 evaluamos $f(x_0)$, lo cual provoca que se anulen todos los términos entre paréntesis, de esta manera se obtiene

$$f(x_0) = a_0,$$

con lo cual ahora ya se conoce el valor del primer coeficiente de la serie a_0 . Para que la aproximación tenga la misma pendiente que f , es necesario derivar la ecuación (2.2), lo cual nos arroja

$$f'(x) = a_1 + 2a_2(x - x_0) + 3a_3(x - x_0)^2 + \dots,$$

y al evaluar la derivada en el punto de interés $f'(x_0)$ podemos observar que nuevamente todos los términos entre paréntesis se anulan, con lo cual se obtiene

$$f'(x_0) = a_1,$$

de esta manera ya se conoce el segundo coeficiente de la serie a_1 . Para que la aproximación tenga también la misma convexidad en ese punto, entonces volvemos a derivar, dando como resultado

$$f''(x) = 2a_2 + 6a_3(x - x_0) + \dots,$$

al evaluar la segunda derivada $f''(x)$ en el punto de interés x_0 , denotado como $f''(x_0)$, se anulan los términos entre paréntesis. Al realizar la evaluación y despejando se obtiene

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= 2a_2, \\ a_2 &= \frac{1}{2}f''(x_0), \end{aligned}$$

entonces tenemos el valor del tercer coeficiente de la serie a_2 . Si se continúa haciendo este proceso de derivar y evaluar en x_0 se pueden obtener los siguientes coeficientes, los cuales siguen un patrón. De manera general estos coeficientes tienen la forma

$$a_n = \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0). \quad (2.3)$$

Sustituyendo los coeficientes a_n , descritos por la ecuación (2.3), en la ecuación de la serie de potencias (2.2) obtenemos

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \dots \quad (2.4)$$

De forma compacta se puede escribir como

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n. \quad (2.5)$$

A las ecuaciones (2.4) y (2.5) se les conoce como **serie de Taylor** [Kreyszig, 2009]. Esta serie nos proporciona una aproximación de una función f en un punto específico x_0 mediante una combinación de sus derivadas en un polinomio de grado n . Es útil para diversos propósitos, como la estimación de valores de una función en puntos cercanos al punto de interés o para la obtención de valores aproximados de funciones cuando no tenemos una expresión exacta para ellas.

Al truncar la serie de Taylor después de un cierto número finito de términos, obtenemos una aproximación de la función original alrededor del punto x_0 . Cuantos más términos se utilicen en la serie, más precisa será la aproximación. Es crucial considerar que una serie de potencias únicamente converge dentro de un determinado radio de convergencia, el cual depende de las propiedades de la función f [Kreyszig, 2009].

Algunas de las series de Taylor de funciones comunes son [Weisstein, 2023b]:

$$\begin{aligned}\frac{1}{1-x} &= \frac{1}{1-x_0} + \frac{x-x_0}{(1-x_0)^2} + \frac{(x-x_0)^2}{(1-x_0)^3} + \dots, \\ \cos(x) &= \cos(x_0) - \sin(x_0)(x-x_0) - \frac{1}{2}\cos(x_0)(x-x_0)^2 + \frac{1}{6}\sin(x_0)(x-x_0)^3 + \dots, \\ \sin(x) &= \sin(x_0) + \cos(x_0)(x-x_0) - \frac{1}{2}\sin(x_0)(x-x_0)^2 - \frac{1}{6}\cos(x_0)(x-x_0)^3 + \dots, \\ e^x &= e^{x_0} \left(1 + (x-x_0) + \frac{1}{2}(x-x_0)^2 + \frac{1}{6}(x-x_0)^3 + \dots \right), \\ \ln(x) &= \ln(x_0) + \frac{x-x_0}{x_0} - \frac{(x-x_0)^2}{2x_0^2} + \frac{(x-x_0)^3}{3x_0^3} + \dots, \\ \tan(x) &= \tan(x_0) + \sec^2(x_0)(x-x_0) + \sec^2(x_0)\tan(x_0)(x-x_0)^2 \\ &\quad + \sec^2(x_0) \left(\sec^2(x_0) - \frac{2}{3} \right) (x-x_0)^3 + \dots.\end{aligned}$$

Si centramos la serie de Taylor en el origen ($x_0 = 0$), entonces se obtiene la serie de Maclaurin

$$\begin{aligned}f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) x^n, \\ f(x) &= f(0) + f'(0)x + \frac{1}{2!} f''(0)x^2 + \frac{1}{3!} f'''(0)x^3 + \dots.\end{aligned}$$

Algunas series de Maclaurin de funciones comunes son [Weisstein, 2023a]:

$$\begin{aligned}\frac{1}{1-x} &= 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + \dots, & \text{para } -1 < x < 1, \\ \cos(x) &= 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{24}x^4 - \frac{1}{720}x^6 + \dots, & \text{para } -\infty < x < \infty, \\ \sin(x) &= x - \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{120}x^5 - \frac{1}{5040}x^7 + \dots, & \text{para } -\infty < x < \infty, \\ e^x &= 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{24}x^4 + \dots, & \text{para } -\infty < x < \infty.\end{aligned}$$

La aproximación mediante la serie de Taylor tiene aplicaciones fundamentales en ingeniería, ya que permite analizar y comprender el comportamiento de sistemas complejos en los que es difícil obtener soluciones exactas. En este campo, la serie de Taylor se utiliza para aproximar funciones no lineales y resolver ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de sistemas dinámicos. Al convertir una ecuación diferencial en una ecuación algebraica mediante la sustitución de la serie de Taylor, podemos “simplificar” el problema y obtener soluciones aproximadas que facilitan el análisis y diseño de sistemas ingenieriles en diversas áreas.

2.2. Método de Diferencias Finitas (FDM) en 1D

Nuestro principal objetivo es resolver sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, en un cierto dominio del espacio $\Omega = (x, y)$ y/o del tiempo t . Debido a la complejidad de muchos de estos sistemas, los métodos tradicionales suelen ser insuficientes para encontrar una solución exacta. En su lugar, es común emplear métodos numéricos que permiten obtener una aproximación precisa de la solución. En este caso, el método de diferencias finitas (FDM¹) se utiliza para reemplazar las derivadas en el sistema de PDEs² por aproximaciones basadas en diferencias finitas. Esto nos permite obtener un sistema, grande pero en un espacio de dimensión finita, de ecuaciones algebraicas, el cual puede ser adecuadamente resuelto por una computadora. Evitando así resolver el sistema de PDEs de forma analítica [LeVeque, 2007].

Surge entonces la pregunta ¿cómo podemos aproximar las derivadas de una función utilizando únicamente los valores discretos de dicha función en un conjunto discreto de puntos específicos? Estas aproximaciones son conocidas como **diferencias finitas** y podemos explorar su origen a través del cálculo diferencial [Godunov and Bohachevsky, 1959].

2.2.1. Obtención de las aproximaciones en diferencias finitas

Supongamos que tenemos una función de una sola variable, denotada como $u(x)$, la cual se considera suave a menos que se indique lo contrario. Esto implica que podemos diferenciar dicha función varias veces, y cada derivada resultante es una función bien definida en un intervalo que incluye un punto específico x_i . A este punto, comúnmente se le conoce como nodo central.

Si deseamos estimar la derivada de primer orden $u'(x_i)$, que representa la pendiente de la tangente a la curva de la función en el punto x_i , utilizando solamente un número finito de puntos cercanos a x_i (también conocidos como nodos de soporte o nodos vecinos), una opción lógica sería utilizar

$$D_+u(x_i) \approx \frac{u(x_i + h) - u(x_i)}{h}, \quad (2.6)$$

para un valor pequeño de h . Se utilizan dos nodos de soporte: el nodo central y el nodo adelante. Esto se debe a la definición estándar de la derivada, donde se toma el límite de la expresión cuando h tiende a cero. Sin embargo, en lugar de tomar h como un infinitesimal, se elige un valor finito, lo que da origen al término *diferencias finitas*. En la ecuación (2.6), se emplea la denominada **diferencia hacia adelante**. Es importante destacar que $D_+u(x_i)$ representa la pendiente de la línea que interpola a la función u en los puntos x_i y $x_i + h$ (ver Figura 2.1). A medida que h se aproxima a cero, esta recta secante se acerca cada vez más a la tangente en el punto x_i .

La ecuación (2.6) ofrece una estimación unilateral de u' , ya que sólo se tienen en cuenta valores

¹Siglas en inglés de “Finite Differences Method”.

²Siglas en inglés de “Partial Differential Equations”.

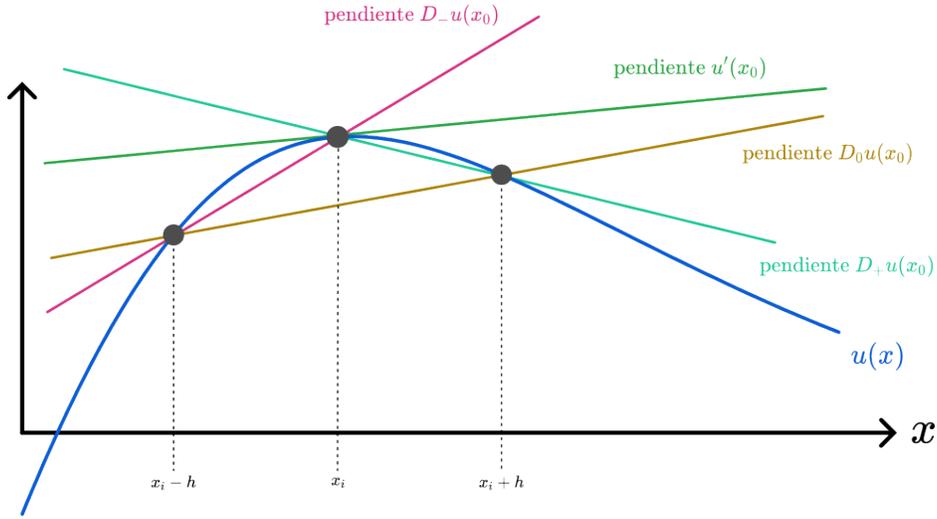


Figura 2.1: Varias aproximaciones a $u'(x_i)$ interpretadas como la pendiente de líneas entre dos puntos.

de $x \geq x_i$ al evaluar u . Otra aproximación unilateral ($x \leq x_i$) sería la **diferencia hacia atrás**

$$D_-u(x_i) \approx \frac{u(x_i) - u(x_i - h)}{h}, \quad (2.7)$$

la cual se puede ver que también utiliza dos nodos de soporte, pero en este caso utilizan el nodo central y el nodo de atrás. Estas fórmulas proporcionan una estimación de **primer orden de precisión** para $u'(x_i)$, lo que significa que la magnitud del error está acotada por un múltiplo de h . En otras palabras, a medida que h disminuye el error de la aproximación también disminuye proporcionalmente.

Otra opción es utilizar la **diferencia centrada**, que utiliza tanto el nodo vecino anterior como el nodo vecino posterior, junto con el nodo central, como nodos de soporte

$$D_0u(x_i) \approx \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2h} = \frac{D_+u(x_i) + D_-u(x_i)}{2}. \quad (2.8)$$

La ecuación (2.8) representa la pendiente de la línea que interpola la función u en los puntos $x_i - h$ y $x_i + h$. Esta aproximación es el promedio de las dos aproximaciones unilaterales definidas en las (2.6) y (2.7). Observando la Figura 2.1, podemos apreciar que esta aproximación es más precisa que las aproximaciones unilaterales. De hecho, se trata de una aproximación con **precisión de segundo orden**, lo que significa que la magnitud del error está acotada por un múltiplo de h^2 . Por lo tanto, si h es pequeño, el error en esta aproximación será mucho menor que el error en una aproximación de primer orden [Strang, 2007, LeVeque, 2007].

Si dividimos el intervalo de interés $[a, b]$, en el que se encuentra definida nuestra función, en $N + 1$ nodos equidistantes, obtendremos N intervalos de tamaño h . La longitud de cada intervalo se puede calcular como $h = \frac{b-a}{N}$. Por ejemplo, si el intervalo de interés es $[0, 1]$, entonces $h = \frac{1}{N}$. Se puede observar un esquema ilustrativo en la Figura 2.2.

Podemos escribir de forma compacta las coordenadas utilizando $x_{i-1} = x_i - h$ y $x_{i+1} = x_i + h$. Del mismo modo, podemos expresar las evaluaciones de la función u como $u_{i-1} = u(x_{i-1})$ y

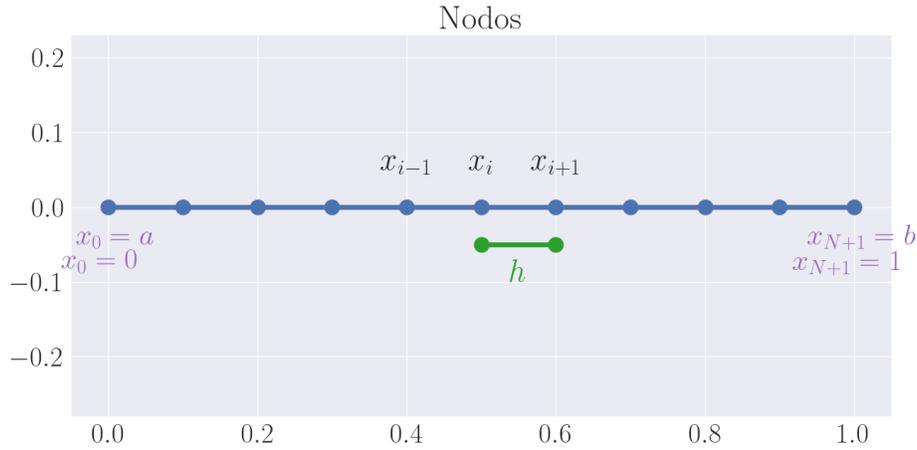


Figura 2.2: Discretización del dominio en 1D.

$u_{i+1} = u(x_{i+1})$. Utilizando estas notaciones compactas, las fórmulas de las diferencias anteriores (2.6)-(2.8) se pueden expresar como

$$\begin{aligned}
 D_+ u_i &\approx \frac{u_{i+1} - u_i}{h} && \text{Diferencia hacia adelante.} \\
 D_- u_i &\approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h} && \text{Diferencia hacia atrás.} \\
 D_0 u_i &\approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = \frac{D_+ u_i + D_- u_i}{2} && \text{Diferencia centrada.}
 \end{aligned}$$

Otra manera de obtener estas aproximaciones es mediante la expansión en serie de Taylor (2.5) de la función u hasta segundo orden. Para ello, se requiere la expansión en el nodo con coordenadas x_{i+1} y también la expansión en el nodo con coordenadas x_{i-1}

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + hu'(x_i) + \frac{h^2}{2}u''(x_i) + O(h^3), \quad (2.9)$$

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) - hu'(x_i) + \frac{h^2}{2}u''(x_i) + O(h^3). \quad (2.10)$$

La notación “big-oh” se utiliza para representar el orden de los términos restantes en la expansión, en este caso $O(h^3)$. A medida que h disminuye, los términos siguientes se vuelven cada vez más pequeños. Esto se debe a que el término de orden n tiene una magnitud de h^n , y al ser h pequeña, estos términos se vuelven cada vez más insignificantes. Si cortamos la expansión hasta segundo orden se obtendrá una aproximación con un cierto error $\tau = O(h^3)$. A este error τ se le conoce como error de truncamiento.

Si despejamos u' de la ecuación (2.9), obtenemos nuevamente la diferencia hacia adelante

$$\begin{aligned}\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h} &= u'(x_i) + \frac{O(h^2)}{h}, \\ \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h} &= u'(x_i) + O(h), \\ u'_i &\approx \frac{u_{i+1} - u_i}{h} = D_+ u_i,\end{aligned}$$

la cual ya se había obtenido en la ecuación (2.6). Podemos observar que el error de truncamiento en esta aproximación es de orden $O(h)$. De manera análoga, al despejar u' de la ecuación (2.10), obtenemos la diferencia hacia atrás

$$\begin{aligned}\frac{u(x_{i-1}) - u(x_i)}{-h} &= u'(x_i) - O(h), \\ u'_i &\approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = D_- u_i,\end{aligned}$$

la cual puede observarse también en la ecuación (2.7). Se puede observar que el error local de truncamiento resulta de orden $O(h)$, al igual que en la diferencia hacia adelante. Esto se debe a que ambas aproximaciones son unilaterales, resultado de que solamente tienen apoyo en un nodo aparte del nodo central (hacia adelante x_{i+1} o hacia atrás x_{i-1}).

Por otro lado, si restamos las ecuaciones (2.9) y (2.10), obtenemos la diferencia centrada

$$\begin{aligned}u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}) &= 2hu'(x_i) + O(h^3), \\ \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h} &= u'(x_i) + O(h^2), \\ u'_i &\approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = D_0 u_i.\end{aligned}$$

la cual también se obtuvo como el promedio de las dos diferencias unilaterales en la ecuación (2.8). En esta aproximación, podemos observar que el error de truncamiento es de orden $O(h^2)$. Si comparamos el orden del error, por ejemplo, tomando $h = \frac{1}{10}$, las aproximaciones unilaterales tendrían un error del orden del 10 %, mientras que en la aproximación centrada el error sería del orden del 1 %. Esto indica que la aproximación centrada es mucho más precisa y ofrece una mejor estimación de la derivada en comparación con las aproximaciones unilaterales.

Al aplicar estas aproximaciones a todos los nodos del dominio, obtenemos un sistema de ecua-

ciones algebraicas que puede ser expresado en forma matricial como [Strang, 2007]:

$$\begin{aligned}
 \text{Diferencia hacia adelante} \quad & \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ & 0 & -1 & 1 & \\ & & 0 & -1 & 1 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{i-1} \\ u_i \\ u_{i+1} \\ u_{i+2} \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \vdots \\ u_{i+1} - u_i \\ u_{i+2} - u_{i+1} \\ \vdots \end{bmatrix}, \\
 \text{Diferencia hacia atrás} \quad & \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ & -1 & 1 & 0 & \\ & & -1 & 1 & 0 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{i-1} \\ u_i \\ u_{i+1} \\ u_{i+2} \end{bmatrix} = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} \vdots \\ u_i - u_{i-1} \\ u_{i+1} - u_i \\ \vdots \end{bmatrix}, \\
 \text{Diferencia centrada} \quad & \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ & -1 & 0 & 1 & \\ & & -1 & 0 & 1 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{i-1} \\ u_i \\ u_{i+1} \\ u_{i+2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} \vdots \\ u_i - u_{i-1} \\ u_{i+1} - u_i \\ \vdots \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

Podemos decir que las matrices de la izquierda aproximan la primer derivada; es decir, representan diferencias de primer orden.

2.2.2. Diferencia de segundo orden

Utilizando las mismas expansiones que antes, dadas por las ecuaciones (2.9) y (2.10), pero esta vez sumándolas, obtenemos

$$u(x_{i+1}) + u(x_{i-1}) = 2u(x_i) + h^2 u''(x_i) + O(h^4).$$

A partir de esta ecuación, podemos despejar la segunda derivada u'' , obteniendo así la siguiente expresión

$$\begin{aligned}
 \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} &= + u''(x_i) + O(h^2), \\
 u''_i &\approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = D_2 u_i, \tag{2.11}
 \end{aligned}$$

donde se puede observar que el error de truncamiento es de orden $O(h^2)$. A la ecuación (2.11) se le conoce como **segunda diferencia**. Al aplicar la ecuación (2.11) a todos los nodos del dominio, obtenemos un sistema de ecuaciones que puede ser representado de forma matricial como

$$\text{Segunda Diferencia} \quad \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{i-1} \\ u_i \\ u_{i+1} \\ u_{i+2} \end{bmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} \vdots \\ u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} \\ u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i \\ \vdots \end{bmatrix},$$

donde la matriz de la izquierda aproxima una segunda derivada en todos los nodos del dominio discretizado. Una alternativa para obtener la ecuación (2.11) es realizar una operación conocida como “diferencia de diferencia”

$$\frac{d^2u}{dx^2} \approx \frac{1}{h} \left(\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_{i+1}} - \left. \frac{du}{dx} \right|_{x_i} \right),$$

donde se ha utilizado una diferencia hacia adelante en primer lugar. Después, se emplea una diferencia hacia atrás para reemplazar las derivadas dentro de los paréntesis, resultando entonces como

$$\frac{d^2u}{dx^2} \approx \frac{1}{h} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{h} - \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \right) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = D_2u_i.$$

2.2.3. Ecuaciones en diferencias en 1D

En la sección anterior, obtuvimos una aproximación de la segunda derivada $\frac{d^2u}{dx^2}$, la cual se conoce como segunda diferencia D_2u_i . A partir de esto, podemos crear de manera sencilla una forma discreta de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x). \quad (2.12)$$

A la ecuación (2.12) se le conoce comúnmente como la **ecuación de Poisson**, donde la función f se denomina la fuente. La función u es la solución y comúnmente se utiliza para modelar temperatura o concentración.

El propósito es calcular aproximaciones u_1, \dots, u_N para los valores $u(x_1), \dots, u(x_N)$. Si dividimos el intervalo $[0, 1]$ en $N + 1$ nodos, las fronteras se sitúan en los extremos: izquierdo ($x = a = 0$) y derecho ($x = a + Nh = b = 1$). Para discretizar el lado izquierdo de la ecuación, reemplazamos la segunda derivada $\frac{d^2}{dx^2}$ con la segunda diferencia D_2u_i , como se define en la ecuación (2.11). Por otro lado, en el lado derecho asumimos que $f(x)$ es una función suave o puntual, y se puede evaluar en cada nodo como $f(x_i) = f_i$. De esta manera, obtenemos la *ecuación en diferencias*

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = f_i. \quad (2.13)$$

Con el fin de obtener una solución única en esta ecuación de segundo orden, es fundamental establecer dos condiciones de frontera (sin embargo estas dos condiciones, por sí mismas, no garantizan la unicidad de la solución). Expresamos estas condiciones de frontera como:

$$u(0) = \alpha \quad , \quad u(1) = \beta. \quad (2.14)$$

A estas condiciones de frontera (2.14) se les conoce como condiciones de frontera de tipo Dirichlet. Por otro lado, en el caso de la ecuación en diferencias, las condiciones de frontera de Dirichlet pueden expresarse como [Strang, 2007, LeVeque, 2007]

$$u_0 = \alpha \quad , \quad u_{N+1} = \beta. \quad (2.15)$$

Empleando la primer condición de frontera para obtener el valor de una de las constantes de integración

$$\begin{aligned} u(0) &= \frac{(0)^2}{2} + c_1(0) + c_2 \\ &= c_2 \\ 0 &= c_2, \end{aligned}$$

entonces

$$u = \frac{x^2}{2} + c_1x.$$

Utilizando la segunda condición de frontera

$$\begin{aligned} u(1) &= \frac{(1)^2}{2} + c_1(1) \\ 0 &= \frac{1}{2} + c_1 \\ c_1 &= -\frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Finalmente la solución exacta de este problema es

$$\begin{aligned} u &= \frac{x^2}{2} - \frac{1}{2}x \\ &= \frac{1}{2}(x^2 - x). \end{aligned}$$

La solución exacta se puede ver en la Figura 2.3 junto con la solución numérica.

2.2.4. Cambio de la condición de frontera del lado derecho (Condición de frontera de Neumann)

Ahora realizamos una modificación en la condición de frontera en el lado derecho del dominio de la siguiente manera

$$u_x(1) = \beta. \quad (2.21)$$

La función u ya no tiene un valor preestablecido, sino que el valor asignado por esta condición de frontera es para la derivada u_x . A esta condición de frontera (2.21) se le denomina condición de frontera de tipo Neumann. Desde una perspectiva física, esta condición representa la entrada o salida de flujo de la cantidad u en el dominio; por ejemplo, puede interpretarse como concentración o temperatura. Debido a que la función u no está definida en el último nodo $N + 1$, aplicamos la discretización de la ecuación de Poisson (2.13) también en este nodo, lo que nos conduce a

$$\frac{u_N - 2u_{N+1} + u_g}{h^2} = f_{N+1}, \quad (2.22)$$

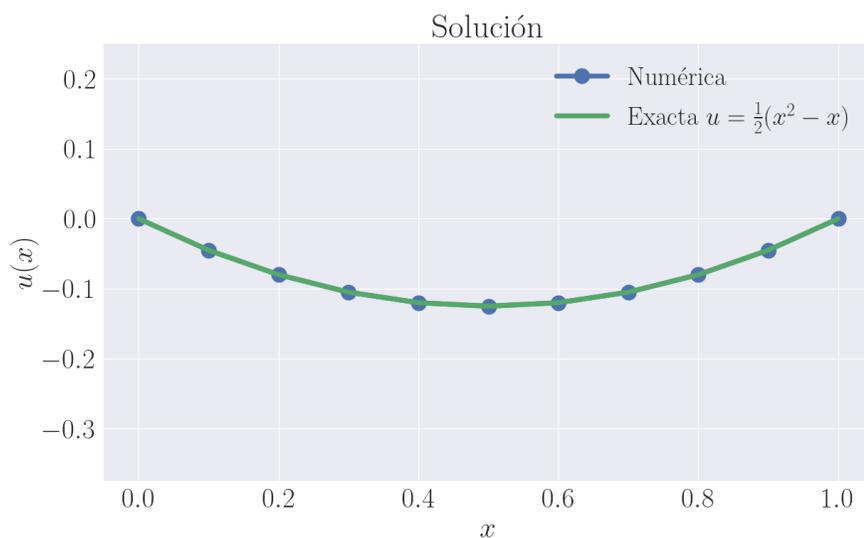


Figura 2.3: Solución de la ecuación de Poisson 1D, con fuente $f(x) = 1$, y con condiciones de frontera $u(0) = 0$ y $u(1) = 0$.

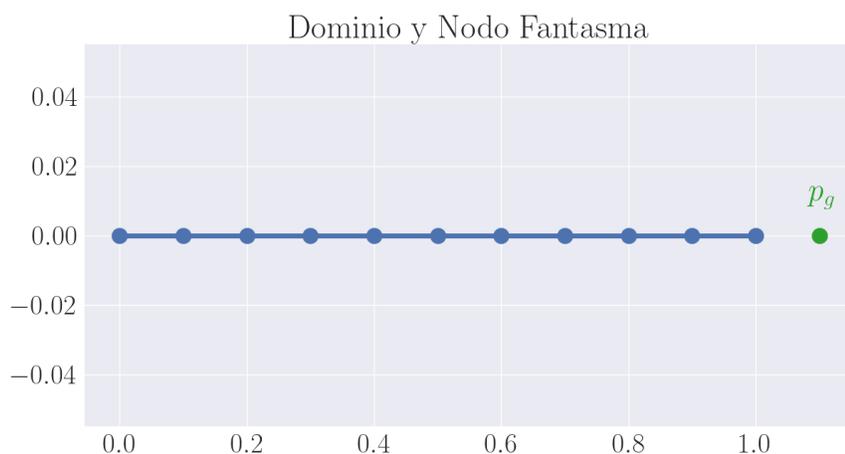


Figura 2.4: Nodo fantasma a la derecha del dominio discretizado en 1D para soporte de la ecuación en el último nodo $N + 1$ con coordenada $x = 1$.

donde u_g es la función evaluada en las coordenadas del nodo fantasma p_g . El nodo fantasma es un nodo que no está incluido en la discretización del dominio como puede observarse en la Figura 2.4.

Para sustituir el valor de la función en el nodo fantasma u_g en la ecuación (2.22), utilizamos la diferencia centrada³ para aproximar la condición de frontera de Neumann (2.21) en el nodo $N + 1$.

³Por lo general, se emplea la diferencia centrada debido a que su error es de $O(h^2)$, lo cual coincide con el error de la segunda diferencia que hemos utilizado. Si optáramos por una de las diferencias laterales que tienen un error de $O(h)$, entonces el error total del método sería de $O(h)$. Esto conduciría a un error más significativo, ya que un error de orden $O(h)$ es más relevante que un error de orden $O(h^2)$.

Utilizando un total de 11 nodos en el dominio, y sustituyendo los valores correspondientes (h , α , β , f_i) en el sistema modificado (2.24) se obtiene

$$10^2 \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ & -2 & 1 & & & & & & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & & & & & 1 & -2 & 1 & & \\ & & & & & & & \color{red}{2} & -2 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_8 \\ u_9 \\ u_{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 - 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 - 0 \end{bmatrix}. \quad (2.25)$$

Al resolver el sistema $KU = F$, obtenemos la solución de la ecuación diferencial U . La representación gráfica de la solución U se puede observar en la Figura 2.5.

Para comparar obtenemos la solución exacta de este problema. Primero, consideramos la ecuación diferencial junto con sus condiciones de frontera:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = 1, \quad \text{con} \quad u(0) = 0, \quad u_x(1) = 0.$$

Integrando una primera vez la ecuación diferencial

$$\frac{du}{dx} = x + c_1.$$

Utilizando la segunda condición de frontera, que define la derivada de la función u en $x = 1$, podemos obtener el valor de la primer constante de integración c_1 ,

$$\begin{aligned} u_x(1) &= 1 + c_1, \\ 0 &= 1 + c_1, \\ c_1 &= -1. \end{aligned}$$

Sustituyendo el valor de c_1 , la ecuación diferencial resulta como

$$\frac{du}{dx} = x - 1.$$

Integrando por segunda vez se obtiene

$$u = \frac{x^2}{2} - x + c_2.$$

Utilizando la primer condición de frontera, que define el valor de u en $x = 0$, se obtiene el valor de la segunda constante de integración c_2

$$\begin{aligned} u(0) &= \frac{(0)^2}{2} - (0) + c_2, \\ 0 &= c_2. \end{aligned}$$

Entonces la solución exacta de este problema queda como

$$u = \frac{x^2}{2} - x.$$

La gráfica de la solución exacta se puede observar en la Figura 2.5, comparada con la solución numérica U , obtenida de resolver la ecuación (2.25).

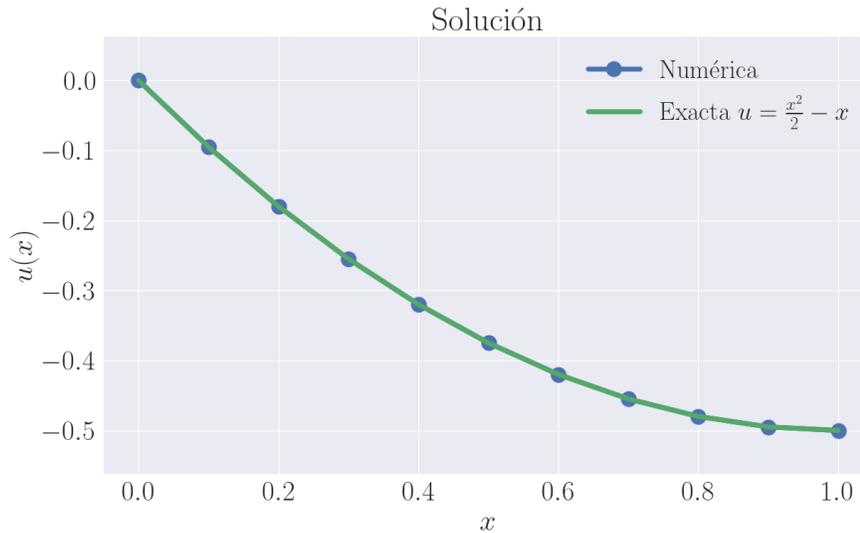


Figura 2.5: Solución de la ecuación de Poisson en 1D, con fuente $f(x) = 1$, y con condiciones de frontera $u(0) = 0$ y $u_x(1) = 0$, utilizando FDM.

2.3. Método de Diferencias Finitas (FDM) en 2D

En la sección 2.2 se presentan varios ejemplos de diferencias finitas en una dimensión. Ahora, ampliaremos este método para resolver problemas en dos dimensiones. El primer paso es discretizar el dominio en ambas direcciones, x y y , utilizando n nodos en la dirección x y m nodos en la dirección y , lo que resulta en un total de $N = n \times m$ nodos. La Figura 2.6 muestra un ejemplo de la discretización del dominio $\Omega = [0, 2] \times [0, 1]$, utilizando $n = 13$ nodos en x y $m = 11$ nodos en y .

Las coordenadas de un nodo cualquiera dentro del dominio se pueden expresar de la forma

$$p_i = (x_i, y_i).$$

Ahora cada nodo central utiliza cinco nodos de soporte para aproximar las derivadas, el nodo central y los cuatro nodos vecinos. El esquema general de los nodos de soporte para un nodo cualquiera con coordenadas $p_{i,j}$ se puede observar en la Figura 2.7. Las coordenadas de estos nodos son

nodo central	$p_i = (x_i, y_i),$
nodo derecha	$p_{i+m} = (x_i + h, y_j),$
nodo izquierda	$p_{i-m} = (x_i - h, y_j),$
nodo superior	$p_{i+1} = (x_i, y_j + k),$
nodo inferior	$p_{i-1} = (x_i, y_j - k),$

donde h es la distancia horizontal entre dos nodos adyacentes horizontalmente, y k es la distancia

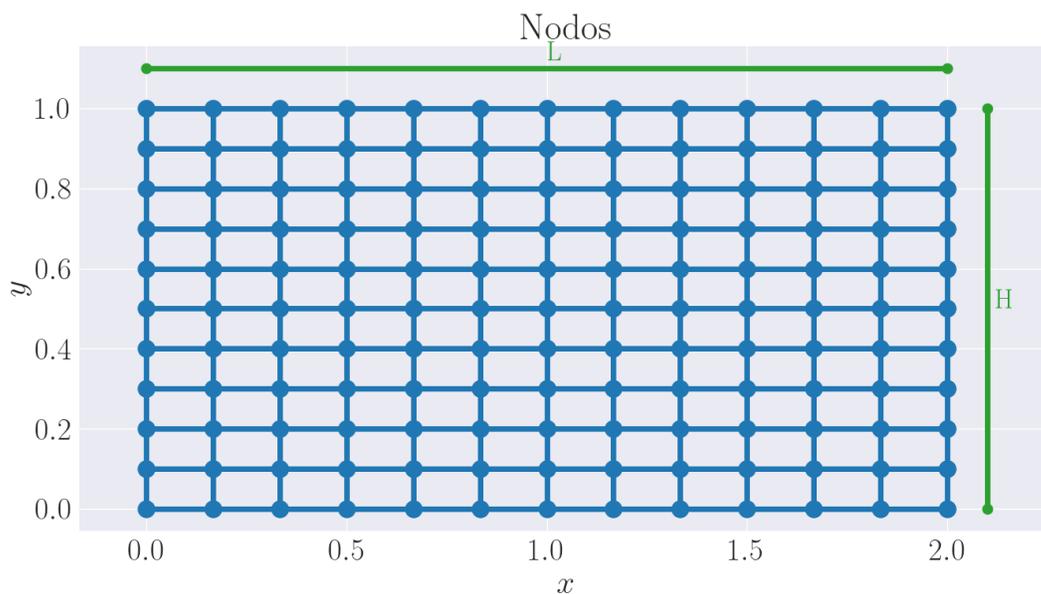


Figura 2.6: Dominio en 2D discretizado con $n = 13$ nodos en x y $m = 11$ nodos en y .

vertical entre dos nodos adyacentes verticalmente. Estas longitudes pueden expresarse de la forma

$$h = \frac{L}{n},$$

$$k = \frac{H}{m},$$

donde L representa la longitud del dominio y H su altura, como puede observarse en la Figura 2.6.

