

MÉTODOS ESPECTRALES Y MÉTODO DE AUTOVALORES APROPIADOS PARA LA SOLUCIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES LINEALES SIN ITERACIÓN TEMPORAL

SPECTRAL AND PROPER EIGENVALUE METHODS FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF LINEAR PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS WITHOUT TIME ITERATION

Roberto C. Callarotti*

RESUMEN

En el presente trabajo probamos la aplicabilidad del método de autovalores apropiados - desarrollado previamente por este autor - junto al uso de métodos espectrales para la solución de ecuaciones diferenciales parciales lineales. Consideramos una ecuación de difusión con recombinación y obtenemos su solución mediante tres métodos: a) solución analítica, b) solución mediante el método de autovalores apropiados y diferencias finitas, y c) método de autovalores apropiados y métodos espectrales. El análisis de los errores encontrados en las soluciones numéricas b) y c), nos permite concluir que el método de autovalores es aplicable junto a soluciones con métodos espectrales con una reducción de órdenes de magnitud en el tiempo de cálculo requerido. Indicamos que la misma conclusión se obtiene para el caso de una ecuación de ondas.

ABSTRACT

In this paper we prove the possibility of using the proper eigenvalue method - previously developed by this author - together with a spectral method approach for the solution of linear partial differential equations. We consider a one dimensional diffusion with recombination equation and obtain its solution by three methods: a) analytical, b) proper eigenvalue solution and finite differences, and c) proper eigenvalue solution and spectral methods. The analysis of the errors obtained using the numerical solutions b) and c) leads us to the conclusion that the use of the proper eigenvalue method together with spectral methods yields a reduction of orders of magnitude in the computing time required. We indicate that the same conclusion can be obtained in the case of a wave equation.

Palabras Clave: Cálculo numérico, métodos espectrales, ecuaciones diferenciales parciales

Keywords: Numerical methods, spectral methods, partial differential equations

INTRODUCCIÓN

Anteriormente (Callarotti, 1994, 1995, 1996, 1997; Callarotti y Di Lorenzo, 1992), hemos desarrollado una nueva técnica para determinar la respuesta transitoria de diferentes sistemas caracterizados por ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (lineales o linealizables) tales como transferencia de calor (con o sin convección forzada), flujo de fluidos en medios porosos, conducción eléctrica, electroquímica, electromagnetismo, difusión, reacciones químicas, etc. Mediante el

uso de esta técnica que hemos llamado método de autovalores apropiados (PEM en inglés - *Proper eigenvalue method*), hemos podido evitar el proceso de iteración numérica en el tiempo, proceso normalmente requerido en diferentes esquemas de cálculo numérico (diferencias finitas, elementos finitos y métodos espectrales). La aplicación de la nueva técnica implica ahorros importantes en los tiempos de cálculo (órdenes de magnitud) y evita las dificultades que pueden surgir en la estabilidad de los algoritmos usados en esquemas iterados en espacio y tiempo.

La esencia del método de autovalores apropiados (MAA) se ilustra en la Figura 1, donde se compara con otros métodos de solución.

* Miembro Correspondiente Nacional. Academia de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales.

En el presente trabajo aplicamos el MAA para resolver la ecuación de difusión con recombinación indicada abajo (Ecuación 1):

$$a \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - b C(x,t) = \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} \quad \text{E1}$$

Presentaremos los resultados analíticos vs. Los resultados de MAA aplicado a un esquema de métodos espectrales, y los resultados de MAA con un esquema de diferencias finitas.

También hemos resuelto la ecuación 2 (una ecuación de ondas) aplicando MAA con métodos espectrales y a un esquema de diferencias finitas en espacio iterando luego en el tiempo:

$$a^2 \frac{\partial^2 V(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 V(x,t)}{\partial t^2} \quad \text{E2}$$

Debido a restricciones de espacio reportaremos este caso de ondas en otro trabajo.

Antes de empezar es conveniente indicar la importancia de los métodos espectrales en el cálculo numérico de ecuaciones. Para ello nos referimos a la Figura 2, donde se grafican los errores encontrados mediante el uso de diferentes métodos, en cada nodo espacial donde queremos encontrar las soluciones de diferentes ecuaciones diferenciales. Los métodos espectrales se han venido desarrollando desde 1970 (Canuto *et al*, 1988), y ofrecen ventajas muy substanciales en la reducción de la red necesaria para la solución de un problema dado. Para el caso de una dimensión, en sistemas independientes del tiempo, el

error debido a la discretización espacial en N elementos para el caso de diferencias finitas (de espaciamento uniforme entre nodos) decrece con el inverso de N, mientras que el mismo error decrece exponencialmente con N en el caso de métodos espectrales (Fornberg, 1996).

Difusión con recombinación (1 dimensión espacial y tiempo)

Describiremos la solución analítica, la solución con métodos espectrales y MAA, y la solución con diferencias finitas y MAA.

a) Solucion analítica

Para un sistema de longitud 2 (-1 < x < +1) usamos las siguientes condiciones de borde:

$$\begin{aligned} [C(x,t)]_{x=+1} &= 0 \\ \left[-a \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right]_{x=-1} &= I_0 u_{-1}(t) \end{aligned} \quad \text{E3}$$

Donde usamos la notación de Guillemín (1963) para una función escalón de tamaño I_0 . La constante a constante $a > 0$ representa la constante de difusión y la constante $b > 0$ representa un proceso de recombinación para cada valor de x. El sistema de coordenadas en x, extendiéndose de -1 a +1, es el sistema normalmente usado en un enfoque de métodos espectrales. Con esto no se pierde generalidad tal como lo demuestra una sencilla transformación de coordenadas.