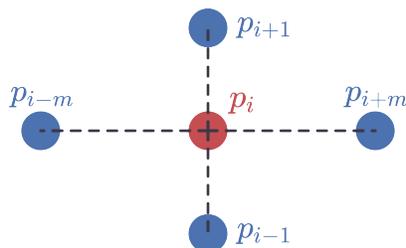


Figura 2.7: Nodos de soporte para diferencias clásicas (FDM) en 2D.

La generalización de la diferencia centrada (2.8) para 2 dimensiones puede expresarse de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+m} - u_{i-m}}{2h}, \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2k}, \quad (2.27)$$

donde la ecuación (2.26) aproxima la derivada parcial en dirección x , utilizando como nodos de soporte el nodo a la izquierda (con índice $i - m$) y el nodo a la derecha (con índice $i + m$). Mientras que la ecuación (2.27) aproxima la derivada parcial en dirección y , utilizando como nodos de soporte el nodo superior (con índice $i + 1$) y el nodo inferior (con índice $i - 1$).

Por otro lado la generalización de la diferencia de segundo orden (2.11), se puede expresar de la forma

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+m} - 2u_i + u_{i-m}}{h^2}, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{k^2}, \quad (2.29)$$

donde la ecuación (2.28) aproxima la segunda derivada parcial en dirección x usando los nodos central (i), izquierda ($i - 1$), y derecha ($i + 1$), y la ecuación (2.29) aproxima la segunda derivada parcial en y usando los nodos central (i), superior ($i + 1$), e inferior ($i - 1$).

2.3.1. Ecuación en diferencias en 2D

Ahora para entender como construir una ecuación en diferencias utilizando las aproximaciones a las derivadas parciales (2.26)-(2.29), veremos el ejemplo de la ecuación de Poisson en 2D,

$$\nabla^2 u = f, \quad (2.30)$$

donde ∇ es el operador diferencial **nabla** en 2 dimensiones, el cual se puede expresar en coordenadas cartesianas como $\nabla = \hat{\mathbf{i}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{j}} \frac{\partial}{\partial y}$. Con lo cual la ecuación de Poisson compacta (2.30) se puede escribir también en forma extendida como

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f, \quad (2.31)$$

donde f y u representan funciones bidimensionales, es decir, $f = f(x, y)$ y $u = u(x, y)$.

Podemos emplear las ecuaciones (2.28) y (2.29) para substituir las derivadas en la ecuación de Poisson (2.31) obteniendo así la ecuación de Poisson discretizada

$$\frac{u_{i+m} - 2u_i + u_{i-m}}{h^2} + \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{k^2} = f_i. \quad (2.32)$$

Aplicando la ecuación (2.32) a todos los nodos al interior del dominio, se ensambla el sistema $KU = F$. Un ejemplo de una ecuación de este sistema (un renglón de K por U igual a f_i), correspondiente al nodo de coordenadas p_i , se presenta como sigue

$$\begin{bmatrix} \dots & 0 & \overset{i-m}{\frac{1}{h^2}} & 0 \dots 0 & \overset{i-1}{\frac{1}{k^2}} & \overset{i}{\frac{-2}{h^2} + \frac{-2}{k^2}} & \overset{i+1}{\frac{1}{k^2}} & 0 \dots 0 & \overset{i+m}{\frac{1}{h^2}} & 0 \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ u_i \\ \vdots \end{bmatrix} = f_i,$$

donde se señala en azul el índice de la columna correspondiente a cada nodo de soporte. Es importante recordar que los valores conocidos, los cuales son dados por las condiciones de frontera, deben pasar al lado derecho del sistema.

Ejemplo: Poisson 2D en dominio rectangular con condiciones de frontera de Dirichlet usando FDM.

Supongamos que se quiere resolver la ecuación de Poisson (2.31), en el dominio $[0, 2] \times [0, 1]$, el cual puede observarse en la Figura 2.6. Para la discretización del dominio, se emplearon $n = 13$ nodos en la dirección x y $m = 11$ nodos en la dirección y . Esto da lugar a un total de $N = 13 \times 11 = 143$ nodos en la discretización.

Para este problema las condiciones de frontera están dadas por

$$\begin{aligned} u(x = 0, y) &= 0, \\ u(x = 2, y) &= 2 + \sin(\pi y), \\ u(x, y = 0) &= x, \\ u(x, y = 1) &= x, \end{aligned}$$

utilizando la fuente

$$f(x, y) = -5.$$

Los nodos correspondientes a las diferentes fronteras pueden identificarse en la Figura 2.8 y cada nodo identificado con el color asignado a cada frontera.

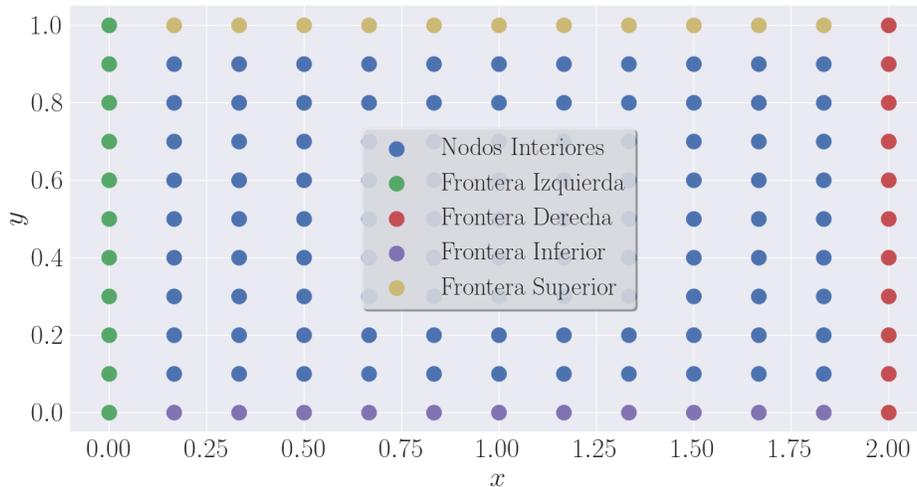


Figura 2.8: *Nodos de frontera identificados por color para el problema de Poisson usando FDM, con $n = 13$ nodos en dirección x , y $m = 11$ nodos en dirección y .*

Se ensambla el sistema de ecuaciones $KU = F$ aplicando la ecuación (2.32) a todos los nodos incógnita (en este ejemplo son todos los nodos interiores), teniendo especial cuidado con los valores que pasan al lado derecho debido a las condiciones de frontera. Una vez ensamblado el sistema $KU = F$, este se resuelve para obtener la solución numérica U . Para este ejemplo la solución se puede observar como líneas de contorno en la Figura 2.9(a) y como una superficie tridimensional en la Figura 2.9(b).

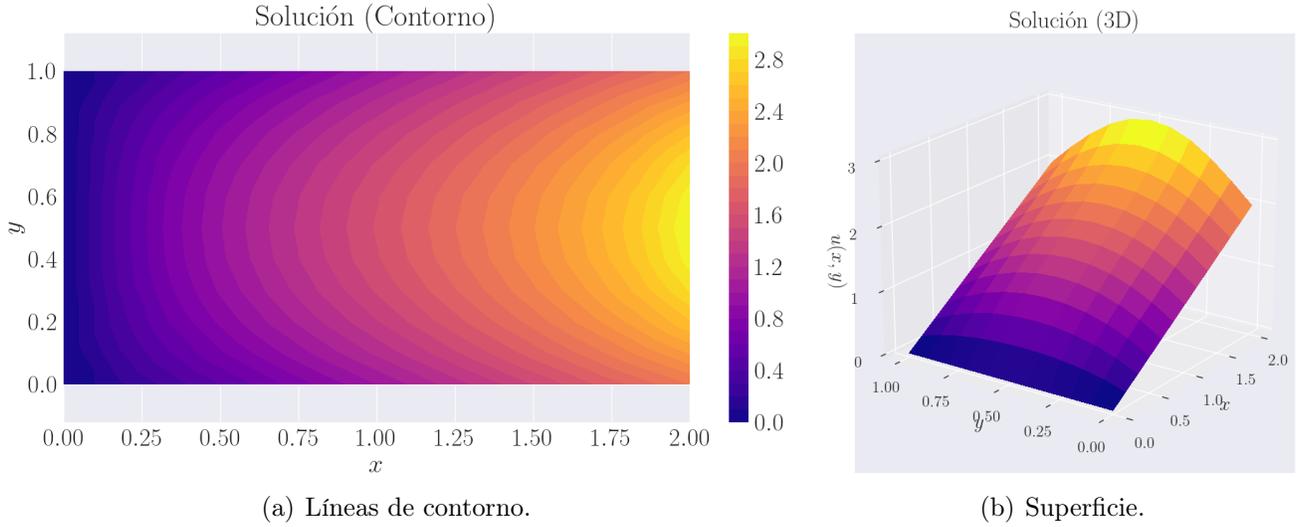


Figura 2.9: *Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = -5$, con condiciones de frontera: $u(x = 0, y) = 0$, $u(x = 2, y) = 2 + \sin(\pi y)$, $u(x, y = 0) = x$, $u(x, y = 1) = x$, utilizando FDM y empleando un total de $N = 13 \times 11 = 143$ nodos.*

Como se mencionó previamente, la función u puede entenderse como la temperatura en una placa rectangular. En esta situación, la temperatura permanece constante en los bordes de la placa, mientras que una fuente de calor uniforme f se distribuye por todo el dominio. Otra interpretación válida es que u representa la deformación de un material elástico. Bajo esta perspectiva, el material se encuentra restringido en sus límites debido a las condiciones de Dirichlet, y una carga f (en este caso uniforme) se aplica al material lo que da como resultado su deformación.

Además, u puede también representar la presión (altura piezométrica) en un medio poroso saturado. Esta presión se disipa debido a la porosidad del material. En este caso, la presión se mantiene a una cierta altura debido a las condiciones de frontera, y una presión uniforme f se aplica en todo el dominio como carga adicional.

2.3.2. Cambio de la condición en una de las fronteras (Condición de frontera de Neumann)

¿Qué ocurriría si surgiera la necesidad de modelar la entrada o salida de flujo de la cantidad u en alguna de las fronteras? Esto se puede lograr mediante la aplicación de la condición de frontera de Neumann

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\partial\Omega_{Neu}} = \alpha(p), \quad (2.33)$$

donde $\partial u / \partial n$ es la derivada normal, $\partial\Omega_{Neu}$ son las fronteras con condición de frontera de Neumann, $\alpha(x)$ es una función que describe la cantidad de flujo que entra o sale del dominio por estas fronteras. Si consideramos que u representa la temperatura, entonces α denota la cantidad de calor que entra

o sale de la placa bidimensional. En el caso de $\alpha = 0$, esto indicaría que la frontera está aislada, lo que resultaría en la ausencia de flujo de calor a través de dicha frontera.

Por otro lado, si interpretamos u como la deformación elástica, la función α representa una fuerza adicional en esa frontera. Si esta fuerza adicional fuera nula ($\alpha = 0$), ello implicaría que la frontera se encuentra libre, sin restricciones como en las fronteras de Dirichlet, y por tanto, no estaría sometida a ninguna fuerza.

La derivada normal en coordenadas cartesianas está definida por

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \nabla u \cdot \hat{\mathbf{n}} = n_x \frac{\partial u}{\partial x} + n_y \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (2.34)$$

donde n_x y n_y son las componentes del vector normal (2.35)

$$\hat{\mathbf{n}} = (n_x, n_y). \quad (2.35)$$

Condición de frontera de Neumann en la frontera inferior de un dominio rectangular

Se va a cambiar entonces la frontera inferior del dominio mostrado en la Figura 2.6, para que tenga una condición de frontera de Neumann (2.33). Como la frontera inferior está alineada con el eje horizontal, entonces el vector normal en esta frontera es $-\hat{\mathbf{j}} = (0, -1)$. Entonces podemos escribir la condición de frontera de Neumann (2.33) como

$$-\frac{\partial u}{\partial y} = \alpha(p). \quad (2.36)$$

Podemos ahora sustituir la derivada por la aproximación en diferencias (diferencia centrada) de la ecuación (2.27) en la ecuación de la condición de frontera de Neumann en dirección $-\hat{\mathbf{j}}$ (2.36) con lo que se obtiene

$$-\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2k} = \alpha_i, \quad (2.37)$$

donde α_i es la función evaluada en las coordenadas del i ésimo nodo $\alpha_i = \alpha(p_i)$. En este caso se tiene un nodo fantasma en dirección $(0, -k)$ respecto del nodo central, como se muestra en la Figura 2.10, donde p_g representa las coordenadas del nodo fantasma p_{i-1} .

Despejando el valor u_{i-1} , que corresponde al nodo fantasma, de la ecuación (2.37)

$$u_{i-1} = 2k\alpha_i + u_{i+1}.$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación de Poisson discretizada (2.32), agrupando términos, y despejando al lado derecho de la ecuación los valores conocidos, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{u_{i+m} - 2u_i + u_{i-m}}{h^2} + \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{k^2} &= f_i, \\ \frac{u_{i+m} - 2u_i + u_{i-m}}{h^2} + \frac{u_{i+1} - 2u_i + (2k\alpha_i + u_{i+1})}{k^2} &= f_i, \\ \frac{u_{i+m} - 2u_i + u_{i-m}}{h^2} + \frac{2u_{i+1} - 2u_i}{k^2} &= f_i - \frac{2\alpha_i}{k}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

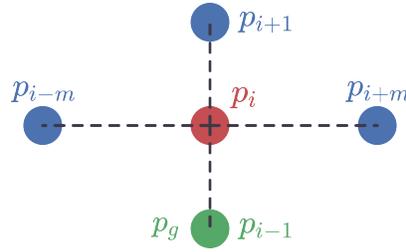


Figura 2.10: Estencil de un nodo de frontera de Neumann, para una frontera en la parte inferior de un dominio rectangular utilizando nodo fantasma con el método FDM.

Utilizando la ecuación (2.38), se ajusta el sistema $KU = F$ en las filas correspondientes a los nodos ubicados en la frontera con condiciones de Neumann. La ecuación (2.38) representa la extensión bidimensional de la ecuación (2.23), la cual resuelve un problema unidimensional.

Ejemplo: Ecuación de Poisson en 2D, cambiando la frontera inferior por condición de frontera de Neumann usando FDM.

Resolviendo el mismo problema que antes, utilizando la misma fuente $f(x, y) = -5$, en el mismo dominio rectangular $\Omega = [0, 2] \times [0, 1]$. La ecuación a resolver es

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -5.$$

Lo único que se modifica es la frontera inferior en $y = 0$, en la cual previamente existía una condición de frontera de Dirichlet; sin embargo, ahora esta se convierte en una condición de frontera de Neumann. Con este ajuste, las condiciones de frontera se establecen de la siguiente manera

$$\begin{aligned} u(x = 0, y) &= 0, \\ u(x = 2, y) &= 2 + \sin(\pi y), \\ u_n(x, y = 0) &= -10x, \\ u(x, y = 1) &= x. \end{aligned}$$

En la frontera inferior, ahora no se define el valor de la función u , sino el de su derivada normal u_n .

Es necesario ajustar el sistema $KU = F$ al aplicar la ecuación (2.38) en los nodos correspondientes a las fronteras de Neumann. En este caso particular, la frontera inferior ($y = 0$) es la que se ve afectada. Una vez que el sistema $KU = F$ ha sido ensamblado con las modificaciones necesarias, se procede a resolverlo para obtener la solución numérica U . En este ejemplo, se utilizaron también $n = 13$ nodos en la dirección x y $m = 11$ nodos en la dirección y , tal como se representa en la Figura 2.8. La solución numérica U se puede observar en la Figura 2.11(a) mediante líneas de contorno y en la Figura 2.11(b) como una superficie tridimensional.

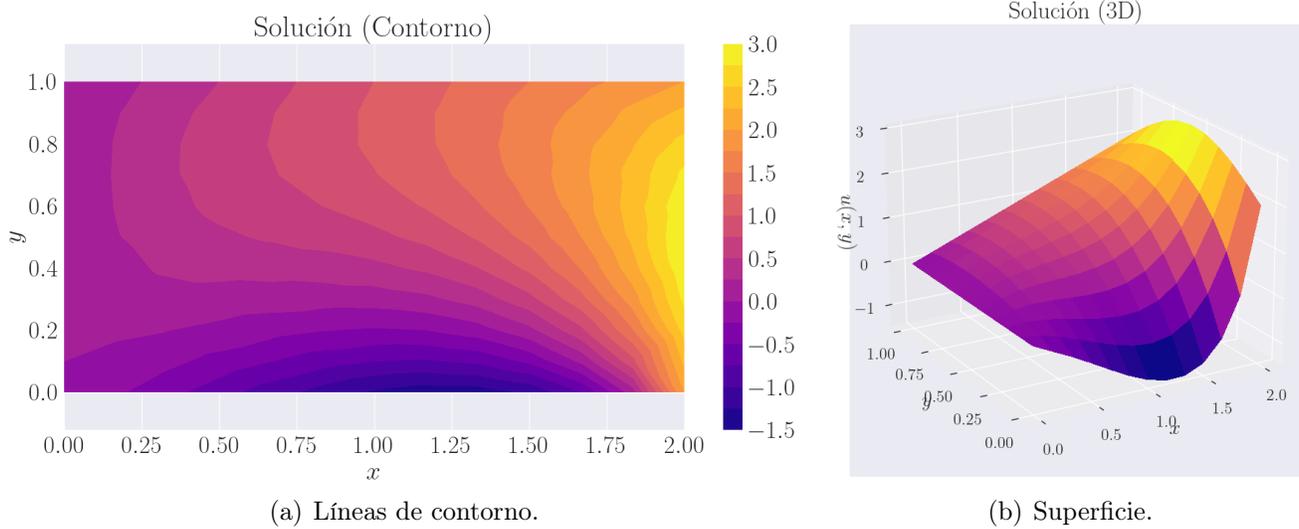


Figura 2.11: *Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = -5$, con condiciones de frontera: $u(x = 0, y) = 0$, $u(x = 2, y) = 2 + \sin(\pi y)$, $u_n(x, y = 0) = -10x$, $u(x, y = 1) = x$ utilizando FDM, y empleando un total de $N = 13 \times 11 = 143$ nodos.*

2.4. Diferencias Finitas Generalizadas (GFDM)

El método GFDM presenta algunas ventajas respecto al método FDM mostrado en la sección 2.3. Las principales ventajas son:

- **Mallas no estructuradas:** Las mallas no necesitan tener una estructura predefinida para resolver el problema, sino que pueden tener cualquier distribución de nodos. Incluso es posible prescindir de mallas y emplear solamente nubes de puntos.
- **Dominios irregulares:** Debido a la falta de necesidad de estructura en la malla, tampoco se requiere que el dominio presente una estructura específica. Esto permite abordar problemas en dominios irregulares.
- **Mayor precisión:** La utilización de más nodos de soporte en torno a un nodo central resulta en una precisión superior en la solución. Esto contrasta con el método clásico que emplea únicamente 4 nodos de soporte (Figura 2.7).

La principal desventaja sería que al usar más nodos de soporte aumenta el costo computacional. No obstante, al no emplear una cantidad excesiva de nodos de soporte para cada nodo central, el impacto computacional es un problema con poca relevancia.

2.4.1. Discretizando un operador diferencial lineal con GFDM

Podemos definir, de forma general, un operador diferencial lineal de segundo orden en 2D denotado como \mathbb{L} , el cual es aplicado a la función u , y posteriormente evaluado en las coordenadas

p_0 (que corresponden a un nodo central cualquiera), de tal forma que se obtiene

$$\mathbb{L}u|_{p_0} = A|_{p_0} u|_{p_0} + B|_{p_0} \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{p_0} + C|_{p_0} \frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{p_0} + D|_{p_0} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{p_0} + E|_{p_0} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\bigg|_{p_0} + F|_{p_0} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\bigg|_{p_0}, \quad (2.39)$$

donde $A = A(x, y)$, $B = B(x, y)$, $C = C(x, y)$, $D = D(x, y)$, $E = E(x, y)$ y $F = F(x, y)$, son funciones dadas por la ecuación diferencial a resolver.

Supongamos que podemos aproximar este operador diferencial utilizando un esquema de GFDM. Para realizar esta aproximación en un nodo central con coordenadas p_0 , se emplea un total de q nodos de soporte con posiciones arbitrarias y coordenadas $p_i = (x_i, y_i)$, donde $i = 0, 1, \dots, q$. Un esquema representativo de un nodo central p_0 junto con sus nodos de soporte p_i se muestra en la Figura 2.12.

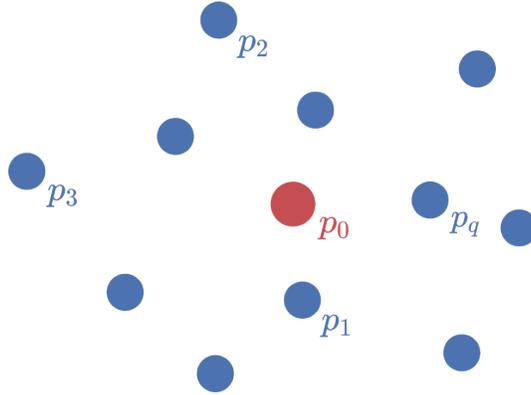


Figura 2.12: *Nodo central y nodos de soporte para el esquema de GFDM.*

El esquema GFDM puede visualizarse como una combinación lineal de valores de la función u evaluada en las coordenadas de los nodos de soporte p_i , los cuales son multiplicados por su peso correspondiente de cada nodo Γ_i , con lo cual se obtiene

$$\mathbb{L}_0 u|_{p_0} = \Gamma_0 u_0 + \Gamma_1 u_1 + \dots + \Gamma_q u_q = \sum_{i=0}^q \Gamma_i u_i, \quad (2.40)$$

donde \mathbb{L}_0 representa la aproximación del operador \mathbb{L} utilizando el esquema GFDM.

Por otro lado, haciendo la expansión en serie de Taylor de la función u hasta segundo orden (mismo orden que el operador \mathbb{L}), centrada en p_0 con dirección p_i , se tiene

$$u_i \approx u|_{p_0} + h_i \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{p_0} + k_i \frac{\partial u}{\partial y}\bigg|_{p_0} + \frac{h_i^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\bigg|_{p_0} + h_i k_i \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\bigg|_{p_0} + \frac{k_i^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\bigg|_{p_0}, \quad (2.41)$$

donde $h_i = x_i - x_0$ es la distancia horizontal entre el nodo central y el i -ésimo nodo, mientras que $k_i = y_i - y_0$ es la distancia vertical entre estos nodos. Sustituyendo la expansión en serie de Taylor

(2.41) en la ecuación del esquema GFDM (2.40) tenemos

$$\begin{aligned} \mathbb{L}_0 u|_{p_0} &= \sum_{i=0}^q \Gamma_i \left(u|_{p_0} + h_i \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{p_0} + k_i \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{p_0} + \frac{h_i^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p_0} + h_i k_i \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \Big|_{p_0} + \frac{k_i^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{p_0} \right), \\ \mathbb{L}_0 u|_{p_0} &= \sum_{i=0}^q \Gamma_i u|_{p_0} + \sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{p_0} + \sum_{i=0}^q \Gamma_i k_i \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{p_0} \\ &\quad + \sum_{i=0}^q \Gamma_i \frac{h_i^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p_0} + \sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i k_i \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \Big|_{p_0} + \sum_{i=0}^q \Gamma_i \frac{k_i^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{p_0}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Entonces tenemos la aproximación al operador diferencial \mathbb{L} , empleando el esquema GFDM propuesto, con lo que se obtiene \mathbb{L}_0 . Ambos operadores se aplican a la función u y están evaluados en las coordenadas del nodo central p_0 . Con todo esto podemos expresar la aproximación

$$\mathbb{L}_0 u|_{p_0} \approx \mathbb{L} u|_{p_0},$$

de aquí obtenemos el error local de truncamiento τ , el cual se quiere que tienda a cero. Esto puede expresarse de la forma

$$\tau = \mathbb{L} u|_{p_0} - \mathbb{L}_0 u|_{p_0} \rightarrow 0. \quad (2.43)$$

Sustituyendo la ecuación del operador diferencial \mathbb{L} (2.39) y la ecuación de la aproximación con GFDM \mathbb{L}_0 (2.42) en el error local de truncamiento τ de la ecuación (2.43), y agrupando términos obtenemos

$$\begin{aligned} &\left(A|_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i \right) u|_{p_0} + \left(B|_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i \right) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{p_0} \\ &+ \left(C|_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i k_i \right) \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{p_0} + \left(D|_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i \frac{h_i^2}{2} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{p_0} \\ &+ \left(E|_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i k_i \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \Big|_{p_0} + \left(F|_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i \frac{k_i^2}{2} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \Big|_{p_0} \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Para que el error local de truncamiento (2.44) tienda a cero, asumiremos que los pesos Γ_i están elegidos de tal manera que todos los términos entre paréntesis se anulen. Esto resultará en

el sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^q \Gamma_i &= A|_{p_0} , \\
\sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i &= B|_{p_0} , \\
\sum_{i=0}^q \Gamma_i k_i &= C|_{p_0} , \\
\sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i^2 &= 2D|_{p_0} , \\
\sum_{i=0}^q \Gamma_i h_i k_i &= E|_{p_0} , \\
\sum_{i=0}^q \Gamma_i k_i^2 &= 2F|_{p_0} .
\end{aligned}$$

Este sistema se puede expresar de forma matricial como

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & h_1 & h_2 & \cdots & h_q \\ 0 & k_1 & k_2 & \cdots & k_q \\ 0 & h_1^2 & h_2^2 & \cdots & h_q^2 \\ 0 & h_1 k_1 & h_2 k_2 & \cdots & h_q k_q \\ 0 & k_1^2 & k_2^2 & \cdots & k_q^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(p_0) \\ B(p_0) \\ C(p_0) \\ 2D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2F(p_0) \end{bmatrix} , \quad (2.45)$$

donde al resolver se obtienen los pesos Γ_i que anulan el error local de truncamiento τ .

Definiendo el vector de pesos Γ , el vector de coeficientes L y la matriz M que caracteriza las distancias horizontales y verticales, de la forma

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & h_1 & h_2 & \cdots & h_q \\ 0 & k_1 & k_2 & \cdots & k_q \\ 0 & h_1^2 & h_2^2 & \cdots & h_q^2 \\ 0 & h_1 k_1 & h_2 k_2 & \cdots & h_q k_q \\ 0 & k_1^2 & k_2^2 & \cdots & k_q^2 \end{bmatrix} , \quad \Gamma = \begin{bmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_q \end{bmatrix} , \quad L = \begin{bmatrix} A(p_0) \\ B(p_0) \\ C(p_0) \\ 2D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2F(p_0) \end{bmatrix} ,$$

se puede escribir el sistema (2.45) de forma compacta como

$$M\Gamma = L . \quad (2.46)$$

Se puede observar que en la ecuación (2.45) tenemos un total de 6 ecuaciones independientes (renglones de la matriz M). Por lo tanto, buscamos que el número de nodos de soporte sea $q = 6$,

para que el número de incógnitas q sea igual al número de ecuaciones. Sin embargo, si esta condición no se cumple, a pesar de algunos inconvenientes, aún se puede obtener una aproximación a la solución de este sistema. Si hay menos nodos de soporte, la precisión de la solución disminuye; si hay más, entonces el sistema queda subdeterminado, lo cual indica que no habrá una solución única del sistema. En estos casos, lo que se hace es utilizar la pseudoinversa para obtener una aproximación a la solución del sistema.

Al resolver el sistema (2.46), encontramos los pesos Γ_i que minimizan el error local de truncamiento τ (2.43). Estos pesos son los que permiten una aproximación precisa al operador diferencial lineal (2.39). Esta aproximación, para un nodo central de coordenadas p_0 , se logra al reemplazar los valores Γ_i en la suma proporcionada por el esquema GFDM dado por la ecuación (2.40).

Siguiendo un recorrido por todos los nodos en los cuales no se posea un valor especificado para u (nodos que carecen de condiciones de Dirichlet), calculamos los pesos Γ al resolver el sistema dado por la ecuación (2.46) para dichos nodos. Se modifican los valores en la matriz M para que se ajusten a las distancias proporcionadas por los nodos de soporte de cada nodo central p_0 . Con esta estrategia, se ensambla el sistema $KU = F$ para todos los nodos. Al resolver este sistema, obtenemos la solución numérica U del problema $\mathbb{L}u = f$.

Es posible discretizar así la ecuación diferencial y ensamblar el sistema discretizado $KU = F$ utilizando la combinación lineal provista por el esquema GFDM, empleando la ecuación (2.40) para discretizar el lado izquierdo de la ecuación. Para el lado derecho, se considera la fuente en el nodo central f_0 , teniendo en cuenta que los valores conocidos en el sistema deben despejarse al lado derecho. De esta manera, se obtiene la ecuación en diferencias [Chávez-Negrete et al., 2018, Tinoco-Guerrero et al., 2022, Román-Gutiérrez et al., 2022, Tinoco-Guerrero et al., 2023]

$$\sum_{i=0}^q \Gamma_i u_i = f_0. \quad (2.47)$$

Ejemplo: Ecuación de Poisson con condiciones de Dirichlet, en un dominio con forma de trapecio usando GFDM.

Supongamos ahora que queremos resolver la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 u = f,$$

pero esta vez en un dominio el cual ya no es un rectángulo⁴. En este caso es un dominio con forma de trapecio. Este tipo de geometría es relevante porque permite modelar fenómenos de infiltración en presas de tierra, como se ilustra en el esquema representativo de la Figura 2.13.

La geometría del dominio, obtenida con `calfem-python`, puede observarse en la Figura 2.14(a). Otro aspecto a resaltar es que la malla de nodos ya no tiene ningún tipo de estructura, como puede verse en la Figura 2.14(b). Esta malla también fue generada utilizando la librería `calfem-python`. Usando esta librería es necesario primero crear la geometría (Figura 2.14(a)), y posteriormente utilizar la geometría para generar la malla (Figura 2.14(b)).

⁴Recordando que el Método de Diferencias Finitas (FDM) solo se puede implementarse en dominios rectangulares discretizados con mallas estructuradas.

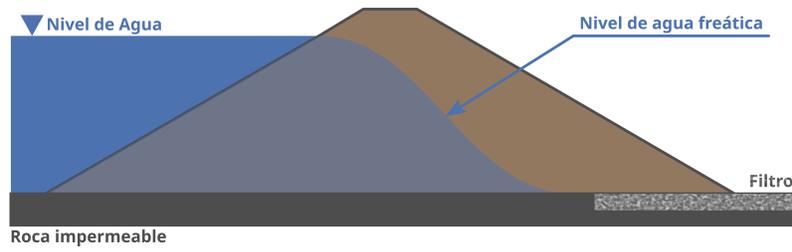
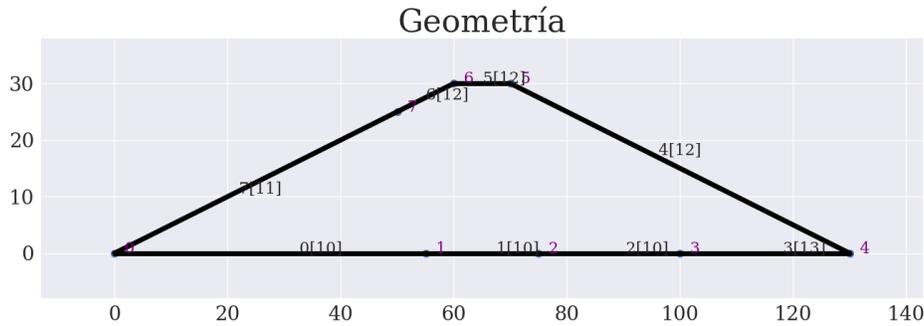
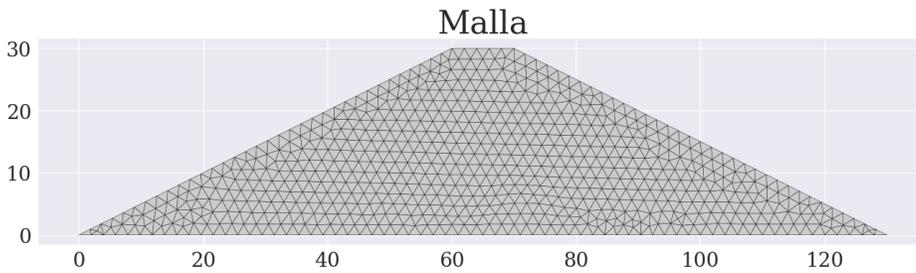


Figura 2.13: Esquema representativo de una presa de tierra.



(a) Geometría.



(b) Malla.

Figura 2.14: Geometría y malla del dominio en forma de trapecio, creada con la librería *calfe-python*, donde se crearon un total de $N = 724$ nodos en la malla.

Las diferentes condiciones están identificadas con colores distintos para cada frontera, como se puede observar en la Figura 2.15. Estas condiciones de frontera se definen mediante las funciones

$$\begin{aligned}
 \text{Dirichlet Izquierda} & \quad u|_{\partial\Omega_{\text{Izq}}} = 1 + \frac{1}{4} \sin\left(\pi \frac{y}{25}\right), \\
 \text{Dirichlet Derecha} & \quad u|_{\partial\Omega_{\text{Der}}} = 0, \\
 \text{Dirichlet Inferior} & \quad u|_{\partial\Omega_{\text{Inf}}} = 1 - \frac{x}{100}, \\
 \text{Dirichlet Superior} & \quad u|_{\partial\Omega_{\text{Sup}}} = \frac{1}{80}(130 - x).
 \end{aligned}$$

Se puede observar que en la frontera izquierda se utiliza una función seno con amplitud $\frac{1}{4}$, la cual se suma al valor 1. Esta frontera mantiene un valor constante de 1 en sus dos extremos. Por otro lado, la frontera derecha se mantiene en un valor constante de 0. En cuanto a las otras dos fronteras (Superior e Inferior), presentan un decaimiento lineal en función de la coordenada x , de manera que los valores en los extremos de estas fronteras coinciden con los valores extremos de las fronteras izquierda y derecha, según corresponda. La fuente tomada para este ejemplo es la

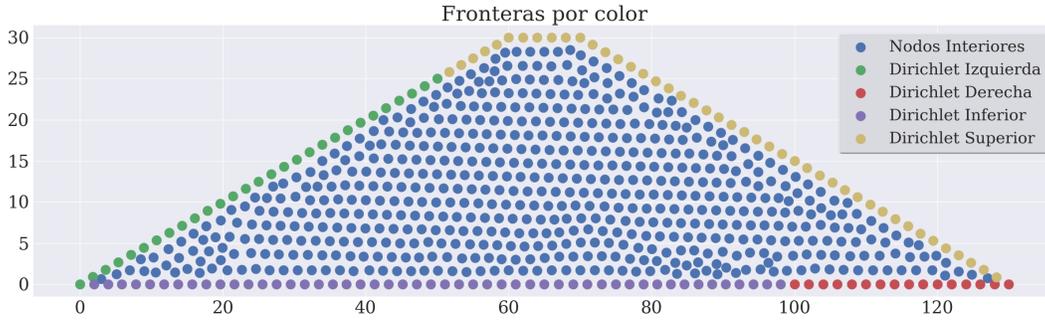
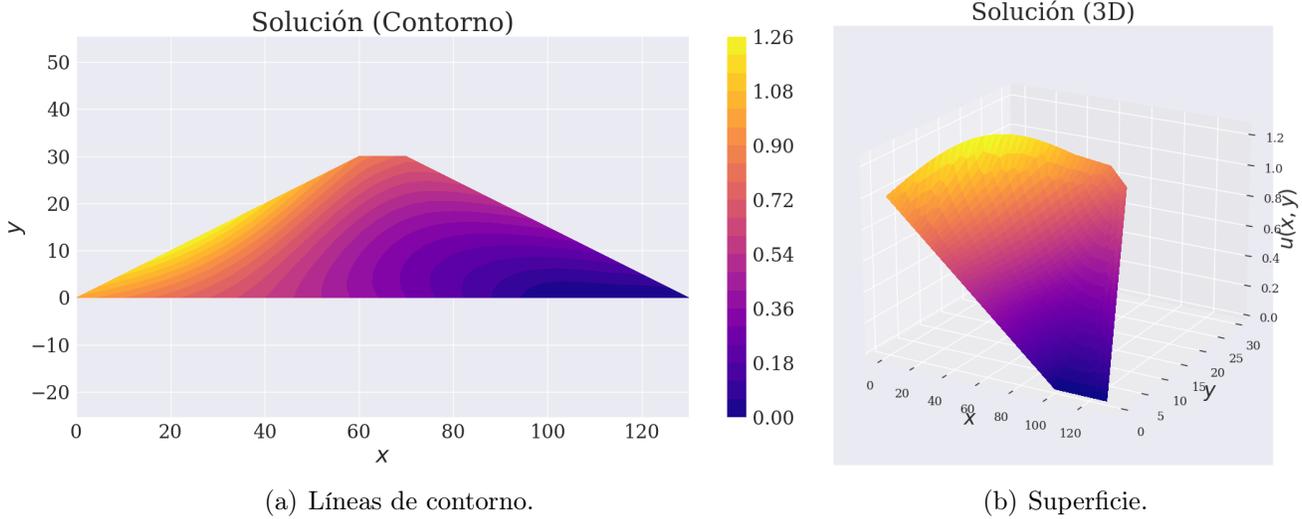


Figura 2.15: Diferentes condiciones de frontera identificadas por color en un dominio con forma de trapecio con un total de $N = 724$ nodos.

constante

$$f = 0.002.$$

Posteriormente se ensambla el sistema $KU = F$ y se resuelve para obtener la solución numérica U . Esta solución puede observarse en la Figura 2.16(a) como líneas de contorno, y en la Figura 2.16(b) como una superficie tridimensional.



(a) Líneas de contorno.

(b) Superficie.

Figura 2.16: Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = 0.002$, con condiciones de frontera: $u|_{\partial\Omega_{Izq}} = 1 + \frac{1}{4} \sin(\pi \frac{y}{25})$, $u|_{\partial\Omega_{Der}} = 0$, $u|_{\partial\Omega_{Inf}} = 1 - \frac{x}{100}$, $u|_{\partial\Omega_{Sup}} = \frac{1}{80}(130 - x)$. Utilizando GFDM, y empleando un total de $N = 724$ nodos.

2.4.2. Cambios en las fronteras que tengan condiciones de frontera de Neumann

Antes de ver la modificación necesaria en estas fronteras hay que revisar de manera general el estencil de los nodos de soporte, para un nodo central p_0 ubicado en una de las fronteras de

Neumann. Un esquema representativo de este estencil se muestra en la Figura 2.17, donde en color verde se muestra el nodo fantasma con coordenadas p_g . Se puede observar también el nodo central con coordenadas p_0 y el nodo centroide con coordenadas p_m .

La forma en la que se calcularon las distancias del nodo central p_0 hacia el nodo fantasma p_g fue la siguiente:

1. Se calculan las coordenadas del centroide p_m de todos los nodos de soporte p_i .
2. Se calculan las distancias desde el nodo central p_0 hacia el centroide p_m y se les cambia el signo.

$$d_g = (h_g, k_g) = -(p_m - p_0).$$

3. Se proyectan estas distancias en dirección del vector normal utilizando el producto punto,

$$d_g = (d_g \cdot \hat{\mathbf{n}})d_g = (h_g n_x + k_g n_y)\hat{\mathbf{n}}.$$

Esta proyección se hizo para tener mejor estabilidad al momento de aproximar la condición de frontera de Neumann.

Ahora se verán los cambios necesarios para poder implementar condiciones de frontera de Neumann. Esta condición de frontera está dada por

$$\frac{\partial u}{\partial n}(p) = \alpha(p). \quad (2.48)$$

Tenemos que podemos escribir la ecuación diferencial que se quiere resolver como una ecuación en diferencias para un nodo central p_0 . Empleando el esquema de GFDM propuesto (2.40) para discretizar el lado izquierdo de la ecuación diferencial, mientras que en el lado derecho se evalúa la fuente en el nodo central f_0 . Con esto se obtiene la ecuación en diferencias (2.47):

$$\sum_{i=0}^q \Gamma_i u_i = f_0,$$

la cual se debe modificar en las fronteras de Neumann para poder aproximar correctamente estas condiciones. Primeramente hay que considerar que además de los nodos de soporte que están dentro del dominio, el nodo central p_0 también se apoya en el nodo fantasma (Figura 2.17), por lo que la ecuación en diferencias (2.47) quedaría de la forma

$$\sum_{i=0}^q \Gamma_i u_i + \Gamma_g u_g = f_0. \quad (2.49)$$

Es necesario reemplazar u_g para que quede solamente en términos de valores de u evaluada en los nodos de soporte interiores al dominio p_i . Esto se hace discretizando la derivada normal,

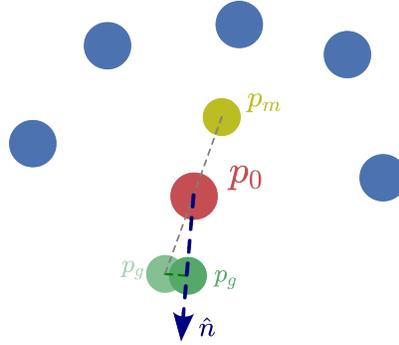


Figura 2.17: Estencil de un nodo en una frontera de Neumann, y el nodo fantasma p_g como el nodo simétrico al centroide p_m , proyectado en dirección del vector normal \hat{n} .

en la condición de frontera de Neumann (2.48). Anteriormente esta se aproximaba utilizando la diferencia centrada (2.27), pero ahora se hará implementando el mismo esquema de GFDM, de tal forma que se obtiene

$$\sum_{i=0}^q \hat{\Gamma}_i u_i + \hat{\Gamma}_g u_g = \alpha_0, \quad (2.50)$$

donde $\hat{\Gamma}_i$ son los pesos que aproximan la derivada normal, que se obtienen al resolver el sistema $M\hat{\Gamma} = \hat{L}$, donde el vector de coeficientes ahora está definido por los valores de las componentes del vector normal (n_x, n_y) de manera que se tiene $\hat{L} = [0, n_x, n_y, 0, 0, 0]^T$.

Despejando de la ecuación (2.50) el valor de la función correspondiente al nodo fantasma u_g , se obtiene

$$u_g = \frac{1}{\hat{\Gamma}_g} \alpha_0 - \sum_{i=0}^q \frac{1}{\hat{\Gamma}_g} \hat{\Gamma}_i u_i. \quad (2.51)$$

Sustituyendo el valor de u_g de la ecuación (2.51) en la ecuación en diferencias (2.49) se obtiene

$$\sum_{i=0}^q \Gamma_i u_i + \Gamma_g \left(\frac{1}{\hat{\Gamma}_g} \alpha_0 - \sum_{i=0}^q \frac{1}{\hat{\Gamma}_g} \hat{\Gamma}_i u_i \right) = f_0.$$

Despejando al lado derecho los valores conocidos, y agrupando términos, se obtiene [Chávez et al., 2021, Román-Gutiérrez et al., 2022]

$$\sum_{i=0}^q \left(\Gamma_i - \frac{\Gamma_g}{\hat{\Gamma}_g} \hat{\Gamma}_i \right) u_i = f_0 - \frac{\Gamma_g}{\hat{\Gamma}_g} \alpha_0. \quad (2.52)$$

Se aplica la ecuación (2.52) a todos los nodos con la correspondiente condición de Neumann y se hace esa modificación en el sistema $KU = F$, para así, al resolver el sistema, obtener la solución numérica U .

Ejemplo: Ecuación de Poisson con condición de frontera Neumann en un dominio con forma de trapecio usando GFDM.

La discretización del dominio es la misma que para el ejemplo anterior, la cual se muestra en la Figura 2.14(b); las diferentes fronteras se muestran marcadas con un color distinto en la Figura 2.15. La principal diferencia en este ejemplo es que ahora las fronteras superior e inferior ya no poseen condiciones de frontera de Dirichlet, sino que tienen condiciones de frontera de Neumann, en este caso son condiciones homogéneas ($\partial u/\partial n = 0$).

Para este ejemplo se consideran las condiciones de frontera siguientes

$$\begin{aligned} \text{Dirichlet Izquierda} & \quad u|_{\partial\Omega_{Izq}} = 1 + \frac{1}{4} \sin\left(\pi \frac{y}{25}\right), \\ \text{Dirichlet Derecha} & \quad u|_{\partial\Omega_{Der}} = 0, \\ \text{Neumann Inferior} & \quad \left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\partial\Omega_{Inf}} = 0, \\ \text{Neumann Superior} & \quad \left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\partial\Omega_{Sup}} = 0, \end{aligned}$$

y la fuente

$$f = 0.$$

Utilizando la ecuación (2.47) para los nodos interiores y la ecuación (2.52) para los nodos en

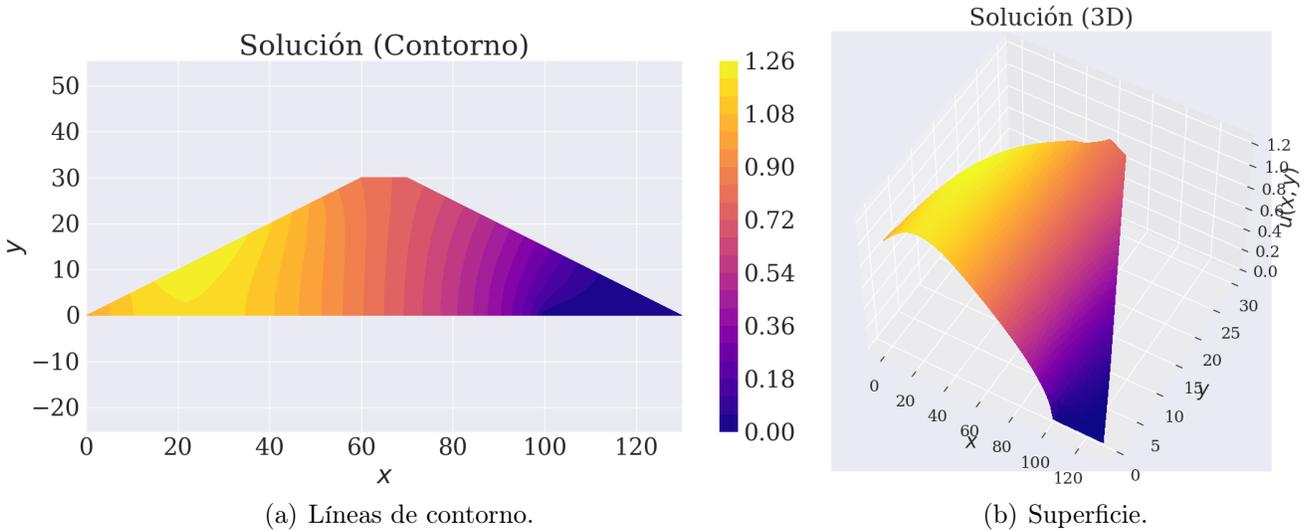


Figura 2.18: Solución numérica U del problema de Poisson $\nabla^2 u = 0$, con condiciones de frontera: $u|_{\partial\Omega_{Izq}} = 1 + \frac{1}{4} \sin\left(\pi \frac{y}{25}\right)$, $u|_{\partial\Omega_{Der}} = 0$, $u_n|_{\partial\Omega_{Inf}} = 0$, $u_n|_{\partial\Omega_{Sup}} = 0$. Utilizando GFDM, y empleando un total de $N = 724$ nodos.

las fronteras de Neumann, se ensambla el sistema completo $KU = F$, recordando que los valores conocidos se incluyen en el lado derecho. Se resuelve este sistema para obtener la solución numérica U . La solución U puede visualizarse en la Figura 2.18(a) como líneas de contorno, y en la Figura 2.18(b) como una superficie tridimensional.

Como se ha mencionado anteriormente, en este ejemplo se han aplicado condiciones de Neumann homogéneas $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ en las fronteras superior $\partial\Omega_{\text{Sup}}$ e inferior $\partial\Omega_{\text{Inf}}$. Si consideramos un modelo de transferencia de calor, esta condición puede interpretarse como que estas fronteras están aisladas en términos de flujo de calor. En otras palabras, no hay transferencia de calor a través de estas fronteras, ya sea hacia el interior del dominio o hacia el exterior. Otra interpretación posible es que, si estamos modelando la deformación elástica de una placa con forma de trapecio, dos de sus fronteras están fijas debido a las condiciones de Dirichlet, mientras que las condiciones de Neumann representan que estas fronteras son libres en términos de deformación.

Con este ejemplo finaliza la descripción del Método de Diferencias Finitas Generalizadas (GFDM), el cual es una extensión del Método de Diferencias Finitas (FDM). En el capítulo 3, se implementa esta metodología para resolver varios problemas de referencia⁵.

2.5. Discretización de la parte temporal

Hasta este momento se han resuelto problemas en estado estacionario. Estos son problemas en los que la solución u no cambia con el tiempo

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0.$$

El objetivo ahora es poder simular problemas en los que la solución depende del tiempo, esto es $u = u(x, y, t)$, por lo que la derivada temporal ya no es igual a cero,

$$\frac{\partial u}{\partial t} \neq 0.$$

A estos problemas también se les conoce como problemas *no estacionarios*.

En muchas ocasiones, es común encontrarse con problemas expresados en forma de ecuaciones diferenciales, donde el lado izquierdo involucra la derivada temporal y el lado derecho contiene una función no lineal, denotada como f , que depende tanto de la solución u , de sus derivadas, como del tiempo t . Estos problemas se expresan mediante una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, en la forma

$$\frac{du}{dt} = f(t, u), \tag{2.53}$$

donde $\frac{du}{dt}$ es ahora una derivada completa debido a que t es la única variable independiente.

Para obtener una solución particular de este problema es necesario que esté sujeto a una *condición inicial* (IC⁶). Esta condición inicial se expresa como

$$u(t_0) = u_0. \tag{2.54}$$

⁵En inglés son mejor conocidos como “benchmark problems”.

⁶Siglas en inglés de “Initial Condition”.

Al problema descrito por la ecuación (2.53) y sujeto a la IC (2.54), se le conoce por el nombre de **Problema de Valor Inicial** (IVP⁷) [Kreyszig, 2009, LeVeque, 2007, Iserles, 2009].

Cabe destacar, cuando se tiene un problema de ecuaciones diferenciales parciales (PDEs), e.g. la **ecuación de Difusión** (2.55) también llamada la **ecuación del Calor**, donde k es la difusividad térmica,

$$k\nabla^2 u + f = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (2.55)$$

notando que hay una derivada temporal $\partial u/\partial t$, que al momento de discretizar la parte espacial del problema, esta derivada temporal parcial se convierte en una derivada completa, debido a que el sistema del lado izquierdo ha quedado como un sistema algebraico que no depende del tiempo, quedando entonces como

$$kD_2U + F = \frac{dU}{dt}, \quad (2.56)$$

donde U es el vector solución que estamos buscando.

Debido a que la derivada temporal era de primer orden, se puede emplear una condición inicial U_0 , con lo cual la ecuación (2.56) se convierte en un problema de valor inicial. Este problema entonces se puede expresar como

$$\frac{dU}{dt} = kD_2U + F, \quad \text{con} \quad U(t_0) = U_0.$$

Se debe de tener especial cuidado al momento de llenar los elementos de U_0 que correspondan a nodos de frontera, ya que deben coincidir con las condiciones de frontera dadas por el problema.

Para abordar los problemas planteados en este trabajo, se empleó el método **Runge-Kutta-Fehlberg de orden 4 y 5 (RK45)**. Este método es ampliamente utilizado y se encuentra predefinido en gran parte del software disponible. La implementación del método RK45 se lleva a cabo a través de la librería `scipy` [Virtanen et al., 2020]. A continuación, se muestra en forma breve una parte del código para ilustrar la forma en que se utilizó este método.

```
1 from scipy.integrate import solve_ivp
2
3 sol = solve_ivp(fun, t_span, U0, method='RK45')
```

donde

- `fun` es una función anónima que define el lado derecho del problema de valor inicial $\dot{u} = f(t, u)$ que se quiere resolver.
- `t_span` es un intervalo $[t_0, t_f]$. El método comienza a resolver en $t = t_0$ y resuelve hasta llegar a $t = t_f$.
- `U0` es la condición inicial del problema.

⁷Siglas en inglés de “Initial Value Problem”.

- `method` es el método a utilizar. Por default usa RK45, pero es posible utilizar otros métodos.

Una breve explicación de este, y otros métodos que pueden utilizarse para la integración temporal de los problemas planteados, se muestran en el [Anexo A](#).

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Capítulo 3

Solución del problema y discusión de resultados

“Lo que sabemos es poco. Lo que no sabemos es inmenso.”
- Pierre Simon Laplace.

En este capítulo se implementará el esquema de GFDM, el cual fue propuesto en la sección 2.4, para resolver los diferentes problemas descritos en el capítulo 1.

3.1. Problema de Henry

El problema de Henry está definido por las ecuaciones gobernantes (1.1)-(1.2):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = \frac{1}{a} \frac{\partial C}{\partial x},$$
$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{1}{b} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{\partial C}{\partial t},$$

recordando que C es la concentración adimensional, Ψ la función de flujo, a es el parámetro de descarga, b el inverso del número de Peclet de filtración. Este problema está definido en el dominio rectangular $\Omega = [0, 2] \times [0, 1]$. Donde las condiciones de frontera están dadas por las ecuaciones (1.3):

$$\begin{aligned} \Psi_x(x=0, y, t) &= 0 & , & & C(x=0, y, t) &= 0, \\ \Psi_x(x=2, y, t) &= 0 & , & & C(x=2, y, t) &= 1, \\ \Psi(x, y=0, t) &= 0 & , & & C_y(x, y=0, t) &= 0, \\ \Psi(x, y=1, t) &= 1 & , & & C_y(x, y=1, t) &= 0, \end{aligned}$$

las cuales se pueden ver de manera detallada en la Figura 1.5. Las condiciones iniciales de este problema están definidas por las ecuaciones (1.4)-(1.5):

$$\begin{aligned}\Psi(x, y, t = 0) &= 0, \\ C(x, y, t = 0) &= 0.\end{aligned}$$

Como ya se mencionó en el capítulo 1, la dificultad de resolver este problema se presenta en los términos no lineales y en el acoplamiento de las ecuaciones, por lo cual este problema se debe resolver de manera distinta a los ejemplos mostrados en el capítulo 2.

El primer paso es discretizar los diferentes operadores diferenciales usando GFDM, de manera que queden en forma matricial. Para este trabajo se decidió utilizar la notación siguiente:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} \approx D_x^\Psi \Psi + F_x^\Psi, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} \approx D_y^\Psi \Psi + F_y^\Psi, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx D_x^C C + F_x^C, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} \approx D_y^C C + F_y^C, \quad (3.4)$$

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \approx D_2^\Psi \Psi + F_2^\Psi, \quad (3.5)$$

$$\nabla^2 C = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \approx D_2^C C + F_2^C, \quad (3.6)$$

donde las matrices D aproximan el operador diferencial correspondiente, donde el subíndice indica el tipo de operador que aproximan. Por ejemplo, una derivada en dirección x resulta en la matriz D_x . Por otro lado el vector F contiene los valores conocidos, los cuales son dados por las condiciones de frontera de Dirichlet. Para las condiciones de frontera de Neumann, el planteamiento realizado es el que puede verse en la sección 2.4.2. Estos cambios afectan los valores de F ubicados en las fronteras de Neumann dependiendo del operador D que se esté aproximando, por lo que es necesario hacer una distinción entre los diferentes vectores F_x, F_y, F_2 .

Como ya se indicó, el subíndice está relacionado con el tipo de operador que aproximan, ya sea una derivada en dirección x , con lo que se obtiene la matriz D_x y el vector F_x , o una derivada en dirección y , con lo que se obtienen D_y y F_y , o el operador laplaciano ∇^2 , con lo que se obtienen D_2 y F_2 . Por otro lado el superíndice señala cuáles son las condiciones de frontera que se consideran al momento de discretizar el operador, ya sean las condiciones de la función de flujo Ψ , con lo que se obtienen D^Ψ y F^Ψ , o las condiciones de frontera de la concentración C , con lo que se obtienen D^C y F^C .

Para aproximar los diferentes operadores diferenciales, y ensamblar las matrices D , hay que considerar el vector de coeficientes L del sistema de ecuaciones $M\Gamma = L$ (2.46) dado por el esquema GFDM utilizado. Recordando que el vector L está definido como

$$L = [A(p_0), B(p_0), C(p_0), 2D(p_0), E(p_0), 2F(p_0)]^T,$$

donde los coeficientes están dados por las funciones evaluadas en el nodo central p_0 . Las cuales vienen dadas por el operador diferencial lineal \mathbb{L} (2.39) que se quiere aproximar

$$\mathbb{L}u = Au + B\frac{\partial u}{\partial x} + C\frac{\partial u}{\partial y} + D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + E\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y} + F\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.$$

De esta manera se utilizan los siguientes vectores de coeficientes L para ensamblar las matrices D (3.1)-(3.6), las cuales aproximan las derivadas necesarias.

$$\begin{aligned} L &= [A, B, C, D, E, F]^T, \\ L_x &= [0, 1, 0, 0, 0, 0]^T, \quad \text{para ensamblar } D_x, \\ L_y &= [0, 0, 1, 0, 0, 0]^T, \quad \text{para ensamblar } D_y, \\ L_2 &= [0, 0, 0, 2, 0, 2]^T, \quad \text{para ensamblar } D_2. \end{aligned}$$

Ahora se pueden sustituir las aproximaciones a los diferentes operadores (3.1)-(3.6) en las ecuaciones gobernantes del problema (1.1)-(1.2), con lo cual queda discretizada la parte espacial del problema y entonces se obtienen las ecuaciones gobernantes discretizadas

$$D_2^\Psi \Psi - \frac{1}{a} D_x^{C\Psi} C + F_2^\Psi - \frac{1}{a} F_x^{C\Psi} = 0, \quad (3.7)$$

$$D_2^C C + F_2^C - \frac{1}{b} [(D_y^{\Psi C} \Psi + F_y^{\Psi C}) * (D_x^C C + F_x^C) - (D_x^{\Psi C} \Psi + F_x^{\Psi C}) * (D_y^C C + F_y^C)] = \frac{dC}{dt}. \quad (3.8)$$

El simbolo $*$ en la ecuación (3.8) implica una multiplicación elemento a elemento entre dos vectores, ya que los productos matriz-vector (e.g. $D\Psi$, o DC) resultan en un vector. Se puede observar que los términos entre paréntesis en la ecuación (3.8), que incluyen esta forma de multiplicación ($*$), representan los factores **no lineales** del sistema.

En la ecuación (3.7), la matriz $D_x^{C\Psi}$ es una modificación de la matriz D_x^C , y el vector $F_x^{C\Psi}$ es una modificación del vector F_x^C , en donde las filas de la matriz y los elementos del vector, correspondientes a los nodos de frontera, se han llenado de ceros. Esto se implementa con el objetivo de evitar las modificaciones en las condiciones de frontera dadas para la función de flujo Ψ .

Por otro lado, en la ecuación (3.8), las matrices $D_y^{\Psi C}$, $D_x^{\Psi C}$, y los vectores $F_y^{\Psi C}$, $F_x^{\Psi C}$, son modificaciones de D_y^Ψ , D_x^Ψ , F_y^Ψ , y F_x^Ψ respectivamente, donde los valores correspondientes a los nodos de frontera se han llenado de ceros. Esto se realiza con el objetivo de evitar las modificaciones en las condiciones de frontera de la concentración C . Se puede apreciar una comparación entre las matrices D_y^Ψ y $D_y^{\Psi C}$ en la Figura 3.1, en ella se presentan estas matrices para un dominio con $N = 28$ nodos, se puede notar que en la matrix $D_y^{\Psi C}$ las filas correspondientes a nodos de frontera se han llenado de ceros.

A todas las matrices D les corresponde un vector F que acopla los valores conocidos (condiciones de frontera de Dirichlet). Esto se puede observar al ejemplificar con un nodo, por ejemplo, si tomamos el nodo 24 que se puede observar en la Figura 3.2, el cual tiene soporte en los nodos 1

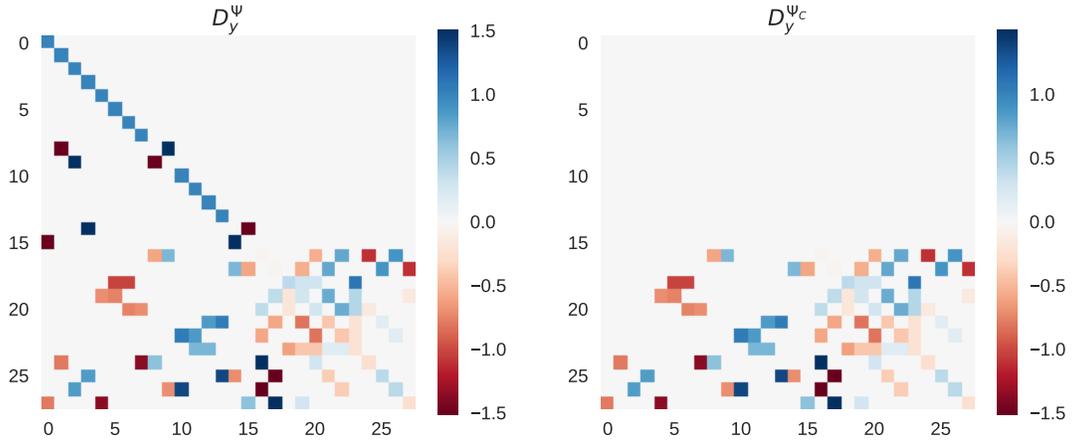


Figura 3.1: Comparativa de los valores de las matrices D_y^Ψ y $D_y^{\Psi_c}$ para un dominio discretizado de $N = 28$.

y 7 que tienen condición de Dirichlet para Ψ , por lo que la discretización con GFDM (2.40) para ese nodo resulta

$$\begin{aligned}\Gamma_{24}u_{24} + \Gamma_1u_1 + \Gamma_7u_7 + \Gamma_8u_8 + \Gamma_{16}u_{16} + \Gamma_{20}u_{20} &= f_{24}, \\ \Gamma_{24}u_{24} + \Gamma_8u_8 + \Gamma_{16}u_{16} + \Gamma_{20}u_{20} &= f_{24} - \Gamma_1u_1 - \Gamma_7u_7,\end{aligned}$$

por lo que entonces la matriz D_y^Ψ en la fila 24, las columnas 1 y 7 no tendrían ningún valor, sino que han pasado al vector F_y^Ψ . Esto mismo pasa para las matrices D y vectores F asociados a las condiciones de frontera de Ψ , y en general para todas las fronteras de con condiciones de Dirichlet.

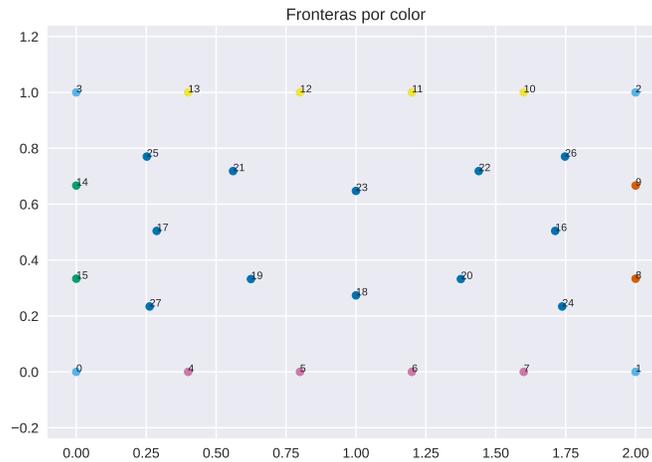


Figura 3.2: Fronteras por color para el problema de Henry con $N = 28$ nodos.

Al aplicar este enfoque a todos los nodos con soporte en fronteras de Dirichlet, las matrices D quedan llenas de ceros en todas las columnas correspondientes a nodos de frontera de Dirichlet

(excepto en la diagonal, donde se encuentra la identidad). Esto conduce a matrices más dispersas¹ y, por lo tanto, más eficientes. Sin embargo, al hacer esto se pierde información sobre la conexión de los nodos con las fronteras, lo que puede volver el método inestable al resolver problemas no lineales. Por esta razón, se optó por dejar las matrices D con los valores conocidos dentro de ellas.

Esto se puede apreciar al observar la estructura de la matriz D_y^Ψ mostrada en la Figura 3.3, donde se compara la estructura manteniendo los valores conocidos de las fronteras de Dirichlet dentro de la matriz, y la estructura de la misma matriz al despejar estos valores al lado derecho del sistema.

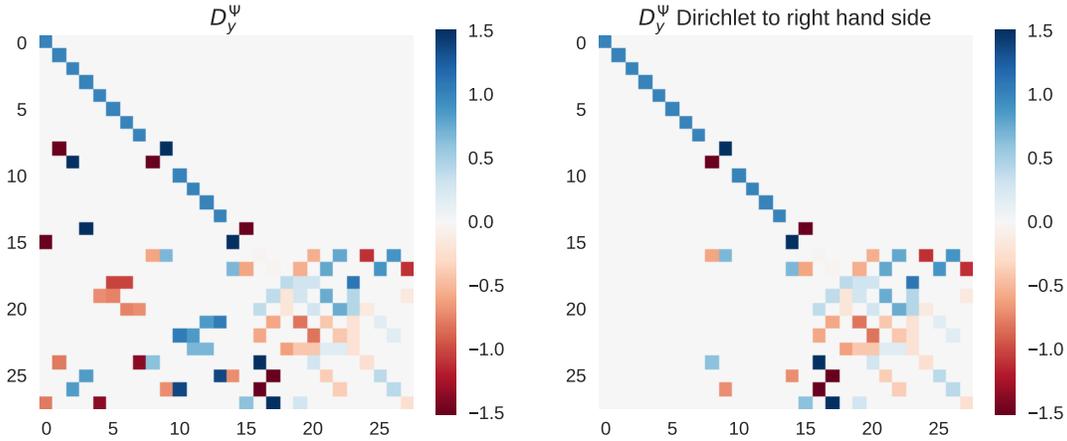


Figura 3.3: *Comparativa de la matriz D_y^Ψ , dejando los valores conocidos dentro de la matriz y pasándolos al lado derecho, usando $N = 28$ nodos.*

Definiendo el vector solución U como

$$U = \begin{bmatrix} \Psi \\ C \end{bmatrix},$$

se puede escribir el sistema (3.7)-(3.8) en forma matricial como

$$\frac{dU}{dt} = \begin{bmatrix} D_2^\Psi & -\frac{1}{\alpha} D_x^C \\ 0 & D_2^C \end{bmatrix} U + \begin{bmatrix} F_2^\Psi - \frac{1}{\alpha} F_x^C \\ F_2^C - \frac{1}{b} (D_y^\Psi C + F_y^\Psi) * (D_x^C C + F_x^C) - (D_x^\Psi C + F_x^\Psi) * (D_y^C C + F_y^C) \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

donde, del lado derecho de la ecuación, el primer término acopla las matrices D que corresponden a la parte lineal del sistema. Por otro lado el segundo término acopla tanto los vectores F correspondientes a la parte lineal; así como la parte no lineal del sistema. Los términos no lineales del sistema son aquellos que se encuentran entre paréntesis. En los vectores F están presentes las condiciones de frontera y las fuentes. Para el problema de Henry las fuentes son todas cero.