La solución analítica es:

$$\begin{aligned} C(x,t) &= \frac{I_0 \operatorname{senh}\left(\sqrt{\frac{b}{a}} [1-x]\right)}{a \sqrt{\frac{b}{a}} \operatorname{cosh}\left(2\sqrt{\frac{b}{a}}\right)} \\ &- I_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \operatorname{sen}\left\{(1-x) \frac{(2n+1)\pi}{4}\right\}}{b + a \left\{\frac{(2n+1)\pi}{4}\right\}^2} \exp\left(-\left\{b + a \left\{\frac{(2n+1)\pi}{4}\right\}^2\right\} t\right) \end{aligned} \quad \text{E4}$$

b) Solución por métodos espectrales y MAA

De acuerdo a Fornberg (1996), expresamos la concentración $C_{ps}(x,t)$ como la suma de polinomios de Chebyshev $T_n(x)$ con coeficientes dependientes del tiempo $a_n(t)$:

$$C_{ps}(x,t) \equiv \sum_{n=0}^N a_n(t) T_n(x) \tag{E 5}$$

y tomando transformada de Laplace en el tiempo:

$$C_{ps}^L(x,s) \equiv \sum_{n=0}^N a_n(s) T_n(x) \tag{E 6}$$

y para una expansión equivalente para la segunda derivada espacial:

$$\frac{d^2 C_{ps}^L(x,s)}{dx^2} \equiv \sum_{n=0}^N A_n(s) T_n(x) \tag{E 7}$$

Los coeficientes A se relacionan con las a de acuerdo con las leyes de recursión de los polinomios de Chebyshev (ver Fornberg, 1996):

$$[A_i] = [M_{ij}^{sd}] [a_j] \tag{E 8}$$

donde:

$$[M_{ij}^{sd}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 4 & 0 & 32 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 24 & 0 & 120 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 48 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 80 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \tag{E 9}$$

luego el residual $R^L(x)$ correspondiente a la Ecuación 1 será:

$$R^L(x) \equiv a \frac{d^2 C^L}{dx^2} - (b+s) C^L \equiv \sum_{n=0}^N R_n^L T_n(x) \tag{E 10}$$

donde los coeficientes R_n^L están relacionados a los coeficientes $a_n(s)$ de la expansión de $C^L(x)$ por la siguiente relación matricial:

$$[R_i^L] = \{a[M_{ij}^{sd}] - (b+s)[I_{ij}]\}[a_j] \quad \text{E 11}$$

Donde $[I_{ij}]$ es la matriz unitaria. De acuerdo al método de colocación requerimos que el residual sea nulo en N-1 puntos que coincidan con los ceros de los polinomios de Chebyshev:

$$R_i^L(x_i) = 0 \quad \text{en} \quad x_i = -\cos(i\frac{\pi}{N}) \quad i=1,2,\dots,N-1 \quad \text{E 12}$$

y de acuerdo a las ecuaciones 10 y 12, tenemos:

$$\begin{bmatrix} T_0(x_1) & T_1(x_1) & T_2(x_1) & \dots & T_N(x_1) \\ T_0(x_2) & T_1(x_2) & T_2(x_2) & \dots & T_N(x_2) \\ T_0(x_3) & T_1(x_3) & T_2(x_3) & \dots & T_N(x_3) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ T_0(x_{N-1}) & T_1(x_{N-1}) & T_2(x_{N-1}) & \dots & T_N(x_{N-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_0^L \\ R_1^L \\ R_2^L \\ \dots \\ R_N^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{E 13}$$

y como: $T_k[\cos(i\frac{\pi}{N})] = \cos(ki\frac{\pi}{N})$, la expresión anterior se convierte en:

$$\begin{bmatrix} 1 & \cos(\frac{\pi}{N}) & \cos(\frac{2\pi}{N}) & \dots & -1 \\ 1 & \cos(\frac{2\pi}{N}) & \cos(\frac{4\pi}{N}) & \dots & +1 \\ 1 & \cos(\frac{3\pi}{N}) & \cos(\frac{6\pi}{N}) & \dots & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \cos(\frac{(N-1)\pi}{N}) & \cos(\frac{(N-1)2\pi}{N}) & \dots & \cos((N-1)\pi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_0^L \\ R_1^L \\ R_2^L \\ \dots \\ R_N^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{E 14}$$

combinando la expresión anterior con la Ecuación 11 nos permite escribir las siguientes N-1 ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} 1 & \cos(\frac{\pi}{N}) & \cos(\frac{2\pi}{N}) & \dots & -1 \\ 1 & \cos(\frac{2\pi}{N}) & \cos(\frac{4\pi}{N}) & \dots & +1 \\ 1 & \cos(\frac{3\pi}{N}) & \cos(\frac{6\pi}{N}) & \dots & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \cos(\frac{(N-1)\pi}{N}) & \cos(\frac{(N-1)2\pi}{N}) & \dots & \cos((N-1)\pi) \end{bmatrix} \{a [M^{sd}] - (b+s)[I]\} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{E 15}$$