Para resolver esta ecuación se utiliza el método Runge-Kutta-Fehlberg (RKF45), el cual nos permite resolver problemas de valor inicial, implementado en la librería `scipy`, el cual se puede utilizar de la forma

¹En inglés se les conoce como “sparse matrices”, y también suelen recibir el nombre de matrices ralas.

```

1 from scipy.integrate import solve_ivp
2
3 sol = solve_ivp(fun, t_span, U0, method='RK45')

```

donde `fun` es una función anónima que acopla el lado derecho de la ecuación en función de la solución U y del tiempo $fun = fun(t, U)$, `t_span` es una lista que describe el intervalo de tiempo en el que se resolverá la ecuación (e.g. $[0, 1.25]$), y `U0` es el vector que define las condiciones iniciales del sistema dadas por (1.4)-(1.5), respetando los valores de las condiciones de frontera dadas por (1.3).

Para este problema se obtuvieron soluciones en diferentes tiempos representativos t_i , en el cual se utilizaron los tiempos dados por la lista `teval` (3.10). En donde se considera que en el tiempo $t = 0.21$ se llega a la solución estacionaria del problema,

$$\text{teval} = [0.00 \quad 0.01 \quad 0.05 \quad 0.21] . \quad (3.10)$$

Para describir de forma amplia el problema, se llevaron a cabo diversas pruebas numéricas utilizando distintas discretizaciones. Para generar los dominios discretizados, se empleó la librería `calfe-python`, donde se ajustó el parámetro `el_size_factor`. Este parámetro indica el factor de escala mediante el cual se multiplican las longitudes de los elementos (líneas que unen a los nodos). Los valores utilizados se detallan en la Tabla 3.1, teniendo presente que el dominio de este problema es el rectángulo $\Omega = [0, 2] \times [0, 1]$.

<code>el_size_factor</code>	N
0.1	274
0.05	998
0.03	2748
0.02	5969

Tabla 3.1: Valores de generación de malla para el problema de Henry.

Los diversos dominios discretizados utilizando estos parámetros se pueden observar en la Figura 3.4, mientras que en la Figura 3.5 se muestran los nodos identificados con diferentes colores según la frontera.

Se puede observar en la Figura 3.5 que las esquinas están separadas del resto de las fronteras. Esto se realizó debido a que la función de flujo Ψ tiene condiciones de Dirichlet y de Neumann en posiciones diferentes a la concentración C . Ψ tiene condición de Dirichlet en las fronteras superior e inferior, mientras que C tiene condición de Dirichlet en las fronteras izquierda y derecha. Por otro lado, las condiciones de Neumann están dispuestas de manera opuesta: Ψ tiene estas condiciones en las fronteras izquierda y derecha, mientras que C las tiene en las fronteras superior e inferior. Las esquinas son acopladas a la frontera que corresponda con una condición de Dirichlet, debido a que es más sencillo gestionar este tipo de condiciones de frontera.

Se resolvió el problema utilizando diferentes conjuntos de parámetros a y b , lo que resulta en diferentes casos: el problema Original, la versión de Pinder y la versión Modificada. Los parámetros

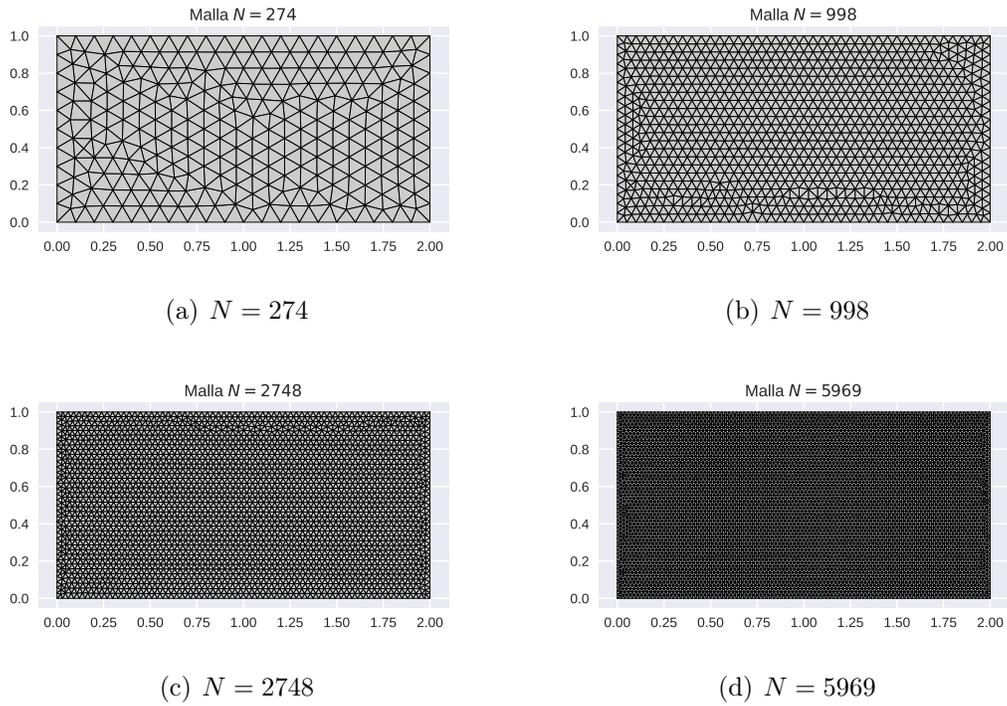


Figura 3.4: Dominios discretizados usados para resolver el problema de Henry.

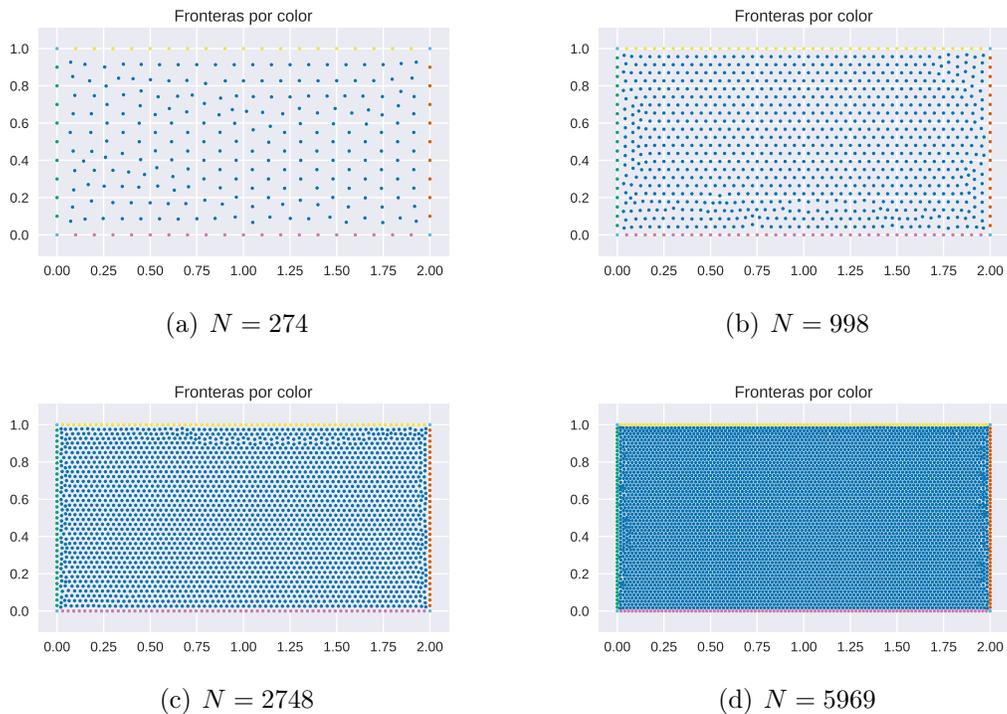


Figura 3.5: Nodos con fronteras por color para los diferentes dominios del problema Henry.

para los distintos problemas se muestran en la Tabla 3.2. Recordando que a es el parámetro de descarga y b es el inverso del número de Peclet de filtración.

	a	b
Original	0.2637	0.100
Pinder	0.2637	0.035
Modificado	0.1315	0.200

Tabla 3.2: *Parámetros de las diferentes versiones del problema de Henry.*

En la Figura 3.6 se puede observar la solución obtenida para el problema de Henry Original ($a = 0.2637$, $b = 0.1$). Del lado izquierdo se muestra la función de flujo Ψ y del lado derecho la concentración C . Ambas funciones están graficadas en los tiempos dados por la lista `teval` (3.10). Se puede notar que en el tiempo $t = 0.00$ la solución está dada por las condiciones iniciales (1.4)-(1.5). En estas condiciones, la función de flujo Ψ tiene un valor de 1 en la frontera superior, 0 en la inferior, y condiciones de Neumann homogéneas en las otras dos fronteras; mientras que la concentración C tiene un valor de 1 a la derecha, 0 a la izquierda, y condiciones de Neumann homogéneas en las otras dos fronteras. En los siguientes tiempos se observa como va ocurriendo la intrusión de la concentración C sobretodo en la parte derecha inferior del dominio, por otro lado en la función de flujo Ψ se puede notar que se genera un vórtice que gira en sentido horario ubicado en la misma zona del dominio.

En la Figura 3.7 se presenta la solución obtenida por [Li et al., 2014], utilizando un esquema de GFDM diferente al aplicado en este trabajo. Para llegar a esta solución, se emplearon un total de $N = 3317$ nodos. Al comparar la solución mostrada en la Figura 3.6 con la de [Li et al., 2014] en la Figura 3.7, se observa que ambas soluciones son similares.

En la Figura 3.8 se muestra la solución en el tiempo $t = 0.21$, para diferente número total de nodos N . Por un lado en la Figura 3.8(a) se muestra la solución para el problema Original ($a = 0.2637$, $b = 0.1$), mientras que en la Figura 3.8(b) se puede observar la solución para la versión de Pinder ($a = 0.2637$, $b = 0.035$). Cabe destacar que debido a la rigidez del problema se presentan problemas en la solución de la concentración C en la zona superior derecha del dominio, que es donde esta función C tiene una pendiente más pronunciada. Estos problemas se ven superados al momento de refinar la malla del dominio discretizado, o en otras palabras incrementar el número total de nodos N , lo cual mejora la precisión del método y por ende la solución obtenida. Al comparar las Figuras 3.8(a) y 3.8(b) se puede notar una diferencia en la zona inferior derecha del dominio, ya que el problema de Pinder presenta una mayor intrusión de concentración C al interior del dominio, esto debido al parámetro b , el cual en el problema Original es $b = 0.1$ y en el de Pinder es $b = 0.035$. Esto también afecta al vórtice formado, el cual se elonga más en la versión de Pinder debido al efecto que tiene la concentración C en la función de flujo Ψ .

Una comparativa de la línea isoclora² $C = 0.5$ para las diferentes versiones del problema se muestra en la Figura 3.9. Estas versiones son las mencionadas en la Tabla 3.2, las cuales son: Original ($a = 0.2637$, $b = 0.1$), Pinder ($a = 0.2637$, $b = 0.035$), y Modificada ($a = 0.1315$, $b = 0.2$). Se puede observar que la versión de Pinder presenta una mayor intrusión que la versión Original

²Se refiere a la línea de igual concentración C . En inglés se le llama “isochlor”.

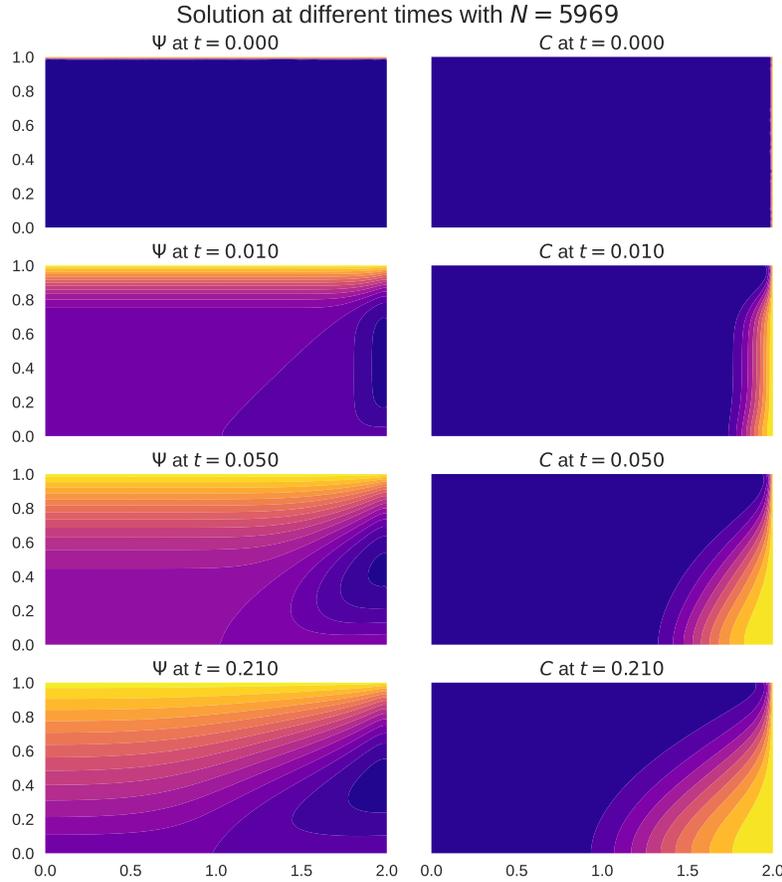


Figura 3.6: Solución del problema de Henry ($a = 0.2637$, $b = 0.1$) en diferentes tiempos t , usando $N = 5969$ nodos.

en la zona inferior; sin embargo, muestra una menor intrusión en la zona superior derecha. Debido a esto, la versión de Pinder tiene una pendiente mayor en la función de concentración en la zona superior derecha. Por otro lado, la versión modificada genera una mayor intrusión que las otras dos versiones, pero la pendiente resultante en la zona superior derecha no es tan pronunciada, lo que hace que la línea isoclora sea más suave.

En la Figura 3.10 se muestra la isoclora $C = 0.5$ con diferente número total de nodos N . Del lado izquierdo se pueden observar las obtenidas para la versión de Pinder, y del lado Derecho las obtenidas para la versión modificada. Se puede notar que al refinar la malla, la línea isoclora se suaviza y se obtienen soluciones donde la concentración C tiene una mayor intrusión en el interior del dominio. Sin embargo, se puede observar que en las líneas isocloras con $N = 2748$ y $N = 5969$, la solución no se modifica demasiado al seguir refinando, ya que ambas curvas son muy similares, esto indica que la solución está convergiendo.

Para comparar resultados, se suele utilizar una medida llamada x_{Toe} . El x_{Toe} representa la coordenada x en la que la isoclora $C = 0.5$ hace contacto con el eje horizontal (eje x). Una recopilación de los diferentes valores de x_{Toe} obtenidos en distintas referencias se presenta en la Tabla 3.3.

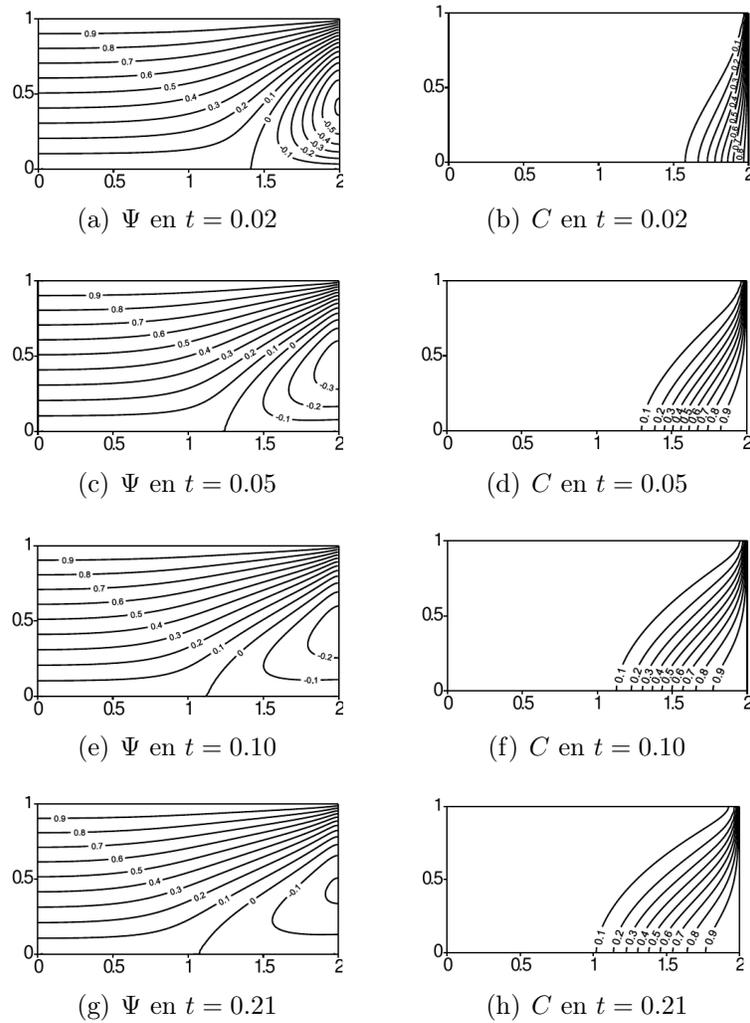


Figura 3.7: Solución del problema de Henry ($a = 0.2637$, $b = 0.1$) obtenida por [Li et al., 2014] usando $N = 3317$ nodos.

Original	Pinder	Modificado
1.089 [Henry, 1964a]	1.220 [Pinder and Cooper Jr, 1970]	1.074 [Langevin and Guo, 1999]
1.371 [Gotovac et al., 2003]	1.245 [Segol et al., 1975]	1.078 [Simpson and Clement, 2004]
1.393 [Simpson and Clement, 2004]	1.154 [Gotovac et al., 2003]	1.074 [Simpson and Clement, 2004]
1.373 [Meca et al., 2007]	1.158 [Meca et al., 2007]	1.059 [Meca et al., 2007]
1.380 [Li et al., 2014]	1.173 [Li et al., 2014]	1.056 [Li et al., 2014]
1.3510 [Román-Gutiérrez et al., 2022]	1.1620 [Román-Gutiérrez et al., 2022]	1.1230 [Román-Gutiérrez et al., 2022]

Tabla 3.3: Comparación de la posición de x_{Toe} para la isoclora $C = 0.5$.

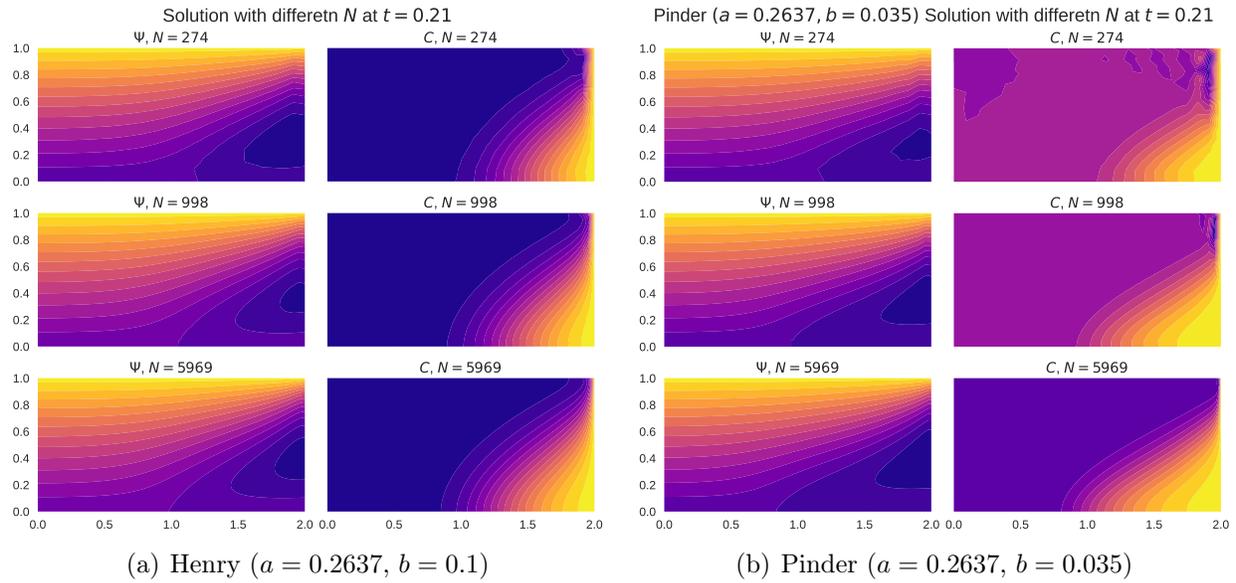


Figura 3.8: Solución de los problemas de Henry ($a = 0.2637, b = 0.1$) y Pinder ($a = 0.2637, b = 0.035$) con diferente N , en el tiempo $t = 0.21$.

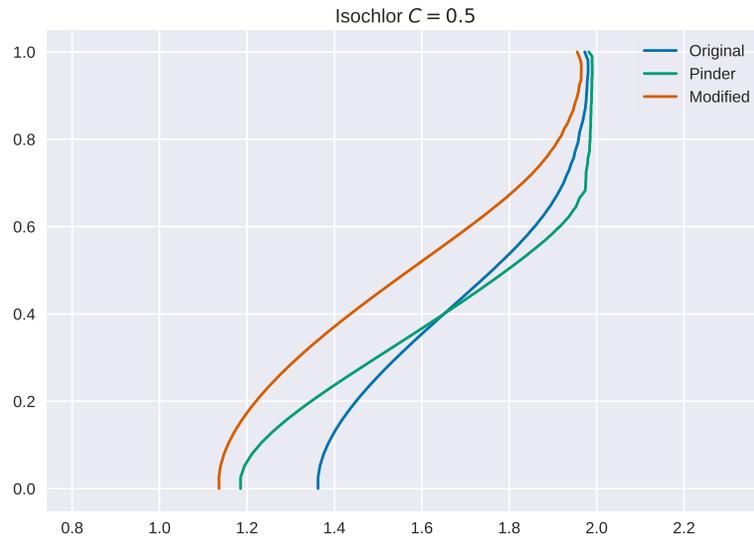


Figura 3.9: Isoclora $C = 0.5$ para las tres versiones del problema: Original ($a = 0.2637, b = 0.1$), Pinder ($a = 0.2637, b = 0.035$), Modificado ($a = 0.1315, b = 0.2$), en el tiempo estacionario $t = 0.21$, empleando $N = 2748$ nodos.

Por último, en la Figura 3.11 se muestran las soluciones en el tiempo $t = 0.21$ para las tres versiones (ver Tabla 3.2). En la parte superior se muestran las líneas de flujo Ψ , en el centro están las concentraciones C , y en la parte inferior se presenta el campo de velocidades. En esta Figura se pueden apreciar de manera general las diferencias entre los resultados obtenidos para cada una de

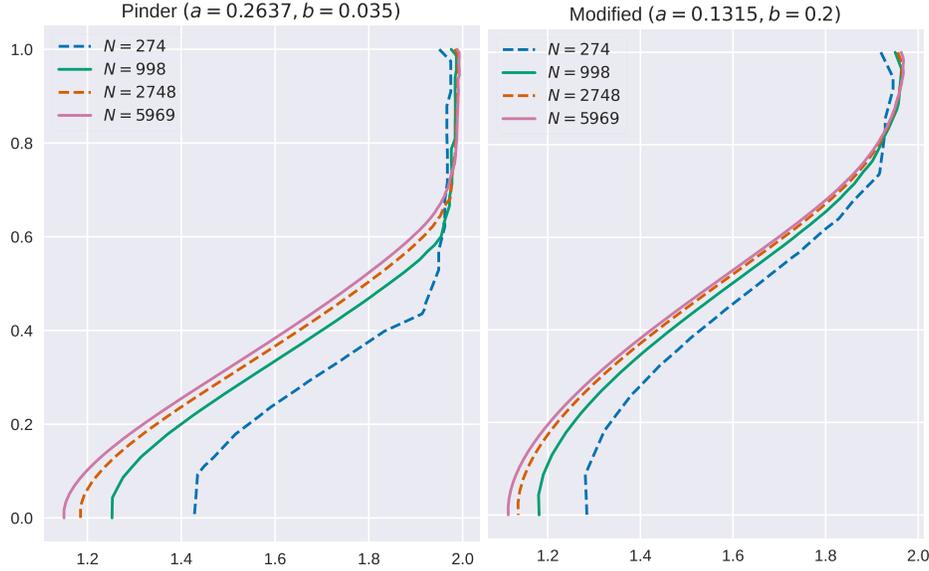


Figura 3.10: Isoclora $C = 0.5$ en las versiones de Pinder y Modificada, para diferente N , en el tiempo estacionario $t = 0.21$.

las versiones. La versión de Pinder muestra una mayor intrusión de agua salada en la parte inferior del dominio, pero menor en la zona superior; mientras que la versión modificada presenta mayor intrusión que las otras dos versiones, tanto en la zona superior como en la inferior. Esta intrusión provoca un flujo de entrada al dominio, generando así un vórtice en la zona inferior derecha, como se muestra en las gráficas de la función de flujo Ψ y de la velocidad. Es importante recordar que Ψ es una función potencial de las velocidades del flujo, por esta razón estas figuras presentan similitudes.

En la Tabla 3.4, se presentan los números de condición obtenidos para las matrices D ensambladas, utilizando diferentes números totales de nodos N . Es evidente que el problema exhibe una alta rigidez, como se refleja en los números de condición significativamente altos. Esta rigidez se puede agravar debido a los términos no lineales del problema, que resultan en la multiplicación de las matrices D_y^Ψ por D_x^C y las matrices D_x^Ψ por D_y^C , ambas con una rigidez considerable, como se detalla en la Tabla 3.4. A pesar de ello, se lograron obtener resultados aceptables, lo que sugiere la capacidad y robustez de GFDM.

	D_x^Ψ	D_y^Ψ	D_2^Ψ	D_x^C	D_y^C	D_2^C
$N = 274$	1.03×10^{18}	1.49×10^{11}	2.31×10^{03}	2.89×10^{12}	4.98×10^{17}	3.31×10^{03}
$N = 998$	3.48×10^{17}	1.58×10^{13}	1.21×10^{04}	5.61×10^{11}	1.01×10^{18}	1.74×10^{04}
$N = 2748$	1.32×10^{18}	1.94×10^{12}	4.41×10^{04}	7.23×10^{04}	2.08×10^{18}	6.60×10^{04}
$N = 5969$	7.13×10^{17}	3.29×10^{12}	1.17×10^{05}	3.33×10^{12}	3.22×10^{18}	1.76×10^{05}

Tabla 3.4: Números de condición obtenidos para las diferentes matrices obtenidas al discretizar la parte espacial del problema de Henry usando el esquema de GFDM propuesto.

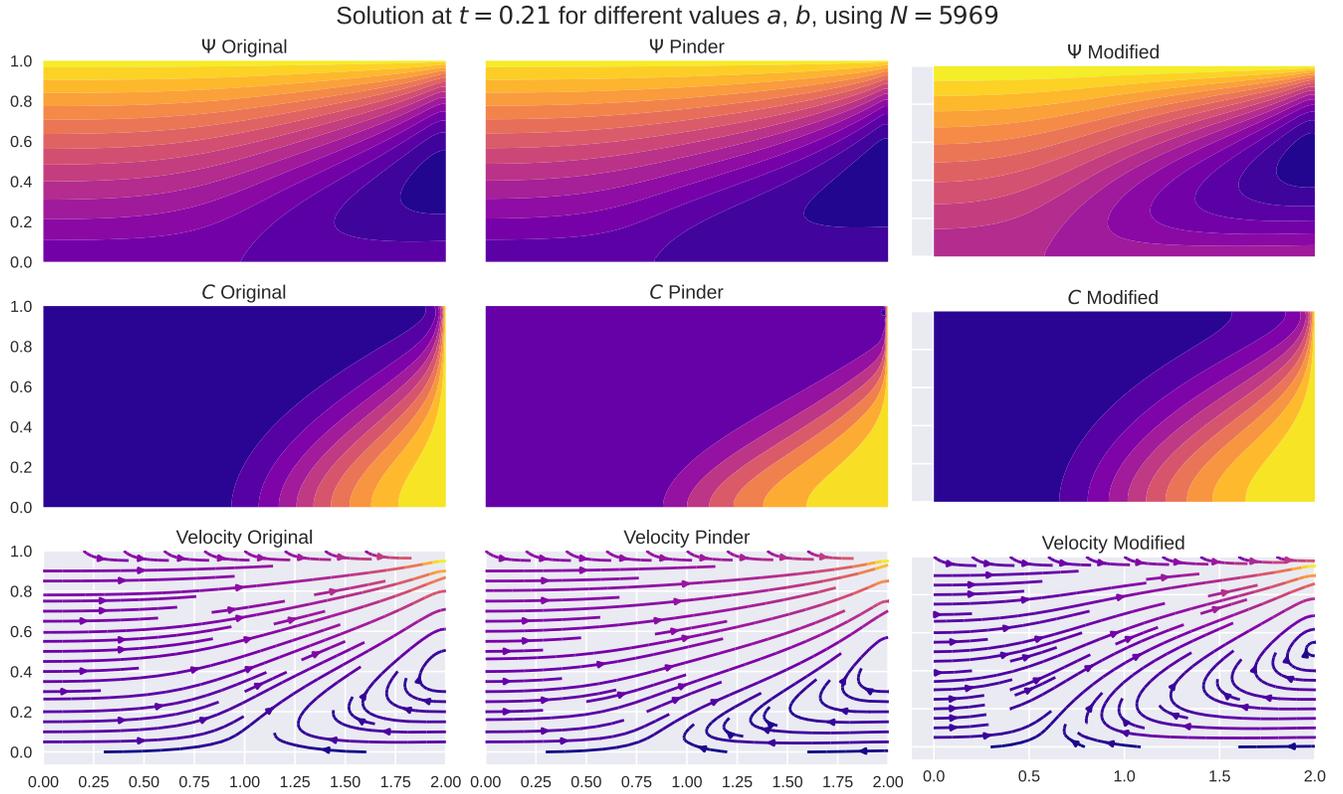


Figura 3.11: Función de flujo Ψ , Concentración C , y campo de velocidad, para las tres versiones del problema de Henry: Original ($a = 0.2637$, $b = 0.1$), Pinder ($a = 0.2637$, $b = 0.035$), Modificada ($a = 0.1315$, $b = 0.2$). Empleando $N = 5969$ nodos.

3.2. Problema de Elder

Las ecuaciones gobernantes que describen este problema son aquellas dadas por las ecuaciones (1.6)-(1.7):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - Ra \frac{\partial C}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = \frac{\partial C}{\partial t}.$$

El dominio está definido por el rectángulo $\Omega = [0, 4] \times [0, 1]$. Las condiciones de frontera para la función de flujo Ψ están dadas por

$$\Psi|_{\partial\Omega} = 0, \quad (3.11)$$

de tal forma que entonces la velocidad de flujo en todas las fronteras es cero:

$$v_x = \frac{\partial \Psi}{\partial y} = 0,$$

$$v_y = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0.$$

Por otro lado las condiciones de frontera para la concentración C están definidas como

$$C_n(x = 0, y) = 0, \quad (3.12)$$

$$C_n(x = 4, y) = 0, \quad (3.13)$$

$$C(x, y = 0) = 0, \quad (3.14)$$

$$C(1 \leq x \leq 3, y = 1) = 1, \quad (3.15)$$

$$C_n(x < 1 \text{ AND } x > 3, y = 1) = 0, \quad (3.16)$$

Las condiciones de frontera pueden observarse detalladamente en la Figura 1.9(b).

Análogamente que en el problema de Henry, en este problema las ecuaciones gobernantes están acopladas, por lo que es necesario discretizar cada operador diferencial por separado, quedando de la forma

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} \approx D_x^\Psi \Psi + F_x^\Psi, \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial y} \approx D_y^\Psi \Psi + F_y^\Psi, \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx D_x^C C + F_x^C, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} \approx D_y^C C + F_y^C, \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \approx D_2^\Psi \Psi + F_2^\Psi, \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \approx D_2^C C + F_2^C. \quad (3.22)$$

Entonces, sustituyendo las aproximaciones de las derivadas (3.17)-(3.22) en las ecuaciones gobernantes del problema (1.6)-(1.7), se obtienen las **ecuaciones gobernantes discretizadas** (3.23)-(3.24), en donde se ha discretizado la parte espacial del problema

$$D_2^\Psi \Psi - Ra D_x^{C\Psi} C + F_2^\Psi - Ra F_x^{C\Psi} = 0, \quad (3.23)$$

$$D_2^C C + F_2^C - [(D_y^{\Psi C} \Psi + F_y^{\Psi C}) * (D_x^C C + F_x^C) - (D_x^{\Psi C} \Psi + F_x^{\Psi C}) * (D_y^C C + F_y^C)] = \frac{dC}{dt}. \quad (3.24)$$

En la ecuación (3.23), la matriz $D_x^{C\Psi}$ es una modificación de la matriz D_x^C , y el vector $F_x^{C\Psi}$ es una modificación del vector F_x^C , en donde las filas de la matriz y los elementos del vector, correspondientes a los nodos de frontera, se han llenado con ceros. Esto se implementa con el objetivo de evitar las modificaciones en las condiciones de frontera dadas para la función de flujo Ψ . Por otro lado, en la ecuación (3.24), las matrices $D_y^{\Psi C}$, $D_x^{\Psi C}$, y los vectores $F_y^{\Psi C}$, $F_x^{\Psi C}$, son modificaciones de D_y^Ψ , D_x^Ψ , F_y^Ψ , y F_x^Ψ respectivamente, donde los valores correspondientes a los nodos de frontera se han llenado de ceros. Esto se realiza con el objetivo de evitar las modificaciones en las condiciones de frontera de la concentración C . El simbolo $*$ implica una multiplicación elemento a elemento entre dos vectores, ya que los productos matriz-vector (e.g. $D\Psi$, DC) resultan en un vector. Se puede notar que los elementos que están entre paréntesis en la ecuación (3.24) son los elementos **no lineales** del sistema.

Definiendo el vector solución U como

$$U = \begin{bmatrix} \Psi \\ C \end{bmatrix}.$$

Entonces, se puede escribir el sistema (3.23)-(3.24) de la forma

$$\frac{dU}{dt} = \begin{bmatrix} D_2^\Psi & -RaD_x^C \\ 0 & D_2^C \end{bmatrix} U + \begin{bmatrix} F_2^\Psi - RaF_x^C \\ -[(D_y^\Psi C + F_y^\Psi) * (D_x^C C + F_x^C) - (D_x^\Psi C + F_x^\Psi) * (D_y^C C + F_y^C)] \end{bmatrix}, \quad (3.25)$$

donde, del lado derecho, el primer término acopla la parte lineal del sistema, y el segundo término acopla la parte no lineal y los valores conocidos dados por las condiciones de frontera. Para resolver esta ecuación se utiliza el método Runge-Kutta-Fehlberg (RK45), el cual nos permite resolver problemas de valor inicial, implementado en la librería `scipy`, el cual se ejecuta de la forma

```
1 from scipy.integrate import solve_ivp
2
3 sol = solve_ivp(fun, t_span, U0, method='RK45')
```

Resolviendo el problema expresado en la ecuación (3.25), se obtiene la solución U para todos los nodos del dominio discretizado. Para este ejemplo se utilizaron diferentes discretizaciones, donde se modificó la variable `el_size_factor` que utiliza la librería `calfe-python` para refinar las mallas. En la Tabla 3.5 se muestran los valores de esta variable junto al número total de nodos N que se obtuvieron para este problema. Recordando que el dominio del problema de Elder tiene dos veces más longitud que el del problema de Henry (rectángulo $\Omega = [0, 4] \times [0, 1]$).

<code>el_size_factor</code>	N
0.1	533
0.06	1430
0.03	5453
0.027	6820

Tabla 3.5: Factor de refinamiento y número total de nodos N obtenidos para los ejemplos resueltos del problema de Elder.

En la Figura 3.12 se muestran los N nodos del dominio discretizado, diferenciando las diferentes fronteras mediante colores. Se puede observar que la frontera superior se ha dividido en tres segmentos: Top-a, Top-b y Top-c. Esto se realizó debido al cambio de las condiciones de frontera presentes en la parte superior del dominio. Además, se puede notar que las esquinas se han separado para manejar las condiciones de Neumann de la concentración C . Se consideró la esquina superior derecha como parte de la frontera derecha y la esquina superior izquierda como parte de la frontera izquierda; de esta manera, los vectores normales en las esquinas son simétricos, siendo en este caso los vectores $\hat{\mathbf{i}}$ y $-\hat{\mathbf{i}}$ respectivamente. Esto se llevó a cabo porque, al unir la frontera derecha con Top c y la frontera izquierda con Top a, los vectores no resultaban ser exactamente simétricos debido a que el dominio discretizado no es simétrico. Estas asimetrías son más evidentes en la Figura 3.12(d).

En la Figura 3.13 se muestra la solución de este problema, empleando un número de Rayleigh $Ra = 400$, y un total de $N = 6820$ nodos del dominio discretizado. Del lado izquierdo se muestra

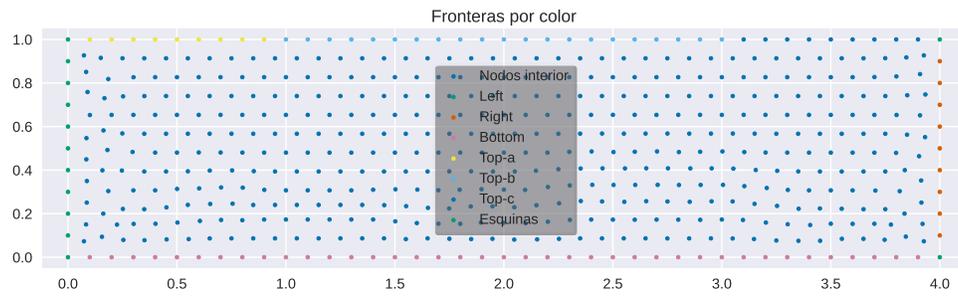
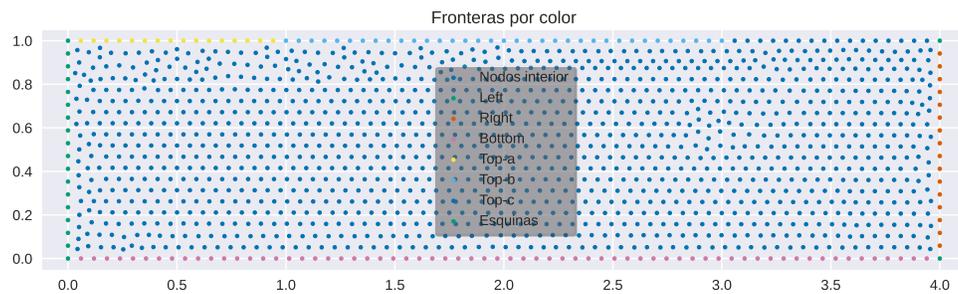
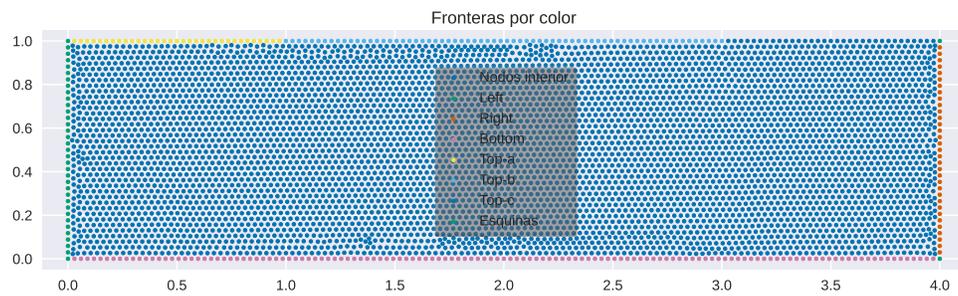
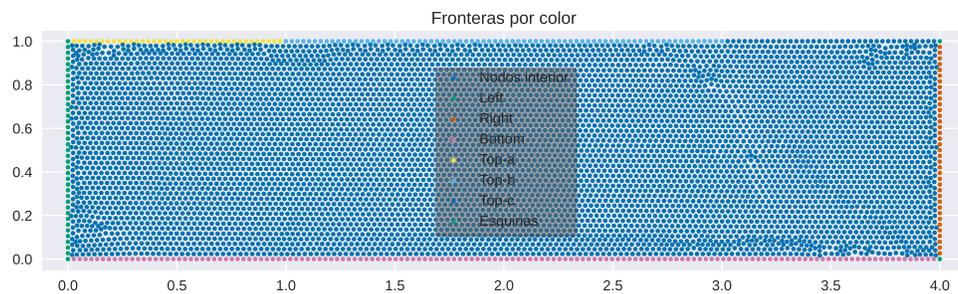
(a) $N = 533$ (b) $N = 1430$ (c) $N = 5453$ (d) $N = 6820$

Figura 3.12: Dominios discretizados, rectángulo $\Omega = [0, 4] \times [0, 1]$, para el problema de Elder, con las diferentes fronteras identificadas por color.

la Función de flujo Ψ y del lado derecho la concentración C . Ambas funciones se visualizan en diferentes tiempos, $t = 0.000$, $t = 0.015$, $t = 0.050$, $t = 0.100$, $t = 1.239$. Aunque las condiciones de frontera son simétricas vercialmente respecto al centro del dominio ($x = 2$), la solución obtenida presenta pequeñas asimetrías debido a que el dominio discretizado también presenta asimetrías en la distribución de los nodos.

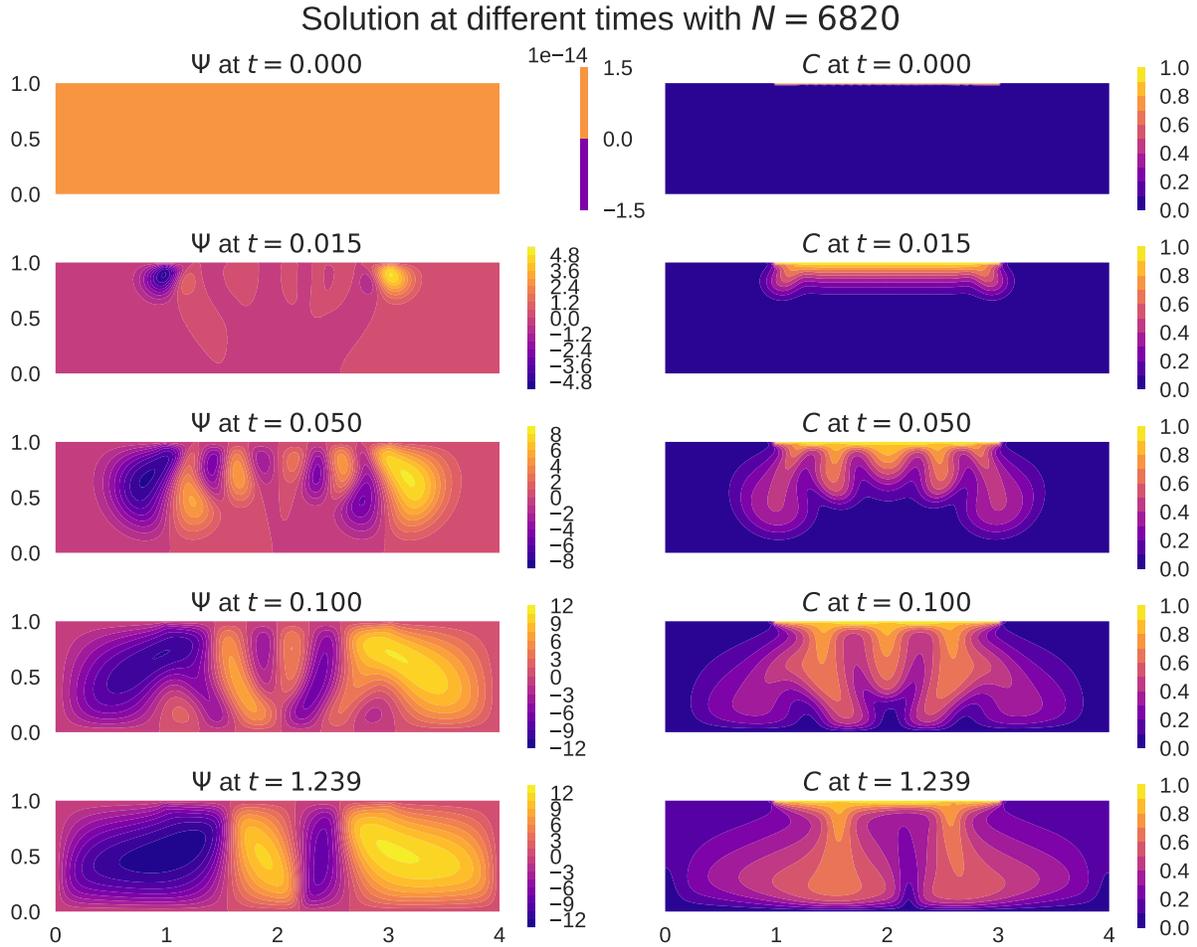


Figura 3.13: Solución del problema de Elder. Función de flujo Ψ (Izquierda) y Concentración C (Derecha) en diferentes tiempos: $t = 0.000$, $t = 0.015$, $t = 0.050$, $t = 0.100$, $t = 1.239$. Usando un total de $N = 6820$ nodos en el dominio.

En la Figura 3.14 se presenta la solución obtenida por [Li et al., 2014], utilizando un esquema de GFDM distinto al empleado en este trabajo. Para alcanzar esta solución, se utilizó un total de $N = 6597$ nodos. Se puede observar que solo se visualiza la mitad del dominio, y [Li et al., 2014] argumenta que esto se debe a la simetría del problema. Sin embargo, en este trabajo notamos que, debido a las asimetrías del dominio discretizado que se observan Figura 3.12, la solución puede presentar ligeras perturbaciones en la simetría de la misma.

Para evaluar numéricamente la consistencia del esquema de GFDM utilizado, en la Figura 3.15 se muestran las líneas isocloras $C = 0.2$ y $C = 0.6$ en el tiempo $t = 0.05$, utilizando diferentes números de nodos N en el dominio discretizado: $N = 533$, $N = 1430$, $N = 5453$ y $N = 6820$. Se

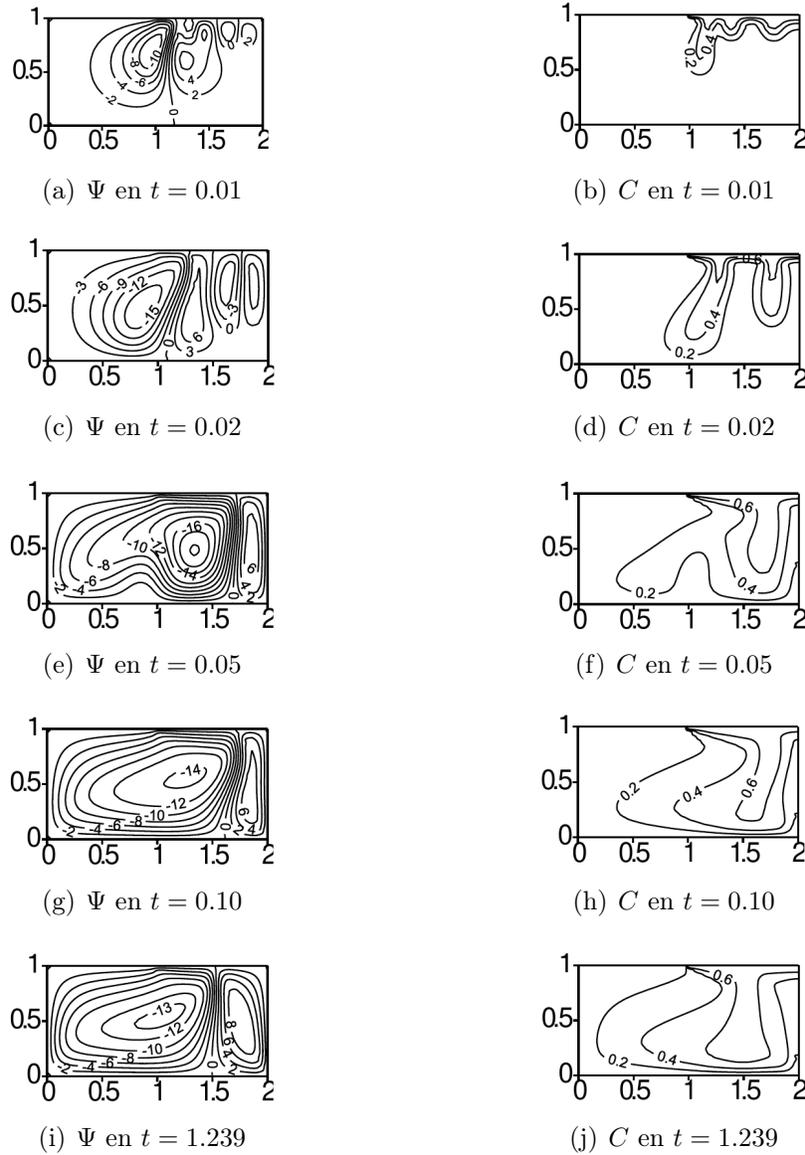


Figura 3.14: Solución del problema de Elder obtenida por [Li et al., 2014], utilizando un total del $N = 6597$ nodos.

puede observar que las concentraciones C en las soluciones con $N = 5453$ y $N = 6820$ son muy similares, lo que sugiere que el esquema de GFDM es consistente.

Por último, en la Figura 3.16 se muestra la solución en el tiempo $t = 1.239$, usando un total de $N = 6820$ nodos en el dominio discretizado. Se observa la función de flujo Ψ , la concentración C , y el campo vectorial de velocidades. Esta solución tiene consistencia con los resultados obtenidos por [Meca et al., 2007] y [Li et al., 2014].

En la Tabla 3.6 se presentan los números de condición de las matrices D utilizadas en el problema, para las distintas pruebas realizadas con diferentes números totales de nodos N . Es evidente que las matrices con mayor rigidez son D_x^C y D_y^C , las cuales están asociadas con los

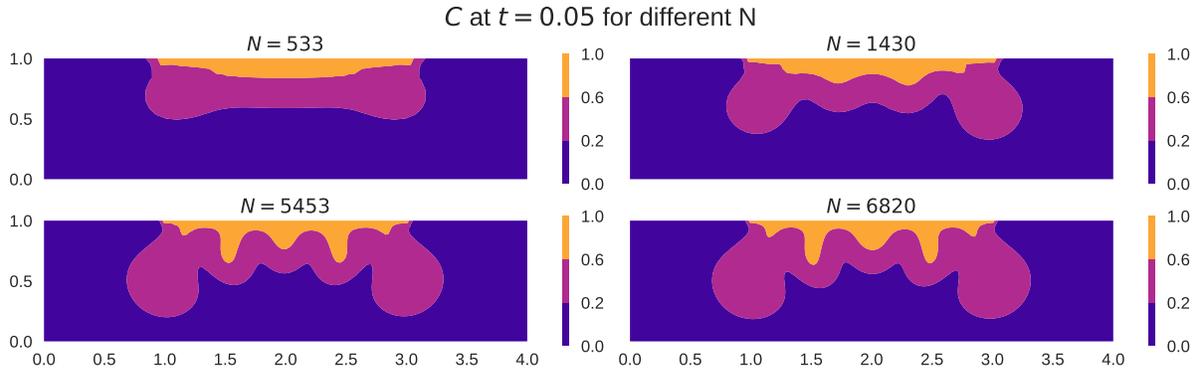


Figura 3.15: Isocloras $C = 0.2$ y $C = 0.6$ del problema de Elder en el tiempo $t = 0.05$, para diferente número de nodos N .

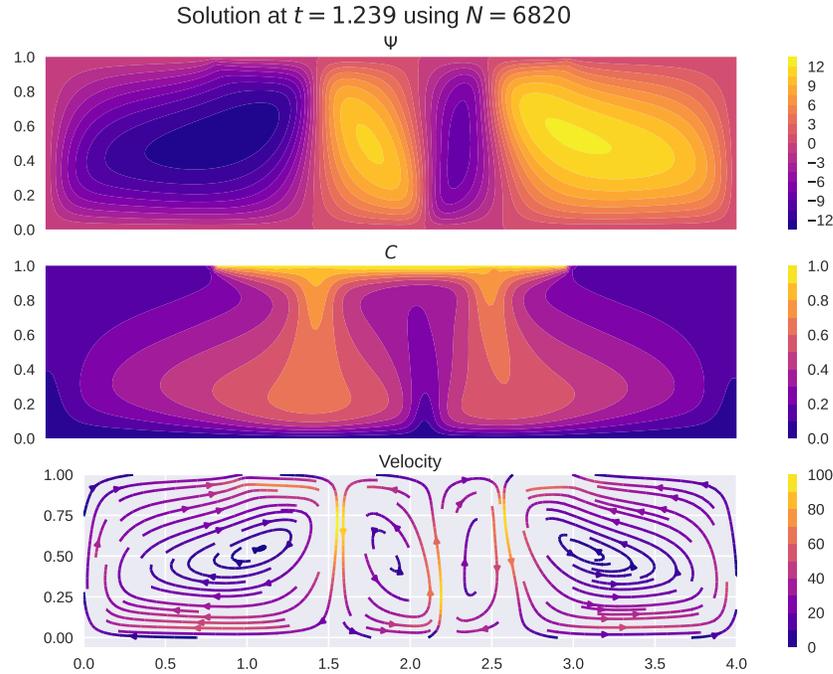


Figura 3.16: Solución del problema de Elder estacionaria ($t = 1.239$), empleando $N = 6820$ nodos.

términos no lineales del problema. Esta característica puede contribuir a incrementar aún más la rigidez del problema completo. Es importante destacar que, a pesar de esta alta rigidez, se lograron obtener resultados aceptables.

3.3. Convección Natural Difusiva Doble en un Medio Poroso Saturado (CNDD-MPS)

Como ya se ha mencionado, las ecuaciones gobernantes del problema CNDD-MPS, son parecidas a las ecuaciones del problema de Henry y del problema de Elder. La diferencia está en que

	D_x^Ψ	D_y^Ψ	D_2^Ψ	D_x^C	D_y^C	D_2^C
$N = 533$	$1.16e + 04$	$3.05e + 08$	$1.89e + 03$	$1.10e + 17$	$3.20e + 17$	$2.85e + 03$
$N = 1430$	$4.49e + 03$	$2.49e + 06$	$7.86e + 03$	$1.04e + 18$	$7.10e + 18$	$1.10e + 04$
$N = 5453$	$3.72e + 04$	$6.05e + 04$	$4.33e + 04$	$4.51e + 17$	$6.80e + 17$	$6.24e + 04$
$N = 6820$	$8.36e + 04$	$2.19e + 05$	$6.03e + 04$	$3.13e + 17$	$5.89e + 17$	$8.76e + 04$

Tabla 3.6: *Números de condición obtenidos para las diferentes matrices obtenidas al discretizar la parte espacial del problema de Elder usando el esquema de GFDM propuesto.*

se agrega una variable dependiente más, la cual es la temperatura T , y por ende es necesario considerar una ecuación gobernante extra. Las ecuaciones gobernantes de este problema están dadas por las ecuaciones (1.10)-(1.12):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + Ra \frac{\partial}{\partial x} (T + NC) &= 0, \\ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} - \frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - Le \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial C}{\partial y} \right) &= \frac{\partial C}{\partial t}. \end{aligned}$$

La otra diferencia importante a destacar es la geometría del dominio, el cual ya no es un rectángulo, sino un paralelogramo que tiene un ángulo de inclinación θ respecto del eje horizontal, como puede observarse en la Figura 1.10(a).

Los diferentes operadores diferenciales parciales, presentes en las ecuaciones gobernantes (1.10)-(1.12), se aproximan separadamente usando GFDM de la forma

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \frac{\partial \Psi}{\partial x} \approx D_x^\Psi \Psi + F_x^\Psi & \frac{\partial \Psi}{\partial y} \approx D_y^\Psi \Psi + F_y^\Psi & \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \approx D_2^\Psi \Psi + F_2^\Psi \\ \hline \frac{\partial T}{\partial x} \approx D_x^T T + F_x^T & \frac{\partial T}{\partial y} \approx D_y^T T + F_y^T & \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \approx D_2^T T + F_2^T \\ \hline \frac{\partial C}{\partial x} \approx D_x^C C + F_x^C & \frac{\partial C}{\partial y} \approx D_y^C C + F_y^C & \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \approx D_2^C C + F_2^C \\ \hline \end{array}. \quad (3.26)$$

Los superíndices de las matrices D y los vectores F representan las condiciones de frontera que se deben respetar al discretizar cada operador, ya sean las condiciones de la función de flujo Ψ , la temperatura T o la concentración C . Estas condiciones de frontera se pueden observar detalladamente en la Figura 1.10(b). Por otro lado, los subíndices x , y y 2 representan el tipo de operador diferencial que se está aproximando, ya sea una derivada en dirección x o y , o el operador laplaciano.

Usando las ecuaciones (3.26) para reemplazar las derivadas en la ecuaciones gobernantes (1.10)-

(1.12), se obtienen las ecuaciones gobernantes discretizadas (3.27)-(3.29)

$$D_2^\Psi \Psi + RaD_x^{T\Psi} T + RaND_x^{C\Psi} C + F_2^\Psi + RaF_x^{T\Psi} + RaNF_x^{C\Psi} = 0, \quad (3.27)$$

$$D_2^T T + F_2^T - (D_y^{\Psi T} \Psi + R_y^{\Psi T}) * (D_x^T T + F_x^T) + (D_x^{\Psi T} \Psi + F_x^{\Psi T}) * (D_y^T T + F_y^T) = 0, \quad (3.28)$$

$$D_2^C C + F_2^C - Le (D_y^{\Psi C} \Psi + F_y^{\Psi C}) * (D_x^C C + F_x^C) + Le (D_x^{\Psi C} \Psi + F_x^{\Psi C}) * (D_y^C C + F_y^C) = \frac{dC}{dt}. \quad (3.29)$$

Definiendo el vector solución U como

$$U = \begin{bmatrix} \Psi \\ T \\ C \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

Se puede organizar el sistema (3.27)-(3.29) de manera matricial como

$$\frac{dU}{dt} = AU + B(U), \quad (3.31)$$

donde la matriz A y el vector $B(U)$ están definidos como

$$A = \begin{bmatrix} D_2^\Psi & RaD_x^{T\Psi} & RaND_x^{C\Psi} \\ 0 & D_2^T & 0 \\ 0 & 0 & D_2^C \end{bmatrix},$$

$$B(U) = \begin{bmatrix} F_2^\Psi + RaF_x^{T\Psi} + RaNF_x^{C\Psi} \\ F_2^T - (D_y^{\Psi T} \Psi + F_y^{\Psi T}) * (D_x^T T + F_x^T) + (D_x^{\Psi T} \Psi + F_x^{\Psi T}) * (D_y^T T + F_y^T) \\ F_2^C - Le (D_y^{\Psi C} \Psi + F_y^{\Psi C}) * (D_x^C C + F_x^C) + Le (D_x^{\Psi C} \Psi + F_x^{\Psi C}) * (D_y^C C + F_y^C) \end{bmatrix},$$

donde los términos que aparecen entre paréntesis representan la parte no lineal del sistema. El problema de valor inicial (3.31) se resuelve utilizando las condiciones iniciales (1.13)-(1.15), las cuales indican condición inicial cero para las tres variables: Ψ , T , C . De esta forma la condición inicial dentro del dominio se puede expresar como

$$U_0(x, y, t = 0) = 0, \quad (3.32)$$

el cual es un vector de dimensión igual al número de nodos en el interior del dominio. Se debe tener en cuenta que las condiciones de frontera deben respetarse dentro del vector U_0 .

Entonces resolviendo el sistema (3.31) con las condiciones iniciales (1.13)-(1.15) acopladas en el vector U_0 , y respetando las condiciones de frontera (Figura 1.10(b)), se obtienen la solución del problema U . Para resolver la parte temporal del problema se utilizó el método Runge-Kutta-Fehlberg (RKF45) implementado en la librería `scipy`, el cual puede ser usado de la forma

```
1 from scipy.integrate import solve_ivp
2
3 sol = solve_ivp(fun, t_span, U0, method='RK45')
```

donde `fun` es una función anónima que acopla el lado derecho de la ecuación en función de la solución U y del tiempo $fun = fun(t, U) = A@U + B(U)$. El producto `@` en Python representa una multiplicación matricial, en este caso la matriz A por el vector U . `t_span` es una lista que describe el intervalo de tiempo en el que se resolverá la ecuación, en este caso se utilizó `t_span = [0, 0.13]`, y `U0` es el vector que define las condiciones iniciales del sistema dadas por (1.13)-(1.15), respetando los valores de las condiciones de frontera mostradas en la Figura 1.10(b).

Para este problema se utilizaron dos discretizaciones, las cuales se realizaron utilizando la librería `calfe-python`, donde se modificó el parámetro `el_size_factor` para refinar la malla. Los dos valores usados y el correspondiente número de nodos obtenido N_{nodos} se muestran en la Tabla 3.7.

<code>el_size_factor</code>	N_{nodos}
0.03	451
0.02	976

Tabla 3.7: Factor de refinamiento y número total de nodos N_{nodos} obtenidos para los ejemplos resueltos del problema CNDD-MPS.

En la Figura 3.17 se puede observar el dominio discretizado para este problema. En la Figura 3.17(a) se muestra una discretización con $N_{\text{nodos}} = 451$, mientras que en la Figura 3.17(b) se muestran $N_{\text{nodos}} = 976$. Para esta discretización, se consideraron las esquinas del dominio como parte de las fronteras con condiciones de Dirichlet (para la concentración C y la temperatura T), dado que es más conveniente tratar con este tipo de condiciones. Se pueden ver en color verde la frontera izquierda y en color naranja la frontera derecha, ambas con condiciones de Dirichlet. Por otro lado, en color amarillo y en color rosa se muestran las fronteras superior e inferior, respectivamente, las cuales cuentan con condiciones de Neumann. Una vista detallada de las condiciones de frontera se muestra en la Figura 1.10(b).

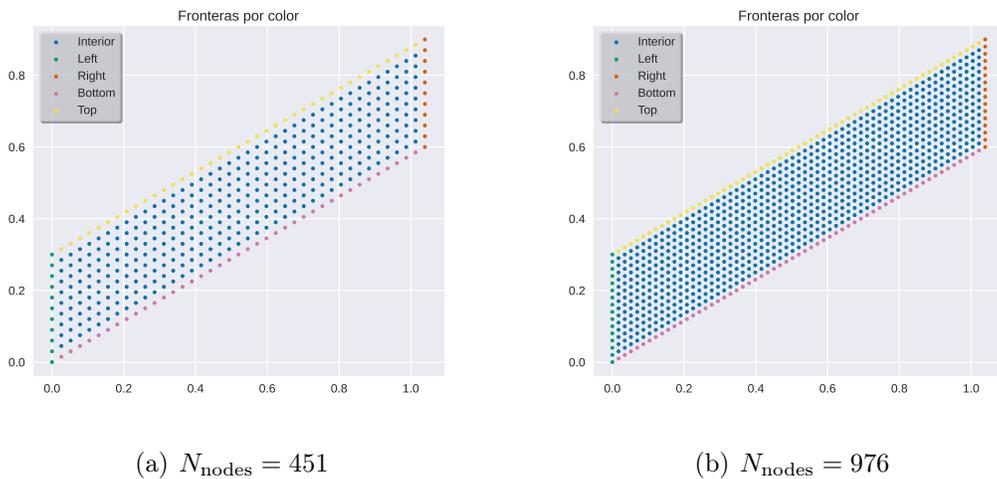


Figura 3.17: Dominio discretizado para el problema CNDD-MPS, donde los nodos de frontera están resaltados en diferentes colores.

Este problema se resolvió utilizando un número de Rayleigh $Ra = 100$, número de Lewis $Le = 0.8$, tasa de flotabilidad $N = 2$. Estos parámetros fueron tomados de los ejemplos mostrados en [Li et al., 2018] y [Costa, 2004], donde se resuelve el caso estacionario de CNDD. Al no encontrar un valor para el tiempo estacionario se propuso un tiempo estacionario de $t_{est} = 0.13$, ya que después de este tiempo la diferencia en solución obtenida resulta poco significativa. En la figura 3.18 se muestra la solución obtenida en diferentes tiempos t , usando un total de $N_{nodos} = 976$ nodos. Específicamente se muestran los tiempos $t = 0.000$, $t = 0.015$, y $t = 0.130$. La solución obtenida en el tiempo $t = 0.130$ concuerda con la solución estacionaria de [Li et al., 2018, Costa, 2004].

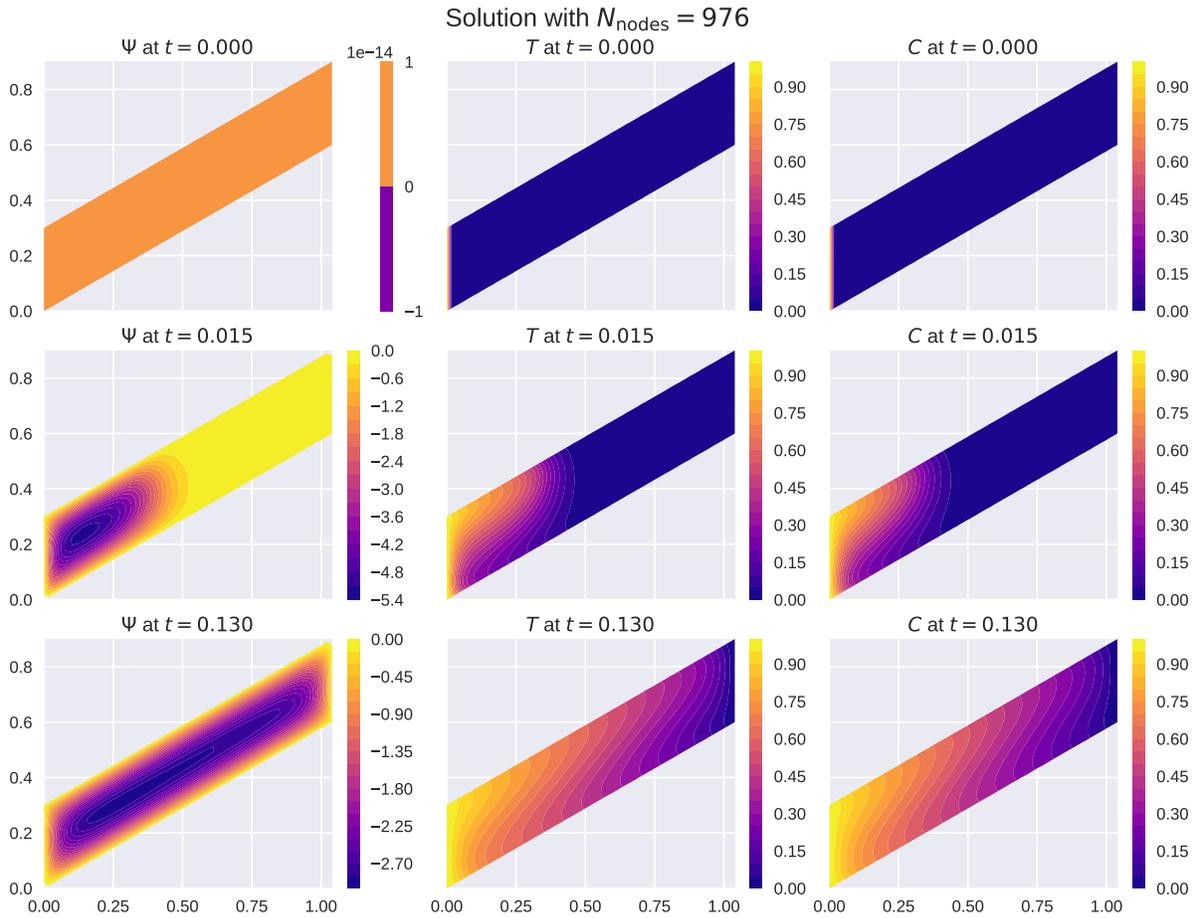


Figura 3.18: Solución del problema CNDD-MPS usando $N_{nodos} = 976$, $Ra = 100$, $Le = 0.8$, $N = 2$, $t_{est} = 0.13$.

En la Figura 3.19 se presentan los resultados para la solución del problema estacionario, $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$, de CNDD-MPS. En el lado izquierdo se muestra la solución obtenida en [Li et al., 2018], mientras que en el lado derecho se presenta la solución proporcionada por [Costa, 2004]. Por otro lado, los parámetros mencionados en [Li et al., 2014] son: $\theta = 30^\circ$, $H/L = 0.5$, $Ra = 100$, $N = 2$, $Le = 0.8$, $T_0 = 0.5$, $C_0 = 0$, $\Psi_0 = 0$, y $N = 1094$. Los parámetros mencionados en [Costa, 2004] son: $\theta = 30^\circ$, $H/L = 0.5$, $Ra = 100$, $N = 2$, y $Le = 0.8$. Se puede observar que los resultados de la Figura 3.18 son similares a los obtenidos en [Li et al., 2018, Costa, 2004] y mostrados en la Figura 3.19.