Introduciendo una matriz [P] de (N-1)(N+1), podemos escribir la ecuación anterior como: $[P_{ij}][a_j] = [0]$, donde i corre de 1 a N-1 y j de 0 a N. Los elementos de P son:

$$P_{ij} = \sum_{k=0}^N \cos(\frac{ik\pi}{N}) \{a [M_{kj}^{sd}] - (b+s)[\delta_{kj}]\} \quad \text{E 16}$$

donde hemos usado la delta de Kroneker δ_{kj} . La aplicación de la condición de borde en $x=1$, nos permite escribir:

$$\begin{aligned} a_0 T_0(1) + a_1 T_1(1) + a_2 T_2(1) + \dots + a_N T_N(1) &= 0 \\ a_0 + a_1 + a_2 + \dots + a_N &= 0 \end{aligned} \quad \text{E 17}$$

Aplicando la condición de borde en $x=-1$ para la primera derivada:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & \dots \\ 0 & 0 & 4 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 6 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{bmatrix} = -\frac{I_0}{s a} \quad \text{E 18}$$

De manera equivalente:

$$(-1)^1 (1)^2 a_1 + (-1)^2 (2)^2 a_2 + (-1)^3 (3)^2 a_3 + \dots + (-1)^N (N)^2 a_N = +\frac{I_0}{s a} \quad \text{E 19}$$

Las N-1 ecuaciones contenidas en la Ecuación 15 más las ecuaciones 17 y 19, nos dan un sistema de N+1 ecuaciones que pueden ser resueltas para encontrar los N+1 coeficientes $a_n(s)$. El sistema se representa simbólicamente vía una matriz $Q_{ij}(s)$ y un vector de excitación $E_i(s)$: $[Q_{ij}(s)][a_j(s)] = [E_j(s)]$. Esto se puede reescribir como:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & & 1 & 1 \\ P_{10} & P_{11} & & P_{1(N-1)} & P_{1N} \\ & & & & \\ P_{(N-1)0} & P_{(N-1)1} & & P_{(N-1)(N-1)} & P_{(N-1)N} \\ 0 & -1 & & (-1)^{N-1}(N-1)^2 & (-1)^N(N)^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \\ a_{N-1} \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \\ 0 \\ \frac{I_0}{sa} \end{bmatrix} \quad \text{E 20}$$

En términos de la regla de Cramer, la constante $a_2(s)$ – por ejemplo – se calcularía como:

$$a_2(s) = \frac{\det \begin{bmatrix} Q_{00} & Q_{01} & E_0 & \dots & Q_{0N} \\ Q_{10} & Q_{11} & E_1 & \dots & Q_{1N} \\ Q_{20} & Q_{21} & E_2 & \dots & Q_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ Q_{N0} & Q_{N1} & E_N & \dots & Q_{NN} \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} Q_{00} & Q_{01} & Q_{02} & \dots & Q_{0N} \\ Q_{10} & Q_{11} & Q_{12} & \dots & Q_{1N} \\ Q_{20} & Q_{21} & Q_{22} & \dots & Q_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ Q_{N0} & Q_{N1} & Q_{N2} & \dots & Q_{NN} \end{bmatrix}} = \frac{\det [Q_{num,2}]}{\det [Q]} \quad \text{E 21}$$

De acuerdo a esta nomenclatura la transformada de Laplace de la concentración en x será:

$$C^L(x) = \frac{\sum_{n=0}^N T_n(x) \det [Q_{num,n}]}{\det [Q]} \quad \text{E 22}$$

Esta expresión implica calcular N determinantes en el numerador. Esto se puede simplificar examinando una matriz N_{NUM} definida como:

$$[N_{\text{NUM}}] \equiv \begin{bmatrix} -T_0(x) & -T_1(x) & -T_2(x) & \cdot & -T_N(x) & 0 \\ Q_{00} & Q_{01} & Q_{02} & \cdot & Q_{0N} & E_0 \\ Q_{10} & Q_{11} & Q_{12} & \cdot & Q_{1N} & E_1 \\ Q_{20} & Q_{21} & Q_{22} & \cdot & Q_{2N} & E_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ Q_{N0} & Q_{N1} & Q_{N2} & \cdot & Q_{NN} & E_N \end{bmatrix} \quad \text{E 23}$$

De manera que la transformada de Laplace en x simplemente se obtiene de:

$$C^L(x) = \frac{\det[N_{\text{num}}]}{\det[Q]} \quad \text{E 24}$$

De los resultados anteriores podemos escribir:

$$C^L(x) = \frac{I_0}{s a} \frac{\det \begin{bmatrix} -T_0(x) & -T_1(x) & -T_2(x) & \cdot & -T_{N-1}(x) & -T_N(x) \\ 1 & 1 & 1 & \cdot & 1 & 1 \\ P_{10} & P_{11} & P_{12} & \cdot & P_{1(N-1)} & P_{1N} \\ P_{20} & P_{21} & P_{22} & \cdot & P_{2(N-1)} & P_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ P_{(N-1)0} & P_{(N-1)1} & P_{(N-1)2} & \cdot & P_{(N-1)(N-1)} & P_{(N-1)N} \end{bmatrix}}{\det[Q]} \quad \text{E 25}$$

Para aplicar el método de autovalores apropiados separamos la matriz P (ver Ecuación 16), en su parte independiente de s (P_0) y la parte dependiente de s ($-s PS$):

$$P_{0_{ij}} \equiv \sum_{k=0}^N \cos\left(\frac{ik\pi}{N}\right) \left\{ a [M_{kj}^{sd}] - b [\delta_{kj}] \right\} \quad \text{E 26}$$

y

$$-s PS_{ij} \equiv \sum_{k=0}^N \cos\left(\frac{ik\pi}{N}\right) \left\{ -(s) [\delta_{kj}] \right\} = -s \cos\left(\frac{ij\pi}{N}\right) \quad \text{E 27}$$

Luego podemos expresar la concentración en x , como:

$$C^L(x) \equiv \frac{I_0 \det[[b_n] - s[c_n]]}{s a \det[[b_d] - s[c_d]]}$$

E 28

donde las diferentes matrices definidas arriba son:

$$b_d \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdot & 1 & 1 \\ P0_{10} & P0_{11} & P0_{12} & \cdot & P0_{1(N-1)} & P0_{1N} \\ P0_{20} & P0_{21} & P0_{22} & \cdot & P0_{2(N-1)} & P0_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ P0_{(N-1)0} & P0_{(N-1)1} & P0_{(N-1)2} & \cdot & P0_{(N-1)(N-1)} & P0_{(N-1)N} \\ 1 & -1 & (-1)^2 4 & \cdot & (-1)^{N-1} (N-1)^2 & (-1)^N N^2 \end{bmatrix}$$

E 29

y la parte relacionada a s en el denominador es:

$$c_d \equiv \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 \\ PS_{10} & PS_{11} & PS_{12} & \cdot & PS_{1(N-1)} & PS_{1N} \\ PS_{20} & PS_{21} & PS_{22} & \cdot & PS_{2(N-1)} & PS_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ PS_{(N-1)0} & PS_{(N-1)1} & PS_{(N-1)2} & \cdot & PS_{(N-1)(N-1)} & PS_{(N-1)N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

E 30

Las correspondientes matrices para el numerador son:

$$b_n = \begin{bmatrix} -T_0(x) & -T_1(x) & -T_2(x) & \cdot & -T_{N-1}(x) & -T_N(x) \\ 1 & 1 & 1 & \cdot & 1 & 1 \\ P0_{10} & P0_{11} & P0_{12} & \cdot & P0_{1(N-1)} & P0_{1N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ P0_{(N-2)0} & P0_{(N-2)1} & P0_{(N-2)2} & \cdot & P0_{(N-2)(N-1)} & P0_{(N-2)N} \\ P0_{(N-1)0} & P0_{(N-1)1} & P0_{(N-1)2} & \cdot & P0_{(N-1)(N-1)} & P0_{(N-1)N} \end{bmatrix}$$

E 31

y para la matriz relacionada con s en el numerador:

$$c_n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 \\ PO_{10} & PO_{11} & PO_{12} & \cdot & PO_{1(N-1)} & PO_{1N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ PO_{(N-2)0} & PO_{(N-2)1} & PO_{(N-2)2} & \cdot & PO_{(N-2)(N-1)} & PO_{(N-2)N} \\ PO_{(N-1)0} & PO_{(N-1)1} & PO_{(N-1)2} & \cdot & PO_{(N-1)(N-1)} & PO_{(N-1)N} \end{bmatrix} \quad \text{E 32}$$

La esencia del método de autovalores apropiados MAA, consiste en la interpretación de los determinantes de la ecuación E28, en función de los λ autovalores asociados:

$$\det[[b_n] - s[c_n]] \equiv \det[[b_n] - \lambda[c_n]] \equiv K_n \prod_{i=1}^N (\lambda - \lambda_i) \quad \text{E 33}$$

donde $\lambda = s$, K_n es un prefactor a ser evaluado luego junto a su equivalente K_d para el denominador (Apéndice A), y los diferentes autovalores λ son las N soluciones de la ecuación siguiente:

$$\det[[b_n] - \lambda[c_n]] = 0 \quad \text{E 34}$$

De acuerdo al MAA la solución del problema generalizado de autovalores (Moler y Steward, 1973; Kaufman, 1975) nos permite escribir la solución en función de los $N-1$ ceros del sistema (c_i) y de los N polos del sistema (p_j):

$$C_{MAA}^L(x) \equiv K \frac{I_0}{a} \frac{\prod_{i=1}^{N-1} (s - c_i)}{s \prod_{j=1}^N (s - p_j)} \quad \text{E 35}$$

donde el número de ceros ($N-1$) viene dado por la estructura de las matrices consideradas y corroborado tanto numéricamente (ver resultados) y por el teorema de valor inicial.