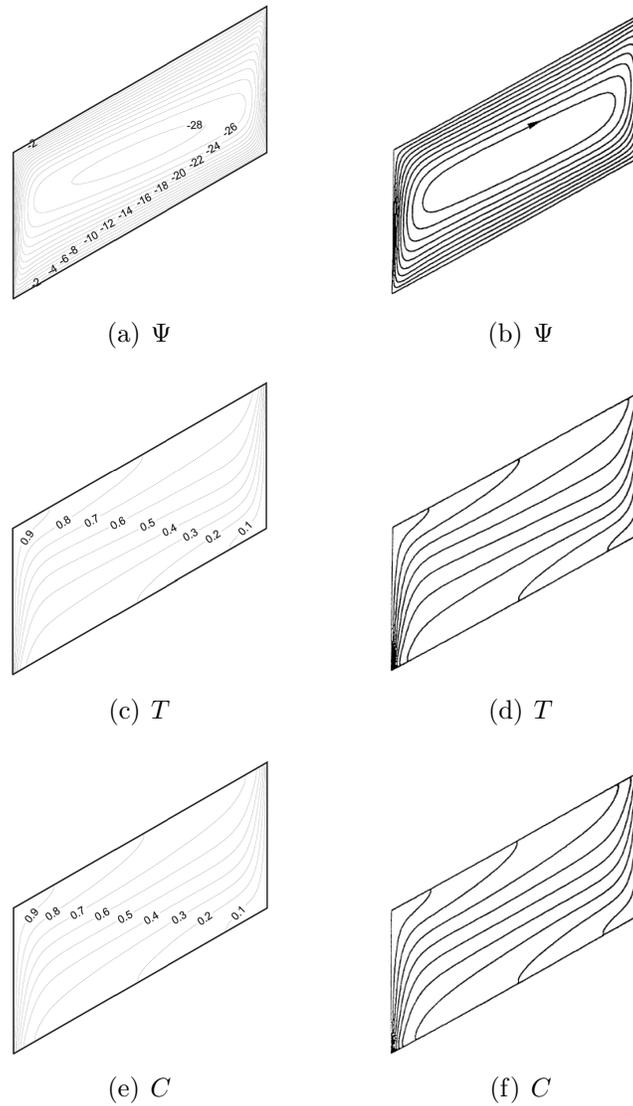


Figura 3.19: Solución del problema estacionario, $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$, de CNDD. Soluciones obtenidas por [Li et al., 2018] (izquierda) y [Costa, 2004] (derecha).

Para demostrar la consistencia del esquema de GFDM propuesto, en la Figura 3.20 se muestran las isocloras $C = 0.2$ y $C = 0.6$ para diferentes números de nodos: $N_{\text{nodos}} = 451$ y $N_{\text{nodos}} = 976$. Se puede observar que las isocloras se vuelven más suaves al aumentar el número de nodos. Además, se nota que las soluciones son muy similares, lo que sugiere que son soluciones válidas.

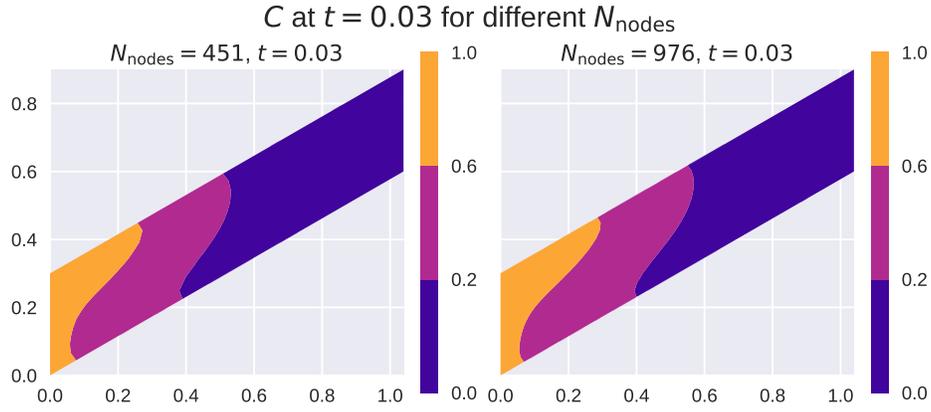


Figura 3.20: Isocloras $C = 0.2$ y $C = 0.6$ en el tiempo $t = 0.03$

En la Tabla 3.8, se presentan los números de condición de las matrices D del problema para los dos casos estudiados: $N_{\text{nodes}} = 451$ y $N_{\text{nodes}} = 976$. Se observa que las matrices D_x y D_y exhiben una mayor rigidez, siendo estas matrices parte de los términos no lineales del problema. Esto contribuye a aumentar la rigidez del problema completo. A pesar de ello, se han obtenido resultados aceptables, lo que sugiere la capacidad de GFDM.

	D_x^Ψ	D_y^Ψ	D_2^Ψ	D_x^T	D_y^T	D_2^T	D_x^C	D_y^C	D_2^C
$N_{\text{nodes}} = 451$	3.71×10^{11}	5.25×10^{10}	1.50×10^{04}	2.21×10^{14}	1.69×10^{16}	3.28×10^{04}	2.21×10^{14}	1.69×10^{16}	3.28×10^{04}
$N_{\text{nodes}} = 976$	7.47×10^{11}	3.04×10^{04}	4.09×10^{04}	3.13×10^{12}	4.36×10^{10}	9.02×10^{04}	3.13×10^{12}	4.36×10^{10}	9.02×10^{04}

Tabla 3.8: Números de condición obtenidos para las diferentes matrices obtenidas al discretizar la parte espacial del problema de CNDD-MPS usando el esquema de GFDM propuesto.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Conclusiones y trabajo futuro

“Es imposible ser matemático sin ser un poeta del alma.”
- Sofia Kovalévskaya.

En este trabajo presentamos un esquema del Método de Diferencias Finitas Generalizadas (GFDM) que no requiere una función de peso. Este esquema ha demostrado ser útil para obtener soluciones a diferentes problemas relacionados con flujos de aguas subterráneas, incluyendo el problema de Elder, el problema de Henry y el de la convección natural difusiva doble. Estos problemas ofrecen un gran potencial para analizar el impacto ambiental en acuíferos, especialmente en aquellos cercanos a las costas. Además, son cruciales como pruebas para evaluar métodos numéricos y pueden ser valiosos para mejorar la gestión de los recursos hídricos, particularmente en acuíferos afectados por la sobreexplotación.

GFDM se ha destacado como una herramienta poderosa para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, especialmente en situaciones donde los parámetros físicos y geométricos tienen una influencia significativa en el comportamiento de la solución. Cabe destacar que muchos problemas físicos se describen mediante modelos matemáticos expresados a través de ecuaciones diferenciales parciales.

El esquema GFDM produce resultados satisfactorios en comparación con otras metodologías. Su flexibilidad permite adaptarse eficazmente a dominios irregulares, que suelen ser discretizados mediante mallas o nubes de nodos distribuidos de manera no estructurada. Además, la robustez de GFDM es notable en problemas complejos, donde la interacción de múltiples factores puede dificultar la resolución. Esto se observa en las ecuaciones gobernantes de los problemas resueltos, las cuales presentan acoplamiento y no linealidad. La capacidad de GFDM para manejar eficientemente ecuaciones diferenciales parciales en sistemas complicados lo convierte en una herramienta valiosa para la investigación y el análisis de fenómenos físicos complejos.

Para validar nuestro esquema propuesto, llevamos a cabo pruebas con diferentes números totales de nodos, representados por N . Las principales diferencias entre nuestro enfoque y los métodos propuestos por otros autores son las siguientes. En primer lugar, empleamos únicamente 6 nodos de soporte q , a diferencia de los 12, 16 y 20 nodos utilizados en investigaciones anteriores, tales como [Li et al., 2014, Li et al., 2018, Costa, 2004, Benito et al., 2001]. En muchos estudios, se establece un número de 27 nodos de soporte para problemas en 2D. La utilización de un menor número de nodos de soporte, como se sugiere en este trabajo, conlleva a matrices de diferenciación más dispersas. Si bien es necesario reconocer que problemas con capas límite fuertes o zonas de alto gradiente podrían requerir un mayor número de nodos de soporte q . En última instancia, el número

de nodos de soporte depende del problema y requiere una investigación adicional. Segundo, debido a que generamos los nodos de soporte a partir de nubes inicialmente estructuradas, la selección de nodos de soporte es automática y muy simple. Por otro lado en los documentos mencionados anteriormente se tuvo que implementar un algoritmo adicional para la selección de los nodos de soporte. Una característica importante es que el esquema propuesto, no se requiere una función de peso. Esta también es una diferencia relevante con respecto a otras variantes del método, ya que, en consecuencia, el esquema es más simple que los utilizados en [Li et al., 2018, Benito et al., 2001].

Los problemas relacionados con el flujo de agua subterránea son esenciales para entender los fenómenos de transporte que ocurren dentro de los acuíferos. Son especialmente importantes en la gestión sostenible de los recursos hídricos, particularmente en las regiones costeras, donde la intrusión de agua salada puede convertirse en un desafío significativo. Otro factor relevante es la difusión de contaminantes en estos acuíferos, como por ejemplo: metales pesados, pesticidas o, como ya mencionamos, el agua salada, entre otros. Además, el aumento en la demanda de agua, impulsado por el cambio climático, la agricultura y el crecimiento urbano, ha incrementado estos problemas. Asimismo, estos factores han provocado un aumento en la producción de residuos y, en consecuencia, en la proliferación de vertederos, los cuales pueden actuar como fuentes de contaminación del agua subterránea.

Debido a que el agua subterránea es utilizada por una gran parte de la población como fuente de agua de uso doméstico, es de vital importancia entender estos fenómenos, ya que su contaminación puede conllevar riesgos graves para la salud, como enfermedades relacionadas con la exposición a metales pesados o sustancias químicas peligrosas. Además, la degradación de la calidad del agua subterránea también puede afectar el suministro agrícola e industrial, limitando el acceso a este recurso en sectores que dependen de su disponibilidad.

Por otro lado, los efectos sobre la infraestructura no son menores. La contaminación del agua subterránea puede generar el deterioro de redes de distribución de agua potable, sistemas de riego y otras instalaciones hidráulicas, lo que a su vez eleva los costos de mantenimiento y reparación. En áreas costeras, la intrusión de agua salada no solo reduce la calidad del agua, sino que también puede afectar suelos agrícolas, provocando la pérdida de fertilidad y comprometiendo la producción alimentaria.

Los resultados de las pruebas numéricas muestran que el GFDM es un método numérico alternativo interesante para resolver problemas de flujo de agua subterránea. Teniendo en cuenta los resultados de este documento y los de las referencias, esto sugiere que el GFDM también es una opción para resolver un rango más amplio de ecuaciones diferenciales parciales.

Para un trabajo futuro se busca abordar otros problemas de convección-difusión, como la ecuación de Richards, que resulta especialmente relevante en hidrología y estudios de suelos. Esta ecuación describe cómo se desplaza el agua a través de un medio poroso en respuesta a gradientes de presión. Mediante el esquema de GFDM propuesto, es posible implementar esta ecuación en dominios con diversas geometrías y condiciones de frontera, permitiendo simular una amplia variedad de situaciones.

También se pretende desarrollar una formulación del GFDM que sea aplicable a situaciones en las que el dominio contiene dos materiales con propiedades distintas. En este contexto, el lugar

en el que ocurre el cambio de un material a otro se denomina “interfaz”, y este tipo de problemas se conocen como problemas multicapa. Con frecuencia, para simplificar la resolución de muchos problemas, se asume que el material en estudio es homogéneo e isotrópico, aunque en la realidad esto es poco común. Los problemas multicapa nos permiten tener una primera aproximación a la complejidad que implica tener un material heterogéneo en el dominio de estudio.

Por último, es importante mencionar que hasta ahora sólo se han abordado problemas en 2D, principalmente debido a las complicaciones que surgen al agregar una dimensión adicional para resolver problemas en 3D. No obstante, existe un interés considerable en ampliar la metodología utilizada a problemas tridimensionales. Este paso hacia el 3D se busca con el objetivo de abordar situaciones más complejas y proporcionar soluciones más precisas y detalladas. La extensión a problemas en tres dimensiones permitirá una representación más fiel de la realidad en diversos campos de aplicación, brindando así un enfoque más completo y robusto para la resolución de problemas mediante un esquema de GFDM adecuado.

Esta página ha sido dejada en blanco intencionalmente.

Anexos

“Dame un punto de apoyo y moveré el mundo.”
- Arquímedes.

Anexo A: Métodos usados para la integración temporal

A continuación se describen brevemente diferentes métodos de integración comúnmente usados para resolver ODEs, los cuales, en este trabajo son empleados para resolver la parte temporal de algunos problemas. Cada método presenta un ejemplo 1D y uno 2D para referencia.

Método de Euler hacia adelante

El objetivo es obtener una aproximación al problema de valor inicial

$$\dot{u} = f(t, u) \quad , \quad u(t_0) = u_0 . \quad (3.33)$$

Se puede emplear la expansión en serie de Taylor hasta segundo orden, como se hizo en la sección 2.2, para obtener una ecuación análoga a la Diferencia hacia adelante (2.6), pero en esta ocasión es una aproximación en el tiempo t en lugar del espacio x

$$\dot{u} \approx \frac{u_{l+1} - u_l}{\Delta t} . \quad (3.34)$$

Sustituyendo la derivada temporal (3.34) en el problema de valor inicial (3.33) tenemos

$$\frac{u_{l+1} - u_l}{\Delta t} = f(t_l, u_l) .$$

Despejando se obtiene el conocido **método de Euler** (o **método de Euler-Cauchy**)

$$u_{l+1} = u_l + \Delta t f(t_l, u_l) \quad , \quad l = 0, 1, 2, \dots , \quad (3.35)$$

el cual es un método recursivo, donde se obtiene la aproximación actual utilizando la aproximación anterior. Si se usa $l = 0$ se obtiene la ecuación para el primer paso de tiempo, el cual utilizando la condición inicial u_0 como la aproximación del paso anterior

$$u_1 = u_0 + \Delta t f(t_0, u_0) .$$

El error de este método es de orden $O(\Delta t)$ [Iserles, 2009, Kreyszig, 2009].

Ejemplo: Método de Euler en 1D para resolver $\dot{u} = \alpha u$ con $u(t = 0) = 1$ y $\alpha = 2$.

La solución analítica de este problema es sencilla de obtener, integrando y usando la condición inicial para obtener la constante de integración. La solución analítica de este problema es

$$u = u(0)e^{\alpha t}.$$

En este ejemplo la condición inicial es $u(0) = 1$, y la constante es $\alpha = 2$, con lo cual se tiene la solución

$$u = e^{2t}. \quad (3.36)$$

Por otro lado el método de Euler para este ejemplo se puede expresar de la forma

$$\begin{aligned} u_{l+1} &= u_l + \alpha \Delta t u_l, \\ &= u_l + 2\Delta t u_l, \\ &= (1 + 2\Delta t)u_l. \end{aligned}$$

Resolviendo en el intervalo $[0, 1]$ y utilizando $N = 11$ nodos, el paso de tiempo resulta en $\Delta t = \frac{1-0}{11-1} = 0.1$, con lo cual se obtienen los errores mostrados en la Tabla 3.9. En la Figura 3.21 se

t	u_{ex}	u_{num}	$u_{ex} - u_{num}$
0.0	1.00	1.00	0.00
0.1	1.22	1.18	0.04
0.2	1.49	1.40	0.10
0.3	1.82	1.65	0.17
0.4	2.23	1.95	0.27
0.5	2.72	2.31	0.41
0.6	3.32	2.72	0.60
0.7	4.06	3.22	0.84
0.8	4.95	3.81	1.15
0.9	6.05	4.50	1.55
1.0	7.39	5.32	2.07
$\ u_{ex} - u_{num}\ _2 = 3.0604$			

Tabla 3.9: Errores obtenidos con el método de Euler, para el problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, usando $N = 11$ nodos.

puede observar la comparación de la solución exacta con la solución numérica obtenida usando el método de Euler.

Ejemplo: Método de euler para resolver la ecuación del calor en 2D con GFDM.

La **ecuación del calor** se puede expresar de la forma

$$\nabla^2 u + f = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (3.37)$$

Método de Euler hacia adelante 1D

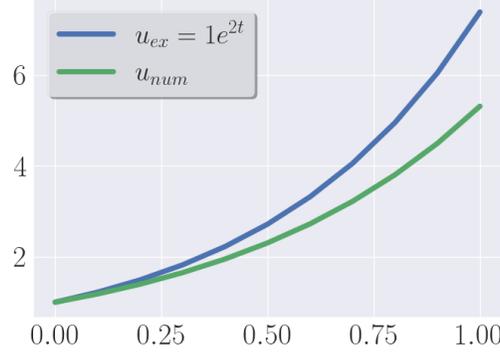


Figura 3.21: Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$, usando el método de Euler con $N = 11$ nodos.

donde se puede notar que si se anula la parcial del respecto del tiempo $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, lo cual representa el problema en estado estacionario, entonces se obtiene la ecuación de Poisson (2.30).

Después de discretizar la parte espacial del problema utilizando GFDM, se puede expresar esta ecuación como

$$\frac{dU}{dt} = D_2U + F, \quad \text{con} \quad U(t_0) = U_0, \quad (3.38)$$

el cual es un problema de valor inicial, donde U es el vector solución.

Resolveremos en el dominio descrito por el rectángulo $\Omega = [0, 3] \times [0, 1]$. Para este ejemplo utilizaremos las siguientes condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} u|_l &= u(x = 0, y, t) = 1, \\ u|_r &= u(x = 3, y, t) = 0, \\ u_n|_b &= u_n(x, y = 0, t) = 0, \\ u_n|_t &= u_n(x, y = 1, t) = 0. \end{aligned}$$

La condición inicial, para los nodos interiores y las condiciones de neumann u_n , está dada por

$$u(x, y, t = 0) = 0.$$

La condición inicial para los nodos de frontera de Dirichlet, está dada por

$$\begin{aligned} u(x = 0, y, t = 0) &= 1, \\ u(x = 3, y, t = 0) &= 0, \end{aligned}$$

esto para que coincidan con el valor de la condición de frontera dado. Se usará la fuente

$$f(x, y, t) = 0.$$

Al emplear el método de euler, para resolver el problema de valor inicial (3.38), entonces se obtiene la ecuación

$$\begin{aligned} U_{l+1} &= U_l + \Delta t(D_2 U_l + F_l), \\ U_{l+1} &= (I + \Delta t D_2) U_l + \Delta t F_l, \end{aligned} \quad (3.39)$$

donde I es una matriz identidad del mismo tamaño que D_2 . Para este ejemplo se utilizó un tiempo total de $t_{\text{Tot}} = 1.6$, con un paso de tiempo $\Delta t = 0.0001$, necesitando un total de 16,000 iteraciones para completar la solución en el intervalo $t = [0, 1.6]$. Se graficó la solución en diferentes tiempos t_l . Estas gráficas se muestran en la Figura 3.22.

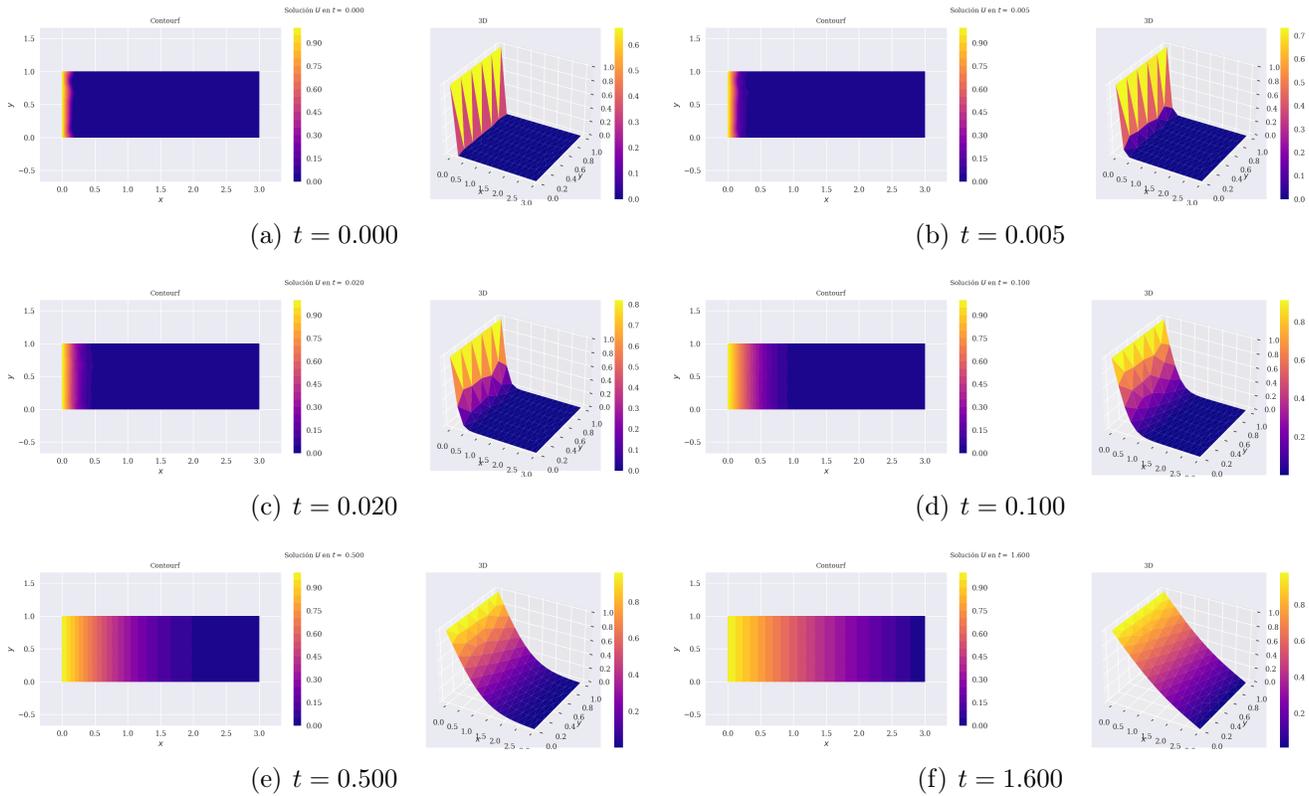


Figura 3.22: Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método de Euler hacia adelante para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 16,000 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$.

Método de Euler hacia atrás (Euler implícito)

El método de Euler hacia atrás (BE³) es muy parecido al método de Euler hacia adelante (FE⁴). Podemos obtenerlo a partir de la formula de la diferencia hacia atrás (2.7), pero ahora

³Siglas en inglés de “Backward Euler”.

⁴Siglas en inglés de “Forward Euler”.

aplicada al tiempo, de la forma

$$\dot{u} \approx \frac{u_l - u_{l-1}}{\Delta t}. \quad (3.40)$$

Sustituyendo esta aproximación (3.40) en el problema de valor inicial $\dot{u} = f(t, u)$ (3.33), se obtiene

$$\frac{u_l - u_{l-1}}{\Delta t} = f(t_l, u_l).$$

Despejando se obtiene el método **BE**, el cual en ocasiones también es llamado **método de Euler Implícito**.

$$u_l - \Delta t f(t_l, u_l) = u_{l-1}, \quad \text{con} \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.41)$$

El cual es un método iterativo que es necesario resolver para u_l . Dado que se f está evaluada en el paso de adelante l , en lugar del paso actual $l - 1$, entonces se dice que es un método implícito. Por el contrario el método de Euler hacia adelante, se evalúa para el paso actual, por lo que es un método explícito.

Si f es una función lineal es sencillo despejar u_l para obtener una ecuación explícita. Si f es una función no lineal, entonces es necesario encontrar el cero de la función

$$g(t_l, u_l) = u_l - \Delta t f(t_l, u_l) - u_{l-1}.$$

Una opción sería utilizar el método de Newton [LeVeque, 2007].

El método de BE es computacionalmente más costoso en cada iteración que el método FE, sin embargo la ventaja radica en la estabilidad del método (ver Anexo B), pudiendo usar un paso de tiempo Δt más grande y por lo tanto reducir considerablemente el número de iteraciones totales. Para entender mejor como se utiliza este método a continuación se verá un ejemplo en 1D y un ejemplo en 2D.

Ejemplo: BE en 1D para resolver $\dot{u} = \alpha u$, con $u(0) = 1$ y $\alpha = 2$.

Recordando, la solución exacta de este problema

$$\frac{du}{dt} = 2u, \quad \text{con} \quad u(0) = 1,$$

está dada por la ecuación (3.36):

$$u = e^{2t}.$$

Aplicando el método BE (3.41) a este ejemplo, en el cual el lado derecho del problema de valor inicial (3.33) resulta

$$f(t, u) = 2u,$$

y entonces se tiene la ecuación

$$u_l - \Delta t 2u_l = u_{l-1}.$$

Despejando se obtiene

$$(1 - 2\Delta t)u_l = u_{l-1},$$

$$u_l = \frac{1}{1 - 2\Delta t}u_{l-1}.$$

Aquí se presentan las ecuaciones iterativas que se obtuvieron con los métodos FE y BE a forma de comparación.

$$\text{FE } u_{l+1} = (1 + 2\Delta t)u_l \quad ,$$

$$\text{BE } u_l = \frac{1}{1 - 2\Delta t}u_{l-1} \quad .$$

Resolviendo en el intervalo $[0, 1]$ y utilizando $N = 11$ nodos, el paso de tiempo resulta en $\Delta t = \frac{1-0}{11-1} = 0.1$, con lo cual se obtienen los errores mostrados en la Tabla 3.10. En la Figura 3.23

t	u_{ex}	u_{num}	$u_{ex} - u_{num}$
0.0	1.00	1.00	0.00
0.1	1.22	1.22	-0.00
0.2	1.49	1.49	-0.00
0.3	1.82	1.83	-0.00
0.4	2.23	2.23	-0.01
0.5	2.72	2.73	-0.01
0.6	3.32	3.33	-0.01
0.7	4.06	4.07	-0.02
0.8	4.95	4.98	-0.03
0.9	6.05	6.09	-0.04
1.0	7.39	7.44	-0.05
$\ u_{ex} - u_{num}\ _2 = 0.0721$			

Tabla 3.10: Errores obtenidos con el método de Euler hacia atrás, para el problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, usando $N = 11$ nodos.

se presentan las soluciones de este ejemplo: la solución exacta dada por (3.36), y las soluciones numéricas obtenidas usando los métodos FE y BE.

Ejemplo: Ecuación del calor en 2D, usando GFDM y BE.

Recordando, la ecuación del calor está dada por la ecuación (3.37), donde al discretizar la parte espacial usando GFDM, se obtiene el problema de valor inicial dado por (3.38)

$$\frac{dU}{dt} = D_2U + F, \quad \text{con } U(t_0) = U_0. \quad (3.42)$$

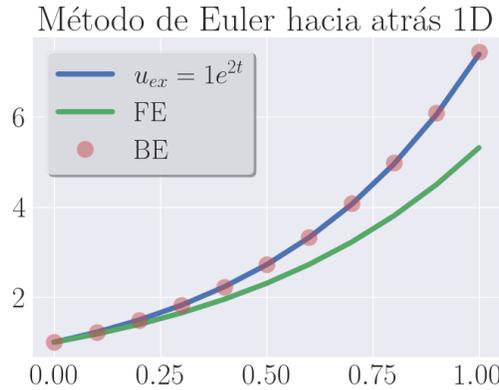


Figura 3.23: Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$, usando los métodos FE y BE con $N = 11$ nodos.

Para este ejemplo se resolverá en el dominio descrito por el rectángulo $\Omega = [0, 3] \times [0, 1]$, en el intervalo de tiempo $t = [0, 1.6]$. Se utilizaron las siguientes condiciones de frontera

$$\begin{aligned} u|_l &= u(x = 0, y, t) = 1, \\ u|_r &= u(x = 3, y, t) = 0, \\ u_n|_b &= u_n(x, y = 0, t) = 0, \\ u_n|_t &= u_n(x, y = 1, t) = 0, \end{aligned}$$

y la condición inicial, para los nodos interiores y fronteras de Neumann, dada por

$$u(x, y, t = 0) = 0.$$

Por otro lado, la condición inicial para los nodos de frontera de Dirichlet está dada por

$$\begin{aligned} u(x = 0, y, t = 0) &= 1, \\ u(x = 3, y, t = 0) &= 0. \end{aligned}$$

Para este ejemplo se empleó la fuente

$$f(x, y, t) = 0.$$

Al utilizar el método BE para resolver el problema de valor inicial (3.38), se obtiene la ecuación

$$\begin{aligned} U_l - \Delta t(D_2 U_l + F_l) &= U_{l-1}, \\ (I - \Delta t D_2) U_l &= U_{l-1} + \Delta t F_l, \\ U_l &= (I - \Delta t D_2) \setminus (U_{l-1} + \Delta t F_l), \\ U_l &= A \setminus B, \end{aligned} \tag{3.43}$$

donde I es una matriz identidad del mismo tamaño que D_2 , y el símbolo \setminus representa la solución del sistema $AU = B$, donde la matriz A y el vector B están definidos como

$$A = I - \Delta t D_2, \quad B = U_{l-1} + \Delta t F_l.$$

Es posible obtener la solución de la iteración U_l , utilizando la librería `numpy` de la forma

```

1 import numpy as np
2
3 U1 = np.linalg.solve(A,B)

```

Para este ejemplo se utilizó un tiempo total de $t_{\text{Tot}} = 1.6$, con un paso de tiempo $\Delta t = 0.1$, necesitando un total de 16 iteraciones para completar la solución en el intervalo $t = [0, 1.6]$. En la Figura 3.24 se muestra la solución U en diferentes tiempos t_l .

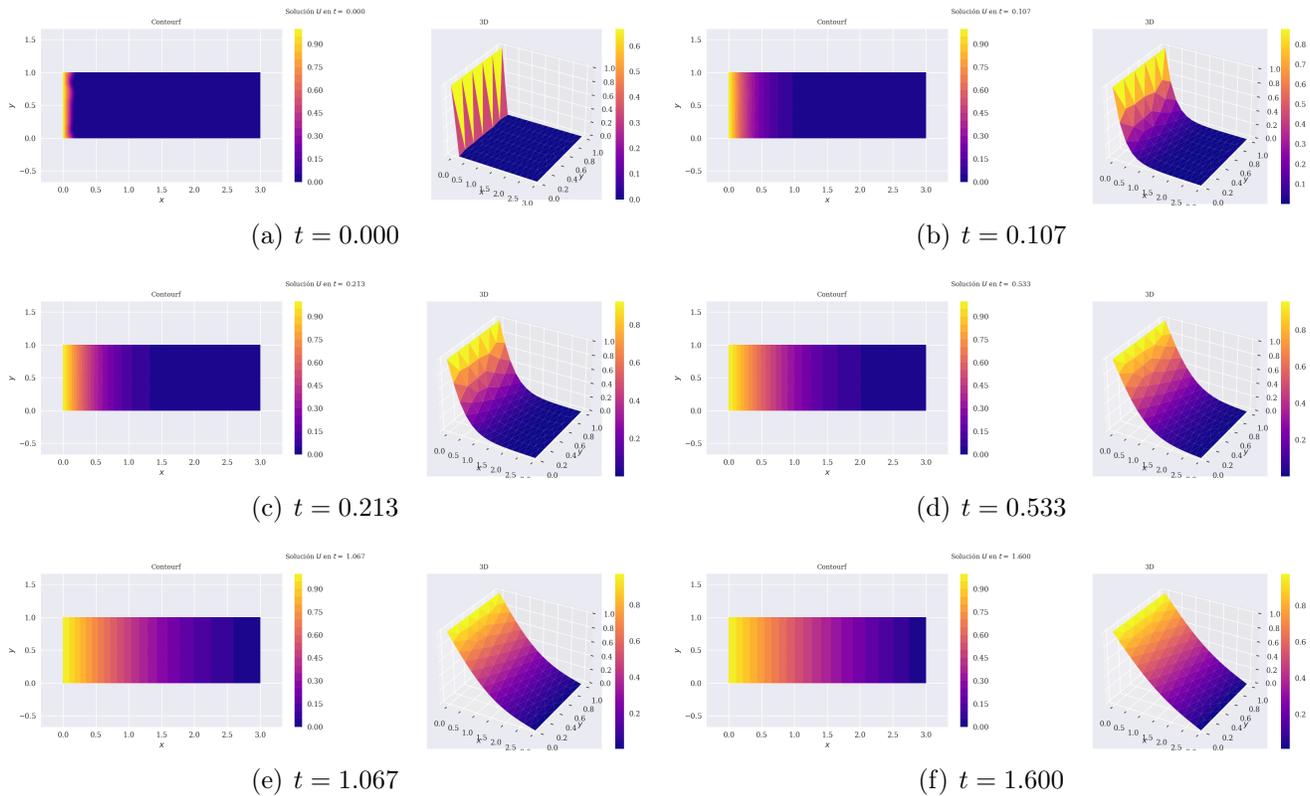


Figura 3.24: Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método de Euler hacia atrás para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 16 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$.

Método de Crank-Nicolson

Otra forma de aproximar la derivada temporal sería utilizar un promedio de las dos aproximaciones anteriores, ubicándose a mitad de camino entre un paso de tiempo y el otro ($t_{l+\frac{1}{2}}$), donde ahora el paso de tiempo se ha dividido a la mitad ($\Delta t/2$). Entonces usando ambas aproximaciones

(atrás y adelante) en el problema de valor inicial (3.33), ubicando las ecuaciones en $t_{l+\frac{1}{2}}$ se obtiene

$$\begin{aligned}\frac{u_{l+1} - u_{l+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} &= f(u_{l+1}, t_{l+1}), \\ \frac{u_{l+\frac{1}{2}} - u_l}{\Delta t/2} &= f(u_l, t_l).\end{aligned}$$

Usando el promedio de las dos ecuaciones y despejando se obtiene el método de **Crank-Nicolson** (CN).