Una vez que los polos y ceros son conocidos (se determinan numéricamente con programas disponibles), la inversión de Laplace es trivial:

$$C_{MAA}(x) = \sum_{j=0}^N R_j \exp(p_j t) \quad \text{E 36}$$

en función de los residuos R evaluados para los polos $s=0$ (debido a la excitación) y los N polos debidos al sistema):

$$R_k \equiv \left\{ K \frac{I_0}{a} \frac{(s-p_k) \prod_{i=1}^{N-1} (s-c_i)}{s \prod_{j=1}^N (s-p_j)} \right\}_{s=p_k} \quad \text{E 37}$$

Luego el método de autovalores apropiados descrito arriba, permite realizar un proceso "trivial" en la inversión de Laplace, evitando la necesidad de iterar en el tiempo.

c) Solución por diferencias finitas y MAA.

Expresamos la transformada de Laplace de la ecuación 1 en un esquema centrado de diferencias finitas de segundo orden (considerando N+1 nodos para coincidir con la solución previa con métodos espectrales):

$$a \frac{C_{i+1}^L - 2C_i^L + C_{i-1}^L}{(\Delta x)^2} - (b+s) C_i^L = 0 \quad 0 \leq i \leq (N-1) \quad \text{E 38}$$

las correspondientes expresiones para las condiciones de borde serán:

$$\begin{aligned} [C^L(x)]_{x=N+1} &= 0 & \Rightarrow C_N &= 0 \\ \left[-a \frac{dC^L(x)}{dx} \right]_{x=-1} &= \frac{I_0}{s} & \Rightarrow -a \frac{C_0^L - C_{-1}^L}{\Delta x} &= \frac{I_0}{s} \end{aligned} \quad \text{E 39}$$

luego tendremos N ecuaciones para las N concentraciones en los nodos del i=0 al nodo i=(N-1):

$$\begin{aligned} \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} + b + s \right] C_0^L - \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \right] C_{+1}^L &= \frac{I_0}{s(\Delta x)} & ; i=0 \\ - \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \right] C_{i-1}^L + \left[\frac{2a}{(\Delta x)^2} + b + s \right] C_i^L - \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \right] C_{i+1}^L &= 0 & ; 1 \leq i \leq (N-2) \\ - \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \right] C_{N-2}^L + \left[\frac{2a}{(\Delta x)^2} + b + s \right] C_{N-1}^L &= 0 & ; i=(N-1) \end{aligned} \quad \text{E 40}$$

en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} A_{11} + s & A_{12} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_{12} & A_{22} + s & A_{12} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_{12} & A_{22} + s & A_{12} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & A_{12} & A_{22} + s & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} + s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_0^L \\ C_0^L \\ C_0^L \\ C_0^L \\ \dots \\ C_0^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left(\frac{I_0}{s \Delta x} \right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{E 41}$$

donde:

$$A_{11} = \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} + b \right] \quad ; \quad A_{22} = a_{NN} = \left[\frac{2a}{(\Delta x)^2} + b \right] \quad ; \quad A_{12} = - \left[\frac{a}{(\Delta x)^2} \right] \quad \text{E 42}$$

Ahora ilustramos la aplicación del MAA para el cálculo de C_0^L :

$$C_0^L = \frac{I_0}{s(\Delta x)} \det \begin{bmatrix} 1 & A_{12} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_{22} + s & A_{12} & \dots & 0 \\ 0 & A_{12} & A_{22} + s & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} + s \end{bmatrix}$$

$$\det \begin{bmatrix} A_{11} + s & A_{12} & 0 & \dots & 0 \\ A_{12} & A_{22} + s & A_{12} & \dots & 0 \\ 0 & A_{12} & A_{22} + s & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} + s \end{bmatrix} \quad \text{E 43}$$

lo que se puede simplificar a:

$$C_0^L = \frac{I_0}{s(\Delta x)} \det \begin{bmatrix} A_{22} + s & A_{12} & \dots & 0 \\ A_{12} & A_{22} + s & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} + s \end{bmatrix} \det \begin{bmatrix} A_{11} + s & A_{12} & 0 & \dots & 0 \\ A_{12} & A_{22} + s & A_{12} & \dots & 0 \\ 0 & A_{12} & A_{22} + s & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} + s \end{bmatrix} \equiv \frac{I_0}{s(\Delta x)} \frac{\det[A_n - \lambda I_n]}{\det[A_d - \lambda I_d]} \quad \text{E 44}$$

donde hemos definido nuevas matrices y $s = -\lambda$ para indicar la misma forma del problema para aplicar el MAA. Las nuevas matrices son:

$$A_n = \begin{bmatrix} A_{22} & A_{12} & \cdot & 0 \\ A_{12} & A_{22} & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} \end{bmatrix}$$

E 45

y para el denominador:

$$A_d \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & \cdot & 0 \\ A_{12} & A_{22} & A_{12} & \cdot & 0 \\ 0 & A_{12} & A_{22} & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & A_{12} & A_{NN} \end{bmatrix}$$

E 46

y las matrices restantes son unitarias. El proceso MAA sigue entonces el mismo camino anteriormente indicado en el caso de métodos espectrales.

En la siguiente sección, comparamos resultados obtenidos al utilizar los diferentes métodos.

RESULTADOS:

Analíticos, MAA con métodos espectrales y MAA con esquema de diferencias finitas de orden 2

En las figuras 3 a 5 presentamos los resultados en forma de gráficos de $C(x,T)$ vs. x , para redes con diferentes número de nodos (en la parte superior) y graficamos los porcentajes de errores incurridos en los diferentes enfoques numéricos.