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} \left(\frac{u_{l+1} - u_{l+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} + \frac{u_{l+\frac{1}{2}} - u_l}{\Delta t/2} \right) &= \frac{1}{2} (f_{l+1} + f_l), \\ \frac{u_{l+1} - u_{l+\frac{1}{2}} + u_{l+\frac{1}{2}} - u_l}{\Delta t} &= \frac{1}{2} (f_{l+1} + f_l), \\ \frac{u_{l+1} - u_l}{\Delta t} &= \frac{1}{2} (f_{l+1} + f_l),\end{aligned}\tag{3.44}$$

donde $f(u_{l+1}, t_{l+1})$ y $f(u_l, t_l)$ se han escrito de forma compacta como f_{l+1} y f_l respectivamente. La principal ventaja de este método es que es un método incondicionalmente estable [LeVeque, 2007].

Ejemplo: CN en 1D para resolver $\dot{u} = \alpha u$, con $u(0) = 1$ y $\alpha = 2$.

Ya se ha visto que la solución al problema

$$\dot{u} = \alpha u, \quad \text{con} \quad u(0) = 1,$$

está dada por

$$u = e^{\alpha t}.$$

Para utilizar el método CN en el problema de valor inicial se sustituye \dot{u} por el lado izquierdo de (3.44), y se usa el lado derecho $f = 2u$, de tal forma que se obtiene

$$\frac{u_{l+1} - u_l}{\Delta t} = \frac{1}{2} (2u_{l+1} + 2u_l).$$

Despejando

$$\begin{aligned}u_{l+1} - \frac{\Delta t}{2} 2u_{l+1} &= u_l + \frac{\Delta t}{2} 2u_l, \\ (1 - \Delta t)u_{l+1} &= (1 + \Delta t)u_l, \\ u_{l+1} &= \frac{1 + \Delta t}{1 - \Delta t} u_l.\end{aligned}$$

Para comparar se muestran a continuación las ecuaciones obtenidas con los método FE, BE, y CN para este ejemplo.

$$\begin{aligned}\text{FE} \quad u_{l+1} &= (1 + 2\Delta t)u_l, \\ \text{BE} \quad u_{l+1} &= \frac{1}{1 - 2\Delta t} u_l, \\ \text{CN} \quad u_{l+1} &= \frac{1 + \Delta t}{1 - \Delta t} u_l.\end{aligned}$$

Para este ejemplo se utilizaron un total de $N = 11$ nodos, con lo que el paso de tiempo queda

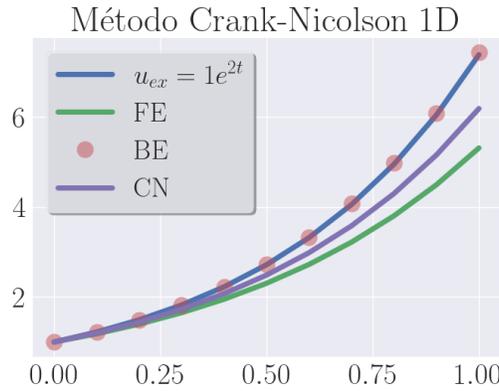


Figura 3.25: Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$, usando los métodos FE, BE, y CN con $N = 11$ nodos.

de $\Delta t = 0.1$. Con esto se obtienen los errores mostrados en la Tabla 3.11. En la Figura 3.25 se

t	u_{ex}	u_{num}	$u_{ex} - u_{num}$
0.0	1.00	1.00	0.000
0.1	1.22	1.20	0.021
0.2	1.49	1.44	0.052
0.3	1.82	1.73	0.094
0.4	2.23	2.07	0.152
0.5	2.72	2.49	0.230
0.6	3.32	2.99	0.334
0.7	4.06	3.58	0.472
0.8	4.95	4.30	0.653
0.9	6.05	5.16	0.890
1.0	7.39	6.19	1.197
$\ u_{ex} - u_{num}\ _2 = 1.7534$			

Tabla 3.11: Errores obtenidos con el método de Crank-Nicolson, para el problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, usando $N = 11$ nodos.

muestran las diferentes soluciones obtenidas con los métodos FE, BE, y CN, así también como la solución exacta.

Ejemplo: Ecuación del calor en 2D, usando GFDM y CN.

En la ecuación del calor (3.37) se ha discretizado la parte espacial utilizando GFDM, con lo cual se obtiene el problema de valor inicial (3.38) dado por

$$\frac{dU}{dt} = D_2 U + F, \quad \text{con} \quad U(t_0) = U_0.$$

Al aplicar el método CN (3.44) para discretizar la derivada temporal de este problema se obtiene

$$\frac{U_{l+1} - U_l}{\Delta t} = \frac{1}{2} (D_2 U_{l+1} + F_{l+1} + D_2 U_l + F_l).$$

Despejando

$$\begin{aligned}
U_{l+1} - U_l &= \frac{\Delta t}{2} (D_2 U_{l+1} + F_{l+1} + D_2 U_l + F_l) , \\
U_{l+1} - \frac{\Delta t}{2} D_2 U_{l+1} &= U_l + \frac{\Delta t}{2} D_2 U_l + \frac{\Delta t}{2} (F_{l+1} + F_l) , \\
\left(I - \frac{\Delta t}{2} D_2 \right) U_{l+1} &= \left(I + \frac{\Delta t}{2} D_2 \right) U_l + \frac{\Delta t}{2} (F_{l+1} + F_l) , \\
U_{l+1} &= \left(I - \frac{\Delta t}{2} D_2 \right) \setminus \left(\left(I + \frac{\Delta t}{2} D_2 \right) U_l + \frac{\Delta t}{2} (F_{l+1} + F_l) \right) , \\
U_{l+1} &= A \setminus \left(B U_l + \frac{\Delta t}{2} (F_{l+1} + F_l) \right) , \tag{3.45}
\end{aligned}$$

donde I es una matriz identidad del mismo tamaño que D_2 , el simbolo \setminus representa resolver el sistema de ecuaciones algebraicas, y las matrices A y B están definidas como

$$\begin{aligned}
A &= I - \frac{\Delta t}{2} D_2 , \\
B &= I + \frac{\Delta t}{2} D_2 .
\end{aligned}$$

Con la ecuación (3.45) se itera para obtener la solución U para los pasos de tiempo necesarios. Para este ejemplo se utilizaron las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}
u|_l &= u(x = 0, y, t) = 1 , \\
u|_r &= u(x = 3, y, t) = 0 , \\
u_n|_b &= u_n(x, y = 0, t) = 0 , \\
u_n|_t &= u_n(x, y = 1, t) = 0 ,
\end{aligned}$$

y las condición inicial

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

excepto en los nodos con condiciones de frontera de Dirichlet, en los cuales la condición inicial está dada por

$$\begin{aligned}
u(x = 0, y, t = 0) &= 1 , \\
u(x = 3, y, t = 0) &= 0 .
\end{aligned}$$

Se utilizó la fuente

$$f(x, y, t) = 0 .$$

La solución obtenida en diferentes tiempos t_l se muestra en la Figura 3.26.

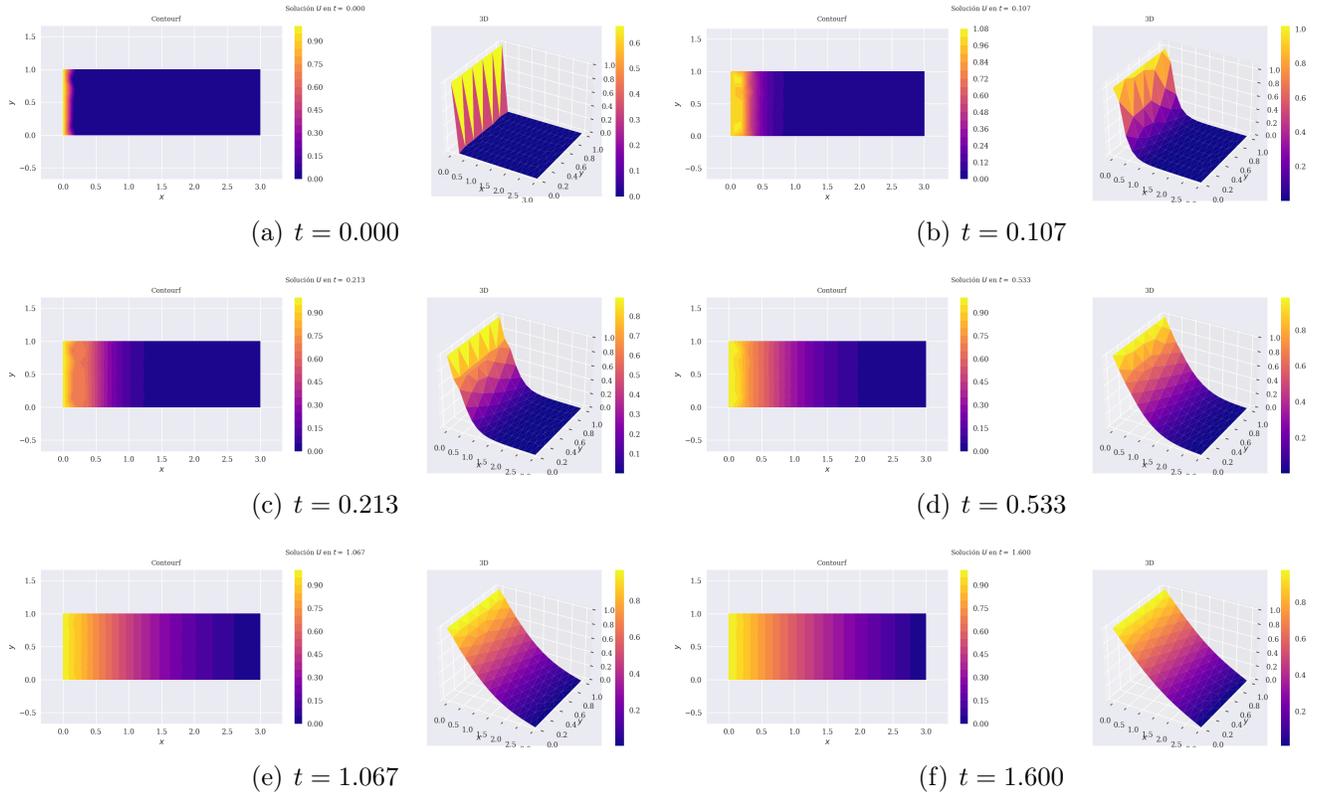


Figura 3.26: Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método de Crank-Nicolson para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 16 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$.

Métodos Runge-Kutta

Muchas veces para aproximar derivadas de orden superior, y evitar calcularlas, lo que se hace es diseñar aproximaciones en diferencias finitas para que aproximen estas derivadas; esto lo logran apoyándose en varios pasos de tiempo t_l , es por esto que se les suele llamar *multipaso*. Para lograr aproximar estas derivadas en un solo paso, lo que se suele hacer es usar un método *multietapa*, en el que se calculan valores intermedios de la solución y con ellos las derivadas que se usarán en este único paso.

Un método Runge-Kutta de dos etapas está dado por

$$u_* = u_l + \frac{1}{2} \Delta t f(u_l), \quad (3.46)$$

$$u_{l+1} = u_l + \Delta t f(u_*). \quad (3.47)$$

Con la ecuación (3.46) se calcula una primera aproximación u_* a la mitad del paso de tiempo $t_{l+\frac{1}{2}} = t_l + \frac{\Delta t}{2}$ usando el método de Euler, en ese punto se utiliza la ecuación (3.47), la cual calcula la dirección $f(u_*)$ y se utiliza para actualizar u_l un paso completo Δt y así obtener u_{l+1} . Este método se puede extender para resolver problemas de valor inicial $\dot{u} = f(t, u)$ (3.33), quedando de

la forma

$$u_* = u_l + \frac{\Delta t}{2} f(t_l, u_l), \quad (3.48)$$

$$u_{l+1} = u_l + \Delta t f(t_{l+\frac{1}{2}}, u_*), \quad (3.49)$$

y en ocasiones también escrito como

$$k_1 = u_l, \quad (3.50)$$

$$k_2 = u_l + \frac{\Delta t}{2} f(t_l, k_1), \quad (3.51)$$

$$u_{l+1} = u_l + \Delta t f(t_{l+\frac{1}{2}}, k_2) \quad (3.52)$$

Este método es de orden dos, en otras palabras, el error es de orden $O(\Delta t^2)$, es por esto que se suele abreviar como **RK2**.

Un método Runge-Kutta de orden superior muy utilizado es el método de orden cuatro, el cual es un método de cuatro etapas por lo que se abrevia **RK4** y está dado por

$$k_1 = u_l, \quad (3.53)$$

$$k_2 = u_l + \frac{\Delta t}{2} f(t_l, k_1), \quad (3.54)$$

$$k_3 = u_l + \frac{\Delta t}{2} f(t_{l+\frac{1}{2}}, k_2), \quad (3.55)$$

$$k_4 = u_l + \Delta t f(t_{l+\frac{1}{2}}, k_3), \quad (3.56)$$

$$u_{l+1} = u_l + \frac{\Delta t}{6} (f(t_l, k_1) + 2f(t_{l+\frac{1}{2}}, k_2) + 2f(t_{l+\frac{1}{2}}, k_3) + f(t_{l+1}, k_4)). \quad (3.57)$$

Un método Runge-Kutta general de **orden n** , se puede expresar de la forma

$$k_1 = u_l + \Delta t \sum_{j=1}^n a_{1j} f(t_l + c_j \Delta t, k_j), \quad (3.58)$$

$$k_2 = u_l + \Delta t \sum_{j=1}^n a_{2j} f(t_l + c_j \Delta t, k_j), \quad (3.59)$$

⋮

$$k_n = u_l + \Delta t \sum_{j=1}^n a_{nj} f(t_l + c_j \Delta t, k_j), \quad (3.60)$$

$$u_{l+1} = u_l + \Delta t \sum_{j=1}^n b_j f(t_l + c_j \Delta t, k_j). \quad (3.61)$$

Para que haya consistencia en el método se requiere

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} = c_i, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.62)$$

$$\sum_{j=1}^n b_j = 1, \quad (3.63)$$

que cuando se satisfacen, garantizan que el método sea al menos de primer orden en precisión.

Los coeficientes de estos métodos se muestran frecuentemente en el llamado *tableau de Butcher*:

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_n & a_{n1} & \cdots & a_{nn} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_n \end{array}. \quad (3.64)$$

Por ejemplo para el método RK2 dado por las ecuaciones (3.50)-(3.52) se tiene el tableau siguiente:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\ \hline & 0 & 1 \end{array},$$

y para el método RK4 expresado en las ecuaciones (3.53)-(3.57) se tiene el tableau

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array},$$

donde las entradas que no se muestran son ceros.

Una clase importante de estos métodos consiste en los métodos explícitos, los cuales se obtienen cuando $a_{i,j} = 0$ para $j \geq i$. Esto hace que el tableau de Butcher sea cero en todos los elementos que estén en y arriba de la diagonal principal. En estos casos cada k_i es calculada solamente con valores k_i ya calculados en pasos anteriores [LeVeque, 2007, Kreyszig, 2009].

Ejemplo: RK2 en 1D para resolver $\dot{u} = \alpha u$, con $u(0) = 1$ y $\alpha = 2$.

Ahora usaremos RK2 para resolver el problema de valor inicial

$$\dot{u} = \alpha u, \quad \text{con } u(0) = u_0,$$

cuya solución exacta es

$$u = u_0 e^{\alpha t}.$$

Aplicando las ecuaciones que describen el método RK2 (3.48)-(3.49) al problema de valor inicial se obtiene

$$\begin{aligned} u_* &= u_l + \frac{\Delta t}{2}(\alpha u_l), \\ u_{l+1} &= u_l + \Delta t(\alpha u_*). \end{aligned}$$

Sustituyendo u_* y factorizando, se obtiene la ecuación iterativa para resolver este ejemplo, la cual es un método Runge-Kutta de orden 2.

$$\begin{aligned} u_{l+1} &= u_l + \Delta t \alpha \left(u_l + \alpha \frac{\Delta t}{2} u_l \right), \\ &= u_l + \alpha \Delta t u_l + \frac{\alpha^2 \Delta t^2}{2} u_l, \\ &= \left(1 + \alpha \Delta t + \frac{\alpha^2 \Delta t^2}{2} \right) u_l. \end{aligned}$$

Sustituyendo el valor de $\alpha = 2$ se tiene

$$u_{l+1} = (1 + 2\Delta t + 2\Delta t^2)u_l.$$

Para comparar se muestran a continuación las ecuaciones obtenidas con los métodos FE, BE, CN y RK2.

$$\begin{aligned} \text{FE} \quad u_{l+1} &= (1 + 2\Delta t)u_l \quad , \\ \text{BE} \quad u_{l+1} &= \frac{1}{1 - 2\Delta t}u_l \quad , \\ \text{CN} \quad u_{l+1} &= \frac{1 + \Delta t}{1 - \Delta t}u_l \quad , \\ \text{RK2} \quad u_{l+1} &= (1 + 2\Delta t + 2\Delta t^2)u_l \quad . \end{aligned}$$

La solución de este ejemplo, usando los diferentes métodos, se muestra en la Figura 3.27, donde se emplean $N = 11$ nodos, en el dominio $t = [0, 1]$, con lo que el paso de tiempo resulta $\Delta t = 0.1$. Se utiliza para este ejemplo la condición inicial $u_0 = 1$. Los errores obtenidos usando RK2 para este ejemplo se pueden observar en la Tabla 3.12.

Ejemplo: Ecuación del calor en 2D, usando GFDM y RK2.

Anteriormente se ha discretizado la parte espacial de la ecuación del calor usando GFDM, lo que resulta en la ecuación del calor discretizada (3.38)

$$\frac{dU}{dt} = D_2U + F, \quad \text{con} \quad U(t_0) = U_0.$$

Esta ecuación es un problema de valor inicial, el cual en este caso se resolverá utilizando el método RK2. Aplicando RK2 descrito por las ecuaciones (3.48)-(3.49)

$$\begin{aligned} u_* &= u_l + \frac{\Delta t}{2}(\alpha u_l), \\ u_{l+1} &= u_l + \Delta t(\alpha u_*), \end{aligned}$$

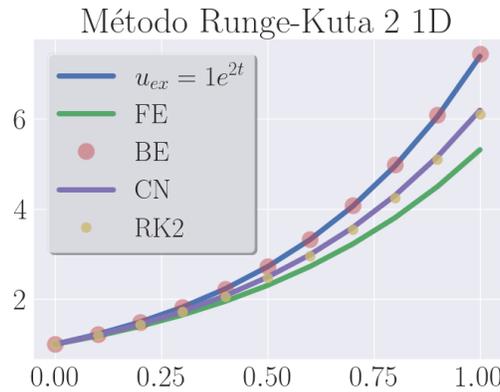


Figura 3.27: Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$, usando los métodos FE, BE, CN, y RK2 con $N = 11$ nodos.

t	u_{ex}	u_{num}	$u_{ex} - u_{num}$
0.0	1.00	1.00	0.000
0.1	1.22	1.20	0.021
0.2	1.49	1.44	0.052
0.3	1.82	1.73	0.094
0.4	2.23	2.07	0.152
0.5	2.72	2.49	0.230
0.6	3.32	2.99	0.334
0.7	4.06	3.58	0.472
0.8	4.95	4.30	0.653
0.9	6.05	5.16	0.890
1.0	7.39	6.19	1.197
$\ u_{ex} - u_{num}\ _2 = 1.7534$			

Tabla 3.12: Errores obtenidos con el método Runge-Kutta de orden 2, para el problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, usando $N = 11$ nodos.

a este problema de valor inicial, se obtiene

$$U_* = U_l + \frac{\Delta t}{2}(D_2 U_l + F), \quad (3.65)$$

$$U_{l+1} = U_l + \Delta t(D_2 U_* + F). \quad (3.66)$$

Con las que se puede resolver para cada paso de tiempo y así obtener la solución U . Para este ejemplo se utilizaron las condiciones de frontera dadas por

$$\begin{aligned} u|_l &= u(x = 0, y, t) = 1, \\ u|_r &= u(x = 3, y, t) = 0, \\ u_n|_b &= u_n(x, y = 0, t) = 0, \\ u_n|_t &= u_n(x, y = 1, t) = 0, \end{aligned}$$

y las condición inicial

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

excepto en los nodos con condiciones de frontera de Dirichlet, los cuales la condición inicial está dada por

$$\begin{aligned} u(x=0, y, t=0) &= 1, \\ u(x=3, y, t=0) &= 0. \end{aligned}$$

Se utilizó la fuente

$$f(x, y, t) = 0.$$

La solución obtenida en diferentes tiempos t_i se muestra en la Figura 3.28. Se utilizó un total de $N = 115$ nodos para discretizar la parte espacial, y un total de 160 iteraciones para resolver la parte temporal.

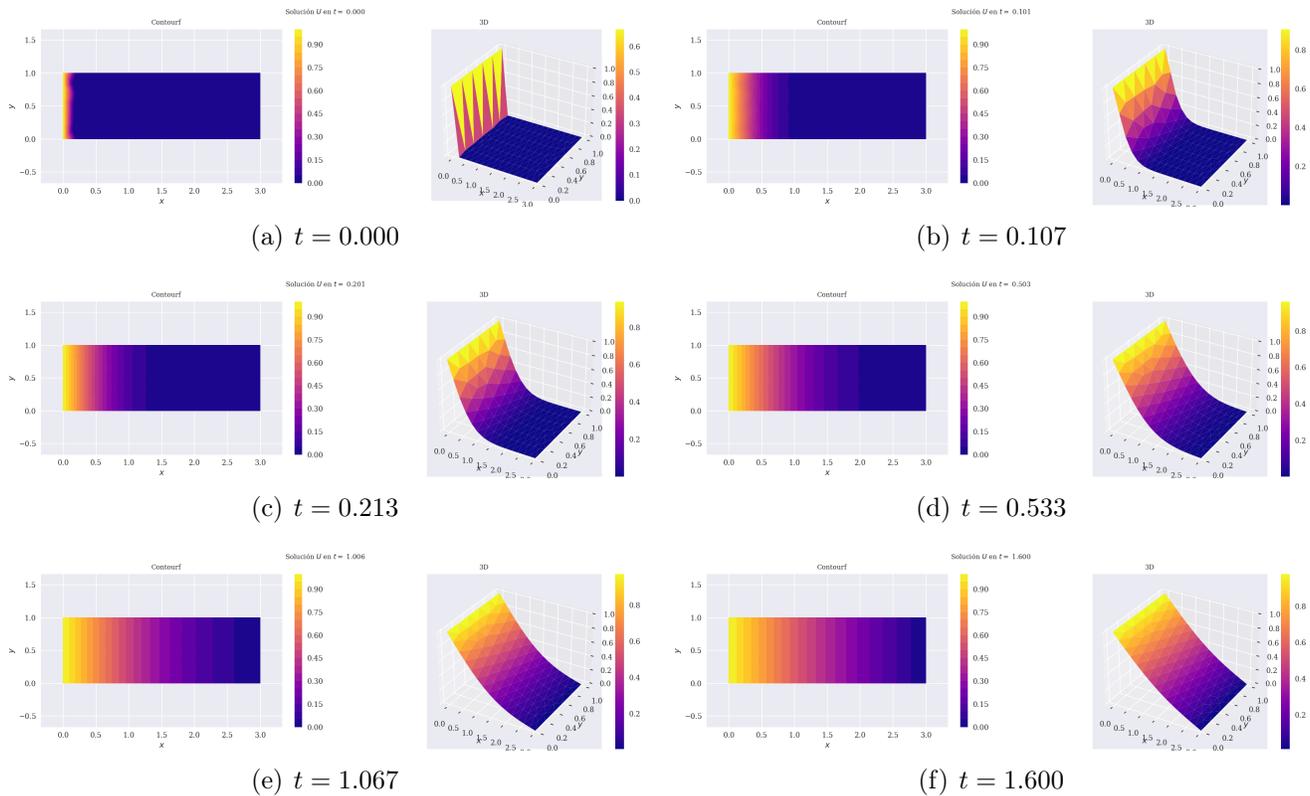


Figura 3.28: Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método RK2 para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 160 pasos de tiempo, $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$.

Método Runge-Kuta-Fehlberg (RKF45)

E. Fehlberg [Fehlberg, 1970] propuso y desarrolló un método para controlar el tamaño del paso Δt , utilizando control del error entre dos métodos RK de diferente orden. Descubrió dos métodos

de RK que juntos requerían solamente 6 evaluaciones de f en cada paso; estos son: un método de orden 5 (RK5) y un método de orden 4 (RK4), los cuales se muestran a continuación:

$$\text{RK5} \quad u_{l+1} = u_l + b_1 k_1 + \cdots + b_6 k_6, \quad (3.67)$$

donde el vector de coeficientes $b = [b_1, b_2, \dots, b_6]$ está definido por

$$b = \left[\frac{16}{135}, 0, \frac{6656}{12825}, \frac{28561}{56430}, -\frac{9}{50}, \frac{2}{55} \right], \quad (3.68)$$

$$\text{RK4} \quad u_{l+1}^* = u_l + b_1^* k_1 + \cdots + b_5^* k_5, \quad (3.69)$$

donde el vector de coeficientes b^* está definido por

$$b^* = \left[\frac{25}{216}, 0, \frac{1408}{2565}, \frac{2197}{4104}, -\frac{1}{5} \right]. \quad (3.70)$$

Para ambos métodos solo es necesario evaluar f en 6 ocasiones, las cuales están definidas por los coeficientes k_i , y vienen dados por

$$k_1 = \Delta t f(t_l, u_l), \quad (3.71)$$

$$k_2 = \Delta t f\left(t_l + \frac{1}{4}\Delta t, u_l + \frac{1}{4}k_1\right), \quad (3.72)$$

$$k_3 = \Delta t f\left(t_l + \frac{3}{8}\Delta t, u_l + \frac{3}{32}k_1 + \frac{9}{32}k_2\right), \quad (3.73)$$

$$k_4 = \Delta t f\left(t_l + \frac{12}{13}\Delta t, u_l + \frac{1932}{2197}k_1 - \frac{7200}{2197}k_2 + \frac{7296}{2197}k_3\right), \quad (3.74)$$

$$k_5 = \Delta t f\left(t_l + \Delta t, u_l + \frac{439}{216}k_1 - 8k_2 + \frac{3680}{513}k_3 - \frac{845}{4104}k_4\right), \quad (3.75)$$

$$k_6 = \Delta t f\left(t_l + \frac{1}{2}\Delta t, u_l - \frac{8}{27}k_1 + 2k_2 - \frac{3544}{2565}k_3 + \frac{1859}{4104}k_4 - \frac{11}{40}k_5\right). \quad (3.76)$$

La diferencia de ambos métodos nos da la estimación del error del método RK4

$$\epsilon_{l+1} = u_{l+1} - u_{l+1}^* = \frac{1}{360}k_1 - \frac{128}{4275}k_3 - \frac{2197}{75240}k_4 + \frac{1}{50}k_5 + \frac{2}{55}k_6 \quad (3.77)$$

Con esta estimación y una tolerancia definida, se puede decidir incrementar o disminuir el paso Δt en base a estos factores. Con esto se puede reducir el número de iteraciones necesarias para resolver un problema de valor inicial, además de que no es mucho más costoso que RK4, ya que requiere solamente 2 evaluaciones de f más que este.

El método RKF45 resulta de orden 5, en otras palabras el error de este método es de orden $O(\Delta t^5)$ [Kreyszig, 2009]. Este método es muy común por lo que ya viene implementado en mucho del software disponible. En este trabajo, el método RKF45 se estará implementando desde la librería `scipy` [Virtanen et al., 2020]. La forma de utilizar este método se muestra a continuación:

```

1 from scipy.integrate import solve_ivp
2
3 sol = solve_ivp(fun, t_span, y0, method='RK45')
```

donde:

- `fun` es una función anónima que define el lado derecho del problema de valor inicial $\dot{u} = f(t, u)$ que se quiere resolver.
- `t_span` es un intervalo $[t_0, t_f]$. El método comienza a resolver en $t = t_0$ y resuelve hasta llegar a $t = t_f$.
- `y0` es la condición inicial del problema.
- `method` es el método a utilizar. Por default usa RKF45, pero es posible utilizar otros métodos.

Ejemplo: RKF45 en 1D para resolver $\dot{u} = \alpha u$, con $u(0) = 1$ y $\alpha = 2$.

El problema de valor inicial

$$\dot{u} = \alpha u, \quad \text{con} \quad u(0) = 1 \quad \text{y} \quad \alpha = 2,$$

tiene solución exacta dada por

$$u = e^{\alpha t}.$$

La solución numérica de este problema se puede obtener utilizando el método RK45, definiendo el intervalo donde se quiere resolver $[0, 1]$, la función que representa el lado derecho del problema de valor inicial como $f(t, u) = \alpha u$, y la condición inicial $u_0 = 1$. Esto se ve en código como

```

1 import numpy as np
2 from scipy.integrate import solve_ivp
3
4 f = lambda t,u: alpha * u
5 intervalo = [0,1]
6 u0 = np.array([1])
7 sol = solve_ivp(f, intervalo, u0, method='RK45')
8
9 u = sol.y.flatten()
10 t = sol.t
```

Se obtuvo una solución donde se utilizaron solamente 3 iteraciones para resolver el problema en el intervalo especificado. Esta solución (RKF45) se puede observar en la Figura 3.29, junto con la solución de los otros métodos utilizados: FE, BE, CN, RK2. Los errores obtenidos con la solución numérica para este ejemplo se pueden observar en la Tabla 3.13.

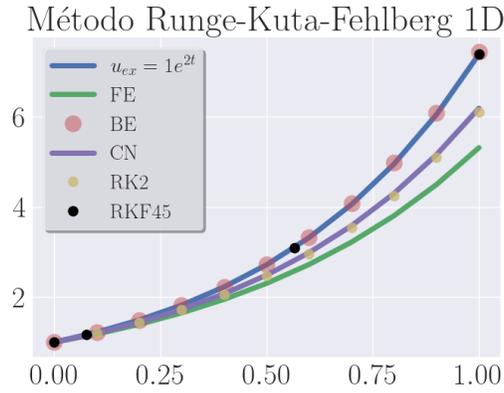


Figura 3.29: Soluciones exacta y numérica del problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, con condición inicial $u(t = 0) = 1$, usando los métodos FE, BE, CN, RK2, y RKF45. Donde las soluciones utilizan $N = 11$ nodos, excepto RKF45 que solamente utiliza $N = 4$.

t	u_{ex}	u_{num}	$u_{ex} - u_{num}$
0.000	1.0000	1.0000	0.000e + 00
0.076	1.1637	1.1637	-3.000e - 09
0.566	3.1013	3.1013	-5.842e - 05
1.000	7.3891	7.3893	-2.519e - 04
$\ u_{ex} - u_{num}\ _2 = 2.5856e - 04$			

Tabla 3.13: Errores obtenidos con el método Runge-Kutta-Fehlberg, para el problema $\dot{u} = 2u$ en 1D, usando $N = 11$ nodos.

Ejemplo: Ecuación del calor en 2D, usando GFDM y RKF45.

Recordando la ecuación del calor en 2D está definida como (3.37)

$$\nabla^2 u + f = \frac{\partial u}{\partial t}.$$

Para este ejemplo se resuelve utilizando las condiciones de frontera definidas como

$$\begin{aligned} u|_l &= u(x = 0, y, t) = 1, \\ u|_r &= u(x = 3, y, t) = 0, \\ u_n|_b &= u_n(x, y = 0, t) = 0, \\ u_n|_t &= u_n(x, y = 1, t) = 0, \end{aligned}$$

con la fuente

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

y la condición inicial

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

excepto en los nodos con condiciones de frontera de Dirichlet, en los cuales la condición inicial está dada por

$$\begin{aligned}u(x = 0, y, t = 0) &= 1, \\u(x = 3, y, t = 0) &= 0.\end{aligned}$$

Al discretizar la parte espacial de la ecuación de calor (3.37) con GFDM, queda como (3.38):

$$\frac{dU}{dt} = D_2U + F, \quad \text{con} \quad U(t_0) = U_0.$$

Para usar el método RKF45 se definen fun y t_{span} de la forma

$$\begin{aligned}fun(t, U) &= D_2U + F, \\t_{span} &= [0, 1.6].\end{aligned}$$

Resolviendo como

```
1 from scipy.integrate import solve_ivp
2
3 sol = solve_ivp(fun, tspan, U0)
4 U = sol.y
5 t = sol.t
```

se obtuvo la solución U , para una discretización espacial con $N = 115$ nodos, y con un total de 94 iteraciones para la parte temporal. La solución U en diferentes tiempos t_l puede observarse en la Figura 3.30.

Anexo B: Estabilidad de los métodos usados para la integración temporal

La estabilidad de un método numérico se refiere a la capacidad del mismo para controlar y limitar el crecimiento de errores a lo largo de las iteraciones. Esto incluye diferentes tipos de errores: debido a las condiciones iniciales, los causados por la precisión de punto flotante utilizada, y errores de truncamiento.

Existen diferentes tipos de análisis de estabilidad. En este trabajo presentaremos la A-estabilidad de los métodos empleados para resolver la integración temporal.

A-estabilidad

La A-estabilidad es también conocida como estabilidad absoluta⁵, se utiliza para conocer cuando un método tiene una amplificación o por el contrario un amortiguamiento del error conforme avanzan las iteraciones en el tiempo.

⁵En inglés “Absolute stability (A-stability)”.