Definimos al % de error de la siguiente manera:

$$\% \text{ error} \equiv (100) \frac{C_{\text{ANALITICA}}(x, T) - C_{\text{NUMERICA}}(x, T)}{C_{\text{ANALITICA}}(x, T)}$$

E 47

Tal como se espera los errores en los esquemas de diferencias finitas son mayores que los correspondientes errores en las soluciones con métodos espectrales, y decrecen a medida que se consideren más nodos en la red.

En el caso de los errores correspondientes al esquema de MAA y métodos espectrales, ellos no decrecen en la forma esperada, pero recordemos que estamos midiendo los errores en los valores de x correspondientes a la posición uniforme de los nodos usados para el esquema con diferencias finitas.

CONCLUSIONES

Hemos probado la posibilidad de utilizar el método de autovalores apropiados conjuntamente con el método numérico espectral en expansiones con polinomios de Chebyshev.

Los errores encontrados en las soluciones MAA+métodos espectrales son menores que los errores encontrados en soluciones MAA+diferencias finitas de segundo orden.

El enfoque del MAA provee expresiones que permiten determinar la respuesta para diferentes tiempos, sin necesidad de iterar en el tiempo. Debido a esto la respuesta para diferentes tipos de excitaciones puede encontrarse mediante convoluciones sencillas.

Todavía queda por probar la generalidad del MAA.

AGRADECIMIENTOS

El autor quisiera agradecer a los Doctores Prasana Venkatesh y Morrel H. Cohen, ambos de la empresa Exxon Research and Engineering Company (Annandale, NJ), por sugerir que el método de autovalores apropiados pueda ser usado con esquemas de métodos espectrales. De igual manera el autor quisiera agradecer al profesor Gilbert Strang del MIT por proveer algunas de las referencias consultadas y por varias discusiones muy útiles. Finalmente el autor agradece a la Academia de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales por haberle invitado a realizar este trabajo en ocasión del bicentenario del nacimiento de Juan Manuel Cagigal.

LITERATURA CITADA

CALLAROTTI R. C.

1994. Circuitual modeling for cylinders with radial dependent conductivities and permittivities. *IEEE transactions on magnetics*, Vol. 30 (5):, 3044-3047.

1995. Proper eigenvalue solution for the transient response of multi dimensional heat transfer systems, *Communications in numerical methods in engineering*, Vol. 11: 715-725.

1996. Transient response of very long cylinders through a new proper eigenvalue method. *IEEE transactions on magnetics*, Vol. 32 (3): 1381-1384.

1997. Métodos espectrales y proceso de autovalores apropiados para la solución transitoria numérica de ecuaciones diferenciales parciales sin iteración temporal. III Seminario de Matemáticas Aplicadas, CIMA, LUZ, Maracaibo, 22-25 de julio Charla invitada.

CALLAROTTI R. C., y M. DI LORENZO

1992. Resistive capacitive tomography. SPE paper 23679, *Proceedings of the 2nd LAPEC*, Caracas, Marzo 8-11: 233-240.

CANUTO, C., M.Y. HUSSAINI, A. QUARTERONI y T.A. ZANG

1988 *Spectral methods in fluid dynamics*. Springer Verlag, Berlín.

FORNBERG, B.

1996. *A practical guide to pseudo spectral methods*. Cambridge university press, Cambridge.

GUILLEMIN, E.A.

1963. *Theory of linear systems*, Wiley, New York.

MOLER C.B., Y STEWARD G.W.

1973. An algorithm for generalized eigenvalue problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 10(2): 241-256.

KAUFMAN L.

1975. The LZ algorithm to solve the generalized eigenvalue theorem for complex matrices. *ACM Trans. On Math. Software*, Vol. 1(3): 271-281.

APENDICE A: DETERMINACIÓN DEL FACTOR K

Derivamos el procedimiento para determinar el prefactor K, que repetimos aquí enfatizando la dependencia de la transformada de Laplace de la concentración en la variable s:

$$C_{MAA}^L(x, s) = \frac{I_0}{a} \frac{K_n \prod_{i=1}^{N-1} (s - c_i)}{K_d s \prod_{j=1}^N (s - p_j)} \equiv K \frac{I_0}{a} \frac{\prod_{i=1}^{N-1} (s - c_i)}{s \prod_{j=1}^N (s - p_j)} \quad \text{AE 1}$$

Recordamos la ecuación en línea previa a la ecuación 19:

$$\begin{aligned} [Q_{ij}(s)][a_j(s)] &= [E_j(s)] \\ [b_{dij} - s c_{dij}][a_j(s)] &= [E_j(s)] \end{aligned} \quad \text{AE 2}$$

Donde hemos incorporado las matrices definidas en el denominador de la ecuación 28. La expresión anterior puede resolverse por inversión matricial:

$$[a_n(s)] = [b_d - s c_d]_{nj}^{-1} [E_j(s)] \quad \text{AE 3}$$

Recordemos la expansión polinomial de $C_{MAA}^L(x, s)$ que combinamos con AE 1:

$$C_{MAA}^L(x, s) = \sum_{n=0}^N [b_d - s c_d]_{nj}^{-1} [E_j(s)] T_n(x) = K \frac{I_0}{s a} \frac{\prod_{i=1}^{N-1} (s - c_i)}{\prod_{j=1}^N (s - p_j)} \quad \text{AE 4}$$

Usando AE 3:

$$C_{MAA}^L(x, s) = \frac{I_0}{s a} \sum_{n=0}^N [b_d - s c_d]_{nj}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} T_n(x) = K \frac{I_0}{s a} \frac{\prod_{i=1}^{N-1} (s - c_i)}{\prod_{j=1}^N (s - p_j)} \quad \text{AE 5}$$

Ahora consideramos el límite de $C(x, t)$ cuando t tiende a infinito:

$$\text{Lim}_{t \rightarrow \infty} [C_{MAA}(x, t)] = \text{Lim}_{s \rightarrow 0} [s C_{MAA}^L(x, s)] \quad \text{AE 6}$$

Con lo que podemos escribir como:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} [C_{MAA}(x, t)] &= \lim_{s \rightarrow 0} [s C_{MAA}^L(x, s)] \\ &= \lim_{s \rightarrow 0} \left\{ \sum_{n=0}^N [b_{dij}]^{-1} \frac{I_0}{a} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} T_n(x) \right\} = \lim_{s \rightarrow 0} \left\{ K \frac{I_0}{a} \frac{\prod_{i=1}^{N-1} (s - c_i)}{\prod_{j=1}^N (s - p_j)} \right\} \end{aligned} \quad \text{AE 7}$$

Finalmente obtenemos K:

$$K = \left\{ \frac{\prod_{j=1}^N (-p_j)}{\prod_{i=1}^{N-1} (-c_i)} \right\} \left\{ \sum_{n=0}^N [b_{dij}]^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} T_n(x) \right\} \quad \text{AE 8}$$

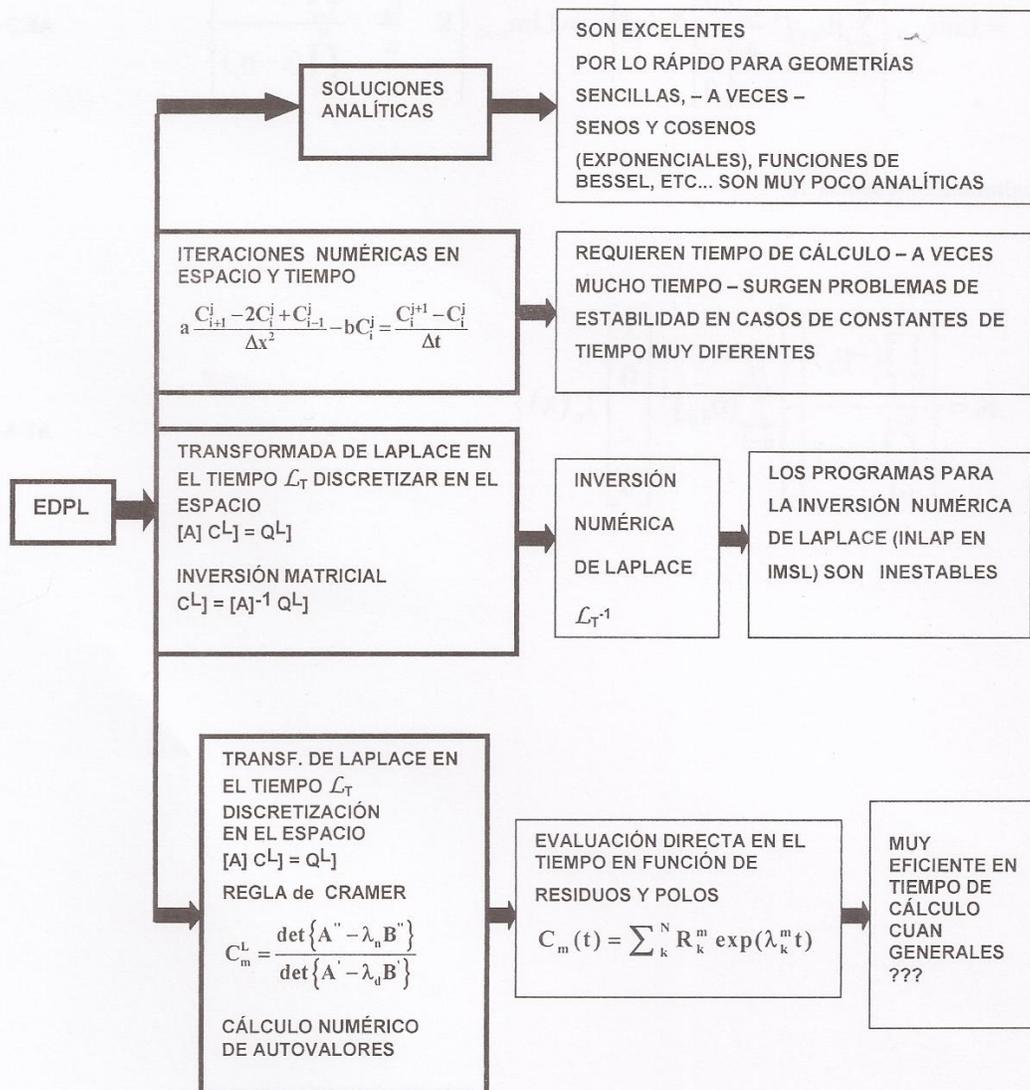


Figura 1: Comparación de diferentes métodos conocidos para la solución de ecuaciones diferenciales parciales y lineales con el método de autovalores apropiados