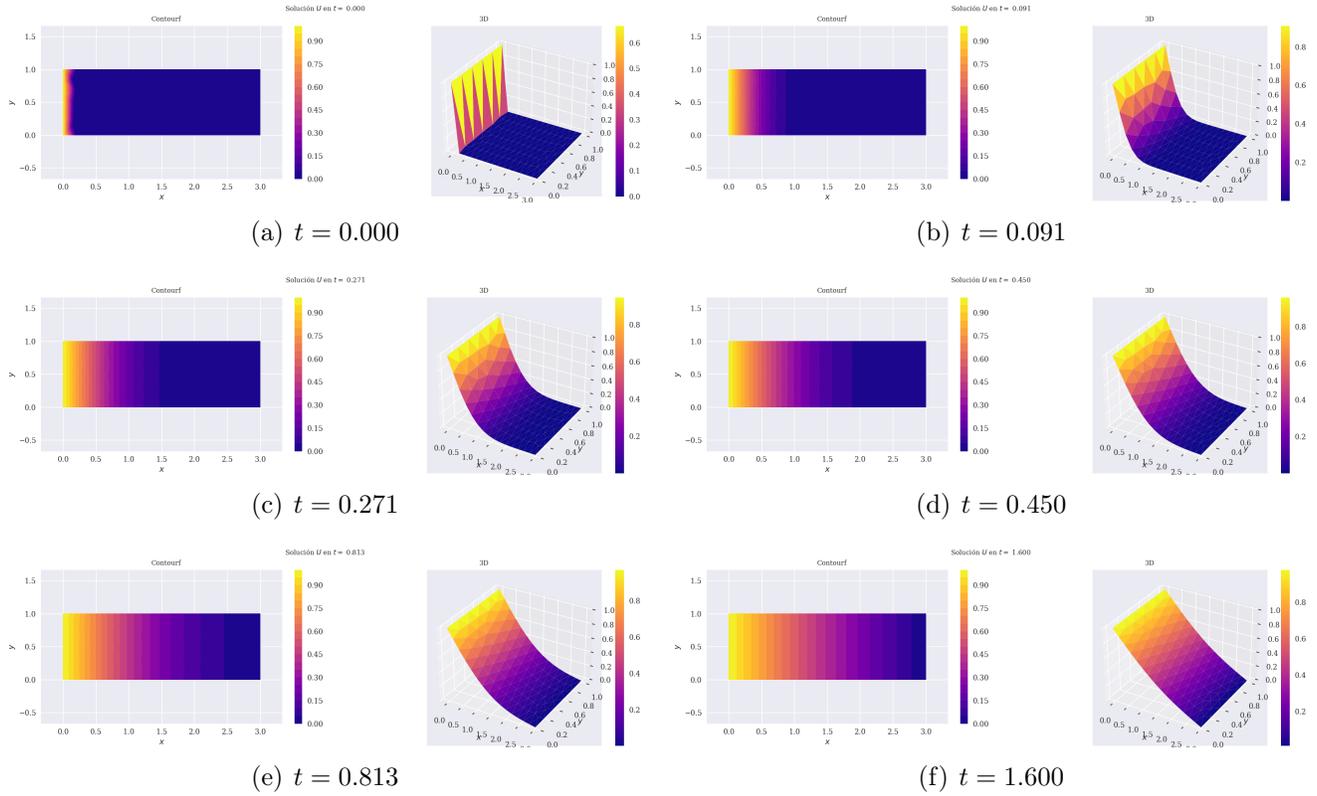


Figura 3.30: Solución de la ecuación de calor $\nabla^2 + f = \frac{\partial u}{\partial t}$, usando GFDM para discretizar la parte espacial, y el método RKF45 para discretizar la parte temporal, usando un total de $N = 115$ nodos, 95 pasos de tiempo elegidos por el método, usando la fuente $f = 0$, con condición inicial $u_0 = 0$ en el dominio excepto en las fronteras de Dirichlet, y con las condiciones de frontera: $u|_l = 1$, $u|_r = 0$, $u_n|_b = u_n|_t = 0$.

Para evaluar los métodos se suele utilizar una ecuación de prueba. En este caso usaremos la ecuación

$$\dot{u} = \alpha u, \quad (3.78)$$

para el caso donde la solución $u(t)$ solamente tiene un valor en cada paso de tiempo t_i , y α es un coeficiente que puede ser real o complejo. Se puede extender la ecuación de prueba para el caso en que la solución $U(t)$ sea un vector de dimensión N , de la forma

$$\dot{U} = AU, \quad (3.79)$$

donde A es una matriz de coeficientes, reales o complejos, de tamaño $[N \times N]$.

Método de Euler hacia adelante

Aplicando el método de Euler (3.35) a la ecuación de prueba (3.78) se tiene

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + \Delta t \alpha u_i, \\ u_{i+1} &= (1 + \Delta t \alpha) u_i. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Si consideramos el error de truncamiento de esta aproximación tenemos

$$u_{l+1} = (1 + \Delta t\alpha)u_l + \Delta t\tau. \quad (3.81)$$

El error de la primera iteración E_1 solamente dependerá del error inicial E_0 de la forma

$$E_1 = (1 + \Delta t\alpha)E_0 + \Delta t\tau. \quad (3.82)$$

Aplicando recursivamente para obtener los errores siguientes

$$\begin{aligned} E_1 &= (1 + \Delta t\alpha)E_0 + \Delta t\tau, \\ E_2 &= (1 + \Delta t\alpha)((1 + \Delta t\alpha)E_0 + \Delta t\tau) + \Delta t\tau, \\ &\vdots \\ E_{n+1} &= (1 + \Delta t\alpha)^n E_0 + \sum_{j=0}^{n-1} (1 + \Delta t\alpha)^j \Delta t\tau, \end{aligned} \quad (3.83)$$

lo cual indica que el error se hará cada vez más pequeño, siempre que se cumpla la condición

$$\|1 + \Delta t\alpha\| \leq 1. \quad (3.84)$$

Es más común hablar de la región de estabilidad absoluta (o simplemente región de estabilidad), la cual es la región en el plano complejo en donde se cumple esta condición (3.84), permitiendo que α sea un número complejo. Podemos escribir esta condición (3.84) en términos del producto $z = \Delta t\alpha$, ya que este producto es el que importa. De esta manera se puede escribir

$$\|1 + z\| \leq 1. \quad (3.85)$$

Entonces la región de estabilidad para el método de Euler es el disco de radio 1 centrado en el punto -1, como puede observarse en la Figura 3.31(a) [LeVeque, 2007].

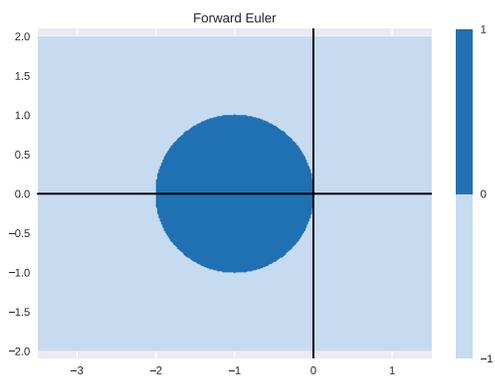
Ahora aplicando el método de Euler (3.35) a la ecuación de prueba multidimensional (3.79) se obtiene

$$\begin{aligned} U_{l+1} &= U_l + \Delta tAU_l, \\ U_{l+1} &= (I + \Delta tA)U_l, \end{aligned} \quad (3.86)$$

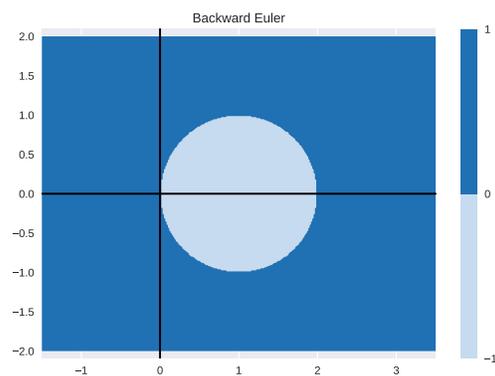
que es muy parecido al resultado obtenido para u , con lo cual de manera análoga se puede llegar a la conclusión de que el método será A-estable cuando se cumpla la condición

$$\|I + \Delta tA\| \leq 1, \quad (3.87)$$

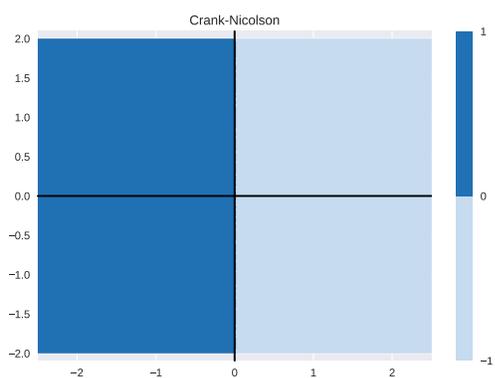
donde I es la matriz identidad de tamaño $[N \times N]$.



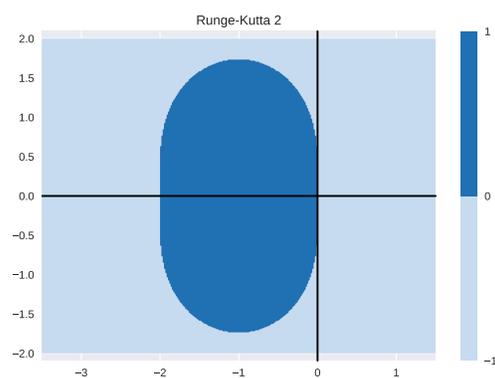
(a) Euler hacia adelante.



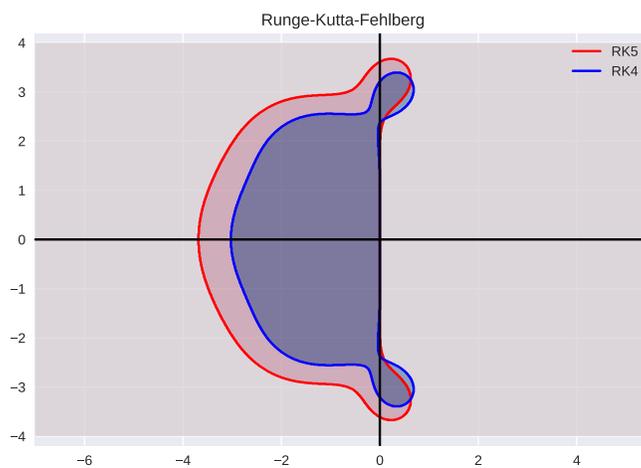
(b) Euler hacia atrás.



(c) Crank-Nicolson.



(d) Runge-Kutta de orden 2.



(e) Runge-Kutta-Fehlberg.

Figura 3.31: *Regiones de A-Estabilidad de los diferentes métodos utilizados para la integración de la parte temporal.*

Método de Euler hacia atrás

Ahora se utilizará el método de Euler hacia atrás (3.41) para discretizar a la ecuación de prueba (3.78), con lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} u_l - \Delta t \alpha u_l &= u_{l-1}, \\ (1 - \Delta t \alpha) u_l &= u_{l-1}, \\ u_l &= \frac{1}{1 - \Delta t \alpha} u_{l-1}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Se puede definir la función $R(z)$ como

$$R(z) = \frac{1}{1 - z}, \quad (3.89)$$

donde $z = \Delta t \alpha$, por lo que el método será A-estable cuando se cumpla la condición

$$\begin{aligned} \|R(z)\| &\leq 1, \\ \left\| \frac{1}{1 - z} \right\| &\leq 1. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Dejando que el coeficiente α sea complejo, la zona de estabilidad es todo el espacio, excepto el interior del disco de radio 1 centrado en 1, como puede observarse en la Figura 3.31(b) [LeVeque, 2007].

Aplicando ahora Euler hacia atrás (3.41) a la ecuación de prueba multidimensional (3.79) se obtiene

$$\begin{aligned} U_l - \Delta t A U_l &= U_{l-1}, \\ (I - \Delta t A) U_l &= U_{l-1}, \\ U_l &= (I - \Delta t A) \setminus U_{l-1}, \end{aligned} \quad (3.91)$$

donde el símbolo “ \setminus ” indica que se debe resolver el sistema. De manera análoga se obtiene que el método es A-estable cuando se cumple la condición

$$\|(I - \Delta t A) \setminus I\| \leq 1. \quad (3.92)$$

Método de Crank-Nicolson

Ahora se aplicará Crank-Nicolson (3.44) a la ecuación de prueba (3.78), con lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{u_{l+1} - u_l}{\Delta t} &= \frac{1}{2} (\alpha u_{l+1} + \alpha u_l), \\ u_{l+1} - \frac{\Delta t \alpha}{2} u_{l+1} &= u_l + \frac{\Delta t \alpha}{2} u_l, \\ \left(1 - \frac{\Delta t \alpha}{2}\right) u_{l+1} &= \left(1 + \frac{\Delta t \alpha}{2}\right) u_l, \\ u_{l+1} &= \frac{1 + \frac{\Delta t \alpha}{2}}{1 - \frac{\Delta t \alpha}{2}} u_l, \end{aligned} \quad (3.93)$$

de donde se define la función $R(z)$ como

$$R(z) = \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}}, \quad (3.94)$$

por lo que entonces el método será A-estable cuando se cumpla la condición

$$\left\| \frac{1 + \frac{z}{2}}{1 - \frac{z}{2}} \right\| \leq 1, \quad (3.95)$$

que se cumple para todo el lado izquierdo del plano complejo, como puede observarse en la figura 3.31(c) [LeVeque, 2007].

Ahora aplicando CN (3.44) a la ecuación de prueba multidimensional (3.79) se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{U_{l+1} - U_l}{\Delta t} &= \frac{1}{2}(AU_{l+1} + AU_l), \\ U_{l+1} - \frac{\Delta t}{2}AU_{l+1} &= U_l + \frac{\Delta t}{2}AU_l, \\ \left(I - \frac{\Delta t}{2}A\right)U_{l+1} &= \left(I + \frac{\Delta t}{2}A\right)U_l, \\ U_{l+1} &= \left(I - \frac{\Delta t}{2}A\right) \setminus \left(I + \frac{\Delta t}{2}A\right) U_l, \end{aligned} \quad (3.96)$$

donde I es la matriz identidad de tamaño $[N \times N]$, y el símbolo “ \setminus ” indica que se debe resolver el sistema. Por lo que entonces el método será A-estable cuando se cumpla la condición

$$\left\| \left(I - \frac{\Delta t}{2}A\right) \setminus \left(I + \frac{\Delta t}{2}A\right) \right\| \leq 1. \quad (3.97)$$

Método de Runge-Kutta de orden 2

Ahora se implementará el método de Runge-Kutta de orden 2 (3.48)-(3.49) para discretizar la ecuación de prueba (3.78), de lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} u_* &= u_l + \frac{\Delta t}{2}\alpha u_l \quad , \quad u_{l+1} = u_l + \Delta t\alpha u_*, \\ u_{l+1} &= u_l + \Delta t\alpha \left(u_l + \frac{\Delta t}{2}\alpha u_l\right), \\ u_{l+1} &= u_l + \Delta t\alpha u_l + \frac{\Delta t^2\alpha^2}{2}u_l, \\ u_{l+1} &= \left(1 + \Delta t\alpha + \frac{\Delta t^2\alpha^2}{2}\right)u_l. \end{aligned} \quad (3.98)$$

La función $R(z)$ queda definida como

$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2}, \quad (3.99)$$

donde $z = \Delta t\alpha$, y entonces el método será A-estable cuando se cumpla la condición

$$\left\| 1 + z + \frac{z^2}{2} \right\| \leq 1. \quad (3.100)$$

La región de A-estabilidad que cumple esta condición (3.100) se puede observar detalladamente en la Figura 3.31(d) [LeVeque, 2007].

Ahora aplicando Runge-Kutta de orden 2 (3.48)-(3.49) a la ecuación de prueba multidimensional (3.79) se obtiene

$$\begin{aligned} U_* &= U_l + \frac{\Delta t}{2} AU_l \quad , \quad U_{l+1} = U_l + \Delta t AU_*, \\ U_{l+1} &= U_l + \Delta t A \left(U_l + \frac{\Delta t}{2} AU_l \right), \\ U_{l+1} &= U_l + \Delta t AU_l + \frac{\Delta t^2}{2} A^2 U_l, \\ U_{l+1} &= \left(I + \Delta t A + \frac{\Delta t^2}{2} A^2 \right) U_l. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Entonces el método será A-estable cuando se cumpla la condición

$$\left\| I + \Delta t A + \frac{\Delta t^2}{2} A^2 \right\| \leq 1. \quad (3.102)$$

Método de Runge-Kutta-Fehlberg

Al combinar las ecuaciones que definen los métodos de Runge-Kutta de orden 4 y orden 5 utilizados en el método de Runge-Kutta-Fehlberg (3.67)-(3.76) para discretizar la ecuación de prueba (3.78), y realizar el álgebra correspondiente, se pueden obtener las ecuaciones explícitas de ambos métodos, las cuales resultan como

$$\text{RK5} \quad u_{l+1} = (0.000481z^6 + 0.008333z^5 + 0.041667z^4 + 0.166667z^3 + 0.5z^2 + z + 1)u_l, \quad (3.103)$$

$$\text{RK4} \quad u_{l+1} = (0.009615z^5 + 0.041667z^4 + 0.166667z^3 + 0.5z^2 + z + 1)u_l, \quad (3.104)$$

donde $z = \Delta t\alpha$. Por lo que estos métodos serán A-estables cuando se cumplan las condiciones

$$\left\| 0.000481z^6 + 0.008333z^5 + 0.041667z^4 + 0.166667z^3 + 0.5z^2 + z + 1 \right\| \leq 1, \quad (3.105)$$

$$\left\| 0.009615z^5 + 0.041667z^4 + 0.166667z^3 + 0.5z^2 + z + 1 \right\| \leq 1. \quad (3.106)$$

Las regiones de estabilidad de estos dos métodos se pueden observar en la Figura 3.31(e).

Análogamente, al aplicar el método de Runge-Kutta-Fehlberg (3.67)-(3.76) a la ecuación de prueba multidimensional (3.79), se obtienen las ecuaciones

$$\text{RK5} \quad U_{l+1} = (0.000481\Delta t^6 A^6 + 0.008333\Delta t^5 A^5 + 0.041667\Delta t^4 A^4 \quad (3.107)$$

$$+ 0.166667\Delta t^3 A^3 + 0.5\Delta t^2 A^2 + \Delta t A + 1)U_l, \quad (3.108)$$

$$\text{RK4} \quad U_{l+1} = (0.009615\Delta t^5 A^5 + 0.041667\Delta t^4 A^4 \quad (3.109)$$

$$+ 0.166667\Delta t^3 A^3 + 0.5\Delta t^2 A^2 + \Delta t A + 1)U_l, \quad (3.110)$$

por lo que las condiciones de A-estabilidad de estos dos métodos serán

$$\left\| 0.000481\Delta t^6 A^6 + 0.008333\Delta t^5 A^5 + 0.041667\Delta t^4 A^4 + 0.166667\Delta t^3 A^3 + 0.5\Delta t^2 A^2 + \Delta t A + 1 \right\| \leq 1, \quad (3.111)$$

$$\left\| 0.009615\Delta t^5 A^5 + 0.041667\Delta t^4 A^4 + 0.166667\Delta t^3 A^3 + 0.5\Delta t^2 A^2 + \Delta t A + 1 \right\| \leq 1. \quad (3.112)$$

Bibliografía

- [Anderson, 2005] Anderson, J. D. (2005). Ludwig prandtl's boundary layer. *Physics today*, 58(12):42–48.
- [Ari and Ustazhanov, 2014] Ari, N. and Ustazhanov, M. (2014). Matplotlib in python. In *2014 11th International Conference on Electronics, Computer and Computation (ICECCO)*, pages 1–6. IEEE.
- [Badon-Ghyben, 1889] Badon-Ghyben, W. (1889). Nota in verband met de voorgenomen put boring nabij amsterdam (notes on the probable results of the proposed well drilling near amsterdam). *Tijdschr. Kon. Inst. Ing.*, pages 8–22.
- [Barrett et al., 2005] Barrett, P., Hunter, J., Miller, J. T., Hsu, J.-C., and Greenfield, P. (2005). matplotlib—a portable python plotting package. In *Astronomical data analysis software and systems XIV*, volume 347, page 91.
- [Benito et al., 2001] Benito, J., Urena, F., and Gavete, L. (2001). Influence of several factors in the generalized finite difference method. *Applied Mathematical Modelling*, 25(12):1039–1053.
- [Bergman et al., 1986] Bergman, T., Incropera, F., and Viskanta, R. (1986). Correlation of mixed layer growth in a double-diffusive, salt-stratified system heated from below.
- [Bird et al., 2015] Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N., and Klingenberg, D. J. (2015). *Introductory transport phenomena*. Wiley Global Education.
- [Bourich et al., 2004] Bourich, M., Hasnaoui, M., and Amahmid, A. (2004). Double-diffusive natural convection in a porous enclosure partially heated from below and differentially salted. *International Journal of Heat and fluid flow*, 25(6):1034–1046.
- [Carlsson, 1985] Carlsson, J.-O. (1985). Processes in interfacial zones during chemical vapour deposition: aspects of kinetics, mechanisms, adhesion and substrate atom transport. *Thin solid films*, 130(3-4):261–282.
- [Chávez et al., 2021] Chávez, C., Mota, F. J. D., Lucas-Martinez, S., Tinoco-Ruiz, J. G., and Quinteros, D. S. (2021). Generalized finite difference solution for the motz problem. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 37(1).
- [Chávez-Negrete et al., 2018] Chávez-Negrete, C., Domínguez-Mota, F., and Santana-Quinteros, D. (2018). Numerical solution of richard's equation of water flow by generalized finite differences. *Computers and Geotechnics*, 101:168–175.
- [CNEOS, 2022] CNEOS (2022, acceso: 18-agosto-2022). Neo basics. <https://cneos.jpl.nasa.gov/about/basics.html>.

- [Cooper Jr. et al.,] Cooper Jr., H. H., Kohout, F. A., and Henry, H. R. Sea water in coastal aquifers. pages 35–82.
- [Costa, 2004] Costa, V. (2004). Double-diffusive natural convection in parallelogrammic enclosures filled with fluid-saturated porous media. *International journal of heat and mass transfer*, 47(12-13):2699–2714.
- [Coulter and Güçeri, 1987] Coulter, J. and Güçeri, S. (1987). Laminar and turbulent natural convection in solar energy applications. In *Solar Energy Utilization*, pages 303–333. Springer.
- [Cushman-Roisin and Beckers, 2011] Cushman-Roisin, B. and Beckers, J.-M. (2011). *Introduction to geophysical fluid dynamics: physical and numerical aspects*. Academic press.
- [Edholm, 2013] Edholm, A. (2013). Meshing and visualisation routines in the python version of caldem. *TVSM*.
- [Elder, 1967] Elder, J. (1967). Transient convection in a porous medium. *Journal of Fluid Mechanics*, 27(3):609–623.
- [Elder et al., 2017] Elder, J. W., Simmons, C. T., Diersch, H.-J., Frolkovič, P., Holzbecher, E., and Johannsen, K. (2017). The elder problem. *Fluids*, 2(1):11.
- [Fan et al., 2013] Fan, C.-M., Chien, C.-S., Chan, H.-F., and Chiu, C.-L. (2013). The local rbf collocation method for solving the double-diffusive natural convection in fluid-saturated porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 57(2):500–503.
- [Fehlberg, 1970] Fehlberg, E. (1970). Classical fourth-and lower order runge-kutta formulas with stepsize control and their application to heat transfer problems. *Computing*, 6:61–71.
- [Forsman, 2017] Forsman, K. (2017). Viscon-visualisering av tvådimensionell konsolidering i undervisningssammanhang. *TVSM-5000*.
- [Fox et al., 1995] Fox, R. W., McDonald, A. T., Cázares, G. N., and Callejas, R. L. (1995). *Introducción a la Mecánica de Fluidos*. McGraw-Hill.
- [Gockenbach, 2006] Gockenbach, M. S. (2006). *Understanding and implementing the finite element method*, volume 97. Siam.
- [Godunov and Bohachevsky, 1959] Godunov, S. K. and Bohachevsky, I. (1959). Finite difference method for numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Matematičeskij sbornik*, 47(3):271–306.
- [Gotovac et al., 2003] Gotovac, H., Andricevic, R., Gotovac, B., Kozulic, V., and Vranjes, M. (2003). An improved collocation method for solving the henry problem. *Journal of contaminant hydrology*, 64(1-2):129–149.
- [Harris et al., 2020] Harris, C. R., Millman, K. J., Van Der Walt, S. J., Gommers, R., Virtanen, P., Cournapeau, D., Wieser, E., Taylor, J., Berg, S., Smith, N. J., et al. (2020). Array programming with numpy. *Nature*, 585(7825):357–362.
- [Henry, 1960] Henry, H. (1960). Saltwater intrusion in coastal aquifers. *Int. Assoc. Sci. Hydrol. Publ*, 52:478–487.
- [Henry, 1964a] Henry, H. R. (1964a). Effects of dispersion on salt encroachment in coastal aquifers, in "seawater in coastal aquifers". *US Geological Survey, Water Supply Paper*, 1613:C70–C80.

-
- [Henry, 1964b] Henry, H. R. (1964b). Interfaces between salt water and fresh water in coastal aquifers. *US Geological Survey Water-Supply Paper*, pages C35–70.
- [Herzberg, 1901] Herzberg, A. (1901). Die wasserversorgung einiger nord see bader (water supply to some north sea resorts). *Jour. Gasbeleuchtung and Wasserversorgung*, 44:842–844.
- [Hubbert, 1940] Hubbert, M. K. (1940). The theory of ground-water motion. *The Journal of Geology*, 48(8, Part 1):785–944.
- [Hunter, 2007] Hunter, J. D. (2007). Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing in science & engineering*, 9(03):90–95.
- [Hutter, 2004] Hutter, K. (2004). *Klaus Jöhnk Continuum Methods of physical Modeling*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- [Iserles, 2009] Iserles, A. (2009). *A first course in the numerical analysis of differential equations*. Number 44. Cambridge university press.
- [Khanafer and Vafai, 2002] Khanafer, K. and Vafai, K. (2002). Double-diffusive mixed convection in a lid-driven enclosure filled with a fluid-saturated porous medium. *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, 42(5):465–486.
- [Kreyszig, 2009] Kreyszig, E. (2009). *Advanced engineering mathematics*, 10th eddition edn.
- [Landau and Lifshitz, 2013] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (2013). *Fluid Mechanics: Landau and Lifshitz: Course of Theoretical Physics, Volume 6*, volume 6. Elsevier.
- [Langevin and Guo, 1999] Langevin, C. and Guo, W. (1999). Improvements to seawat, a variable-density modeling code [abs.]. *Eos Trans*, 80(46):F–373.
- [LeVeque, 2007] LeVeque, R. J. (2007). *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. SIAM.
- [Li et al., 2018] Li, P.-W., Chen, W., Fu, Z.-J., and Fan, C.-M. (2018). Generalized finite difference method for solving the double-diffusive natural convection in fluid-saturated porous media. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 95:175–186.
- [Li et al., 2014] Li, P.-W., Fan, C.-M., Chen, C.-Y., and Ku, C.-Y. (2014). Generalized finite difference method for numerical solutions of density-driven groundwater flows. *CMES: Comput Model Eng Sci*, 101(5):319–50.
- [Markham and Rosenberger, 1984] Markham, B. and Rosenberger, F. (1984). Diffusive-convective vapor transport across horizontal and inclined rectangular enclosures. *Journal of crystal growth*, 67(2):241–254.
- [Massey and Ward-Smith, 1998] Massey, B. S. and Ward-Smith, J. (1998). *Mechanics of fluids*, volume 1. Crc Press.
- [MathWorld, 2022] MathWorld, W. (2022, acceso: 14-septiembre-2022). Differential equation. <https://mathworld.wolfram.com/classroom/DifferentialEquation.html>.
- [Meca et al., 2007] Meca, A. S., Alhama, F., and Fernandez, C. G. (2007). An efficient model for solving density driven groundwater flow problems based on the network simulation method. *Journal of Hydrology*, 339(1-2):39–53.
- [Na, 1980] Na, T. Y. (1980). *Computational methods in engineering boundary value problems*. Academic press.

- [Nishimura et al., 1994] Nishimura, T., Imoto, T., and Miyashita, H. (1994). Occurrence and development of double-diffusive convection during solidification of a binary system. *International journal of heat and mass transfer*, 37(10):1455–1464.
- [Pinder and Cooper Jr, 1970] Pinder, G. F. and Cooper Jr, H. H. (1970). A numerical technique for calculating the transient position of the saltwater front. *Water Resources Research*, 6(3):875–882.
- [Prandtl, 1923] Prandtl, L. (1923). Applications of modern hydrodynamics to aeronautics. Technical report.
- [Rapp, 2022] Rapp, B. E. (2022). *Microfluidics: modeling, mechanics and mathematics*. Elsevier.
- [Román-Gutiérrez et al., 2022] Román-Gutiérrez, R., Chávez-Negrete, C., Domínguez-Mota, F., Guzmán-Torres, J. A., and Tinoco-Guerrero, G. (2022). Numerical solution of density-driven groundwater flows using a generalized finite difference method defined by an unweighted least-squares problem. *Frontiers in Applied Mathematics and Statistics*, 8.
- [Segol et al., 1975] Segol, G., Pinder, G. F., and Gray, W. G. (1975). A galerkin-finite element technique for calculating the transient position of the saltwater front. *Water Resources Research*, 11(2):343–347.
- [Simpson and Clement, 2004] Simpson, M. J. and Clement, T. P. (2004). Improving the worthiness of the henry problem as a benchmark for density-dependent groundwater flow models. *Water Resources Research*, 40(1).
- [Smith et al., 2013] Smith, R., Inomata, H., and Peters, C. (2013). *Introduction to supercritical fluids: a spreadsheet-based approach*. Newnes.
- [Strang, 2007] Strang, G. (2007). *Computational science and engineering*, volume 791. Wellesley-Cambridge Press Wellesley.
- [Strutt et al., 2005] Strutt, J. W. et al. (2005). Lord rayleigh. In *IEEE Ultrasonics Symposium, 2005.*, volume 1, pages 261–264. IEEE.
- [Sánchez San Román, 2023] Sánchez San Román, F. J. (2008 acceso: 30-mayo-2023). Flujo en medios porosos: Ley de darcy. <http://agronomia.criba.edu.ar/carreras/ia/archivos/Materias/579/archivos/aguassubterraneeas/DARCY.pdf>.
- [Tinoco-Guerrero et al., 2023] Tinoco-Guerrero, G., Arias-Rojas, H., Guzmán-Torres, J. A., Román-Gutiérrez, R., and Tinoco-Ruiz, J. G. (2023). A meshless finite difference scheme applied to the numerical solution of wave equation in highly irregular space regions. *Computers & Mathematics with Applications*, 136:25–33.
- [Tinoco-Guerrero et al., 2018] Tinoco-Guerrero, G., Mota, F. J. D., Lucas-Martínez, J. S., and Tinoco-Ruiz, J. G. (2018). Approximation to advection equation in plane irregular regions using a method of lines and generalized finite differences. *Revista Mexicana de Métodos Numéricos*, 2.
- [Tinoco-Guerrero et al., 2022] Tinoco-Guerrero, G., Mota, F. J. D., Torres, J. A. G., and Tinoco-Ruiz, J. G. (2022). Numerical solution of diffusion equation using a method of lines and generalized finite differences. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 38(2).

-
- [Trevisan and Bejan, 1985] Trevisan, O. V. and Bejan, A. (1985). Natural convection with combined heat and mass transfer buoyancy effects in a porous medium. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 28(8):1597–1611.
- [UNAM, 2023] UNAM (2014, acceso: 06-junio-2023). Flujo poencial. <https://www.cie.unam.mx/~jhg/LAB.%20MEC.%20FLUIDOS%202014/PRACTICAS%204-6/TEORIA/Flujo%20Potencial.pdf>.
- [Van Rossum et al., 2007] Van Rossum, G. et al. (2007). Python programming language. In *USE-NIX annual technical conference*, volume 41, pages 1–36. Santa Clara, CA.
- [Virtanen et al., 2020] Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., et al. (2020). Scipy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in python. *Nature methods*, 17(3):261–272.
- [Weisstein, 2023a] Weisstein, E. W. (2023, acceso: 09-marzo-2023a). "maclaurin series." from mathworld—a wolfram web resource. <https://mathworld.wolfram.com/MaclaurinSeries.html>.
- [Weisstein, 2023b] Weisstein, E. W. (2023, acceso: 09-marzo-2023b). "taylor series." from mathworld—a wolfram web resource. <https://mathworld.wolfram.com/TaylorSeries.html>.
- [Wong et al., 2021] Wong, M., Tso, C., Ho, T., and Lee, H. (2021). A review of state of the art thermal diodes and their potential applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 164:120607.
- [Xie, 2023] Xie, C. (2010, acceso: 25-mayo-2023). The prandtl number: Conductive vs. convective heat transfer. <https://energy.concord.org/energy2d/prandtl.html>.

NOMBRE DEL TRABAJO

Modelado de problemas de convección natural difusiva doble usando diferencias finitas generalizadas

AUTOR

Ricardo Román Gutiérrez

RECUENTO DE PALABRAS

41788 Words

RECUENTO DE CARACTERES

191181 Characters

RECUENTO DE PÁGINAS

145 Pages

TAMAÑO DEL ARCHIVO

10.2MB

FECHA DE ENTREGA

Oct 3, 2024 8:53 AM CST

FECHA DEL INFORME

Oct 3, 2024 8:55 AM CST

● **17% de similitud general**

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para cada base de datos.

- 16% Base de datos de Internet
- Base de datos de Crossref
- 0% Base de datos de trabajos entregados
- 9% Base de datos de publicaciones
- Base de datos de contenido publicado de Crossref

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



A quien corresponda,

Por este medio, quien abajo firma, bajo protesta de decir verdad, declara lo siguiente:

- Que presenta para revisión de originalidad el manuscrito cuyos detalles se especifican abajo.
- Que todas las fuentes consultadas para la elaboración del manuscrito están debidamente identificadas dentro del cuerpo del texto, e incluidas en la lista de referencias.
- Que, en caso de haber usado un sistema de inteligencia artificial, en cualquier etapa del desarrollo de su trabajo, lo ha especificado en la tabla que se encuentra en este documento.
- Que conoce la normativa de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en particular los Incisos IX y XII del artículo 85, y los artículos 88 y 101 del Estatuto Universitario de la UMSNH, además del transitorio tercero del Reglamento General para los Estudios de Posgrado de la UMSNH.

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Doctorado en Ciencias en Ingeniería Física.	
Título del trabajo	Modelado de problemas de convección natural difusiva doble no lineal usando diferencias finitas generalizadas.	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Ricardo Román-Gutiérrez	ricardo.roman@umich.mx
Director	Francisco Javier Domínguez Mota.	dmota@umich.mx
Codirector		
Coordinador del programa	Gonzalo Viramontes Gamboa.	gvgamboa@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	No	

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Traducción al español	No	
Traducción a otra lengua	No	
Revisión y corrección de estilo	Si	En partes puntuales para mejorar la claridad y fluidez de la escritura.
Análisis de datos	No	
Búsqueda y organización de información	No	
Formateo de las referencias bibliográficas	No	
Generación de contenido multimedia	No	
Otro	No	

Datos del solicitante	
Nombre y firma	Ricardo Román Gutiérrez. 
Lugar y fecha	Morelia, Michoacán, a 26 de septiembre de 2024.