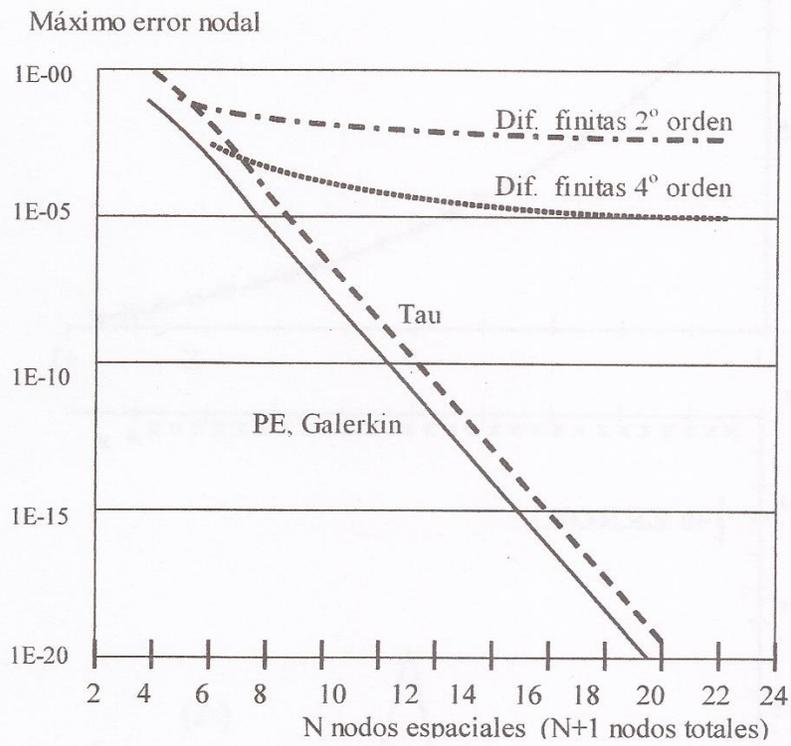


Figura 2: Máximos errores en cada nodo espacial vs. número de nodos usados para diferentes esquemas de cálculo numérico: de diferencias finitas de segundo y cuarto orden, métodos tau, y métodos pseudo espectrales y de Galerkin.

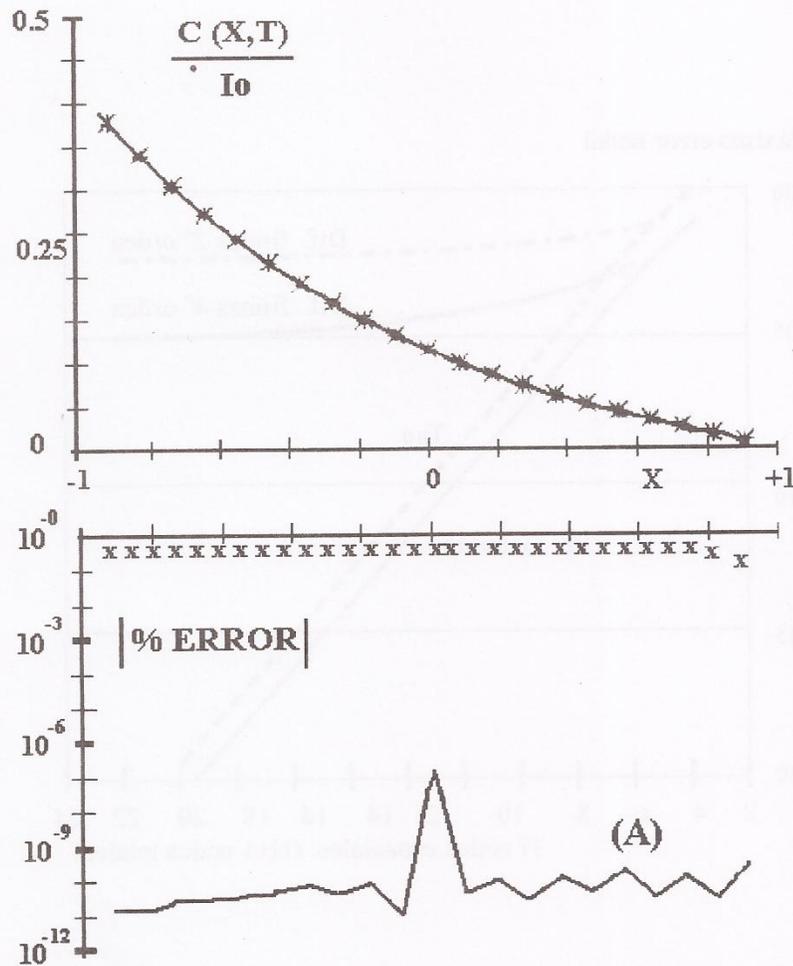


Figura 3. Gráfico superior: $C(x,T)/I_0$ vs x para una red uniforme de $N=22$, $a=1, b=1, T=1$, línea continua=solución analítica, + MAA y métodos espectrales, y X MAA y diferencias finitas de segundo orden. Gráfico inferior: % de error vs x , línea continua para MAA y métodos espectrales, x para error MAA y de diferencias finitas de segundo orden.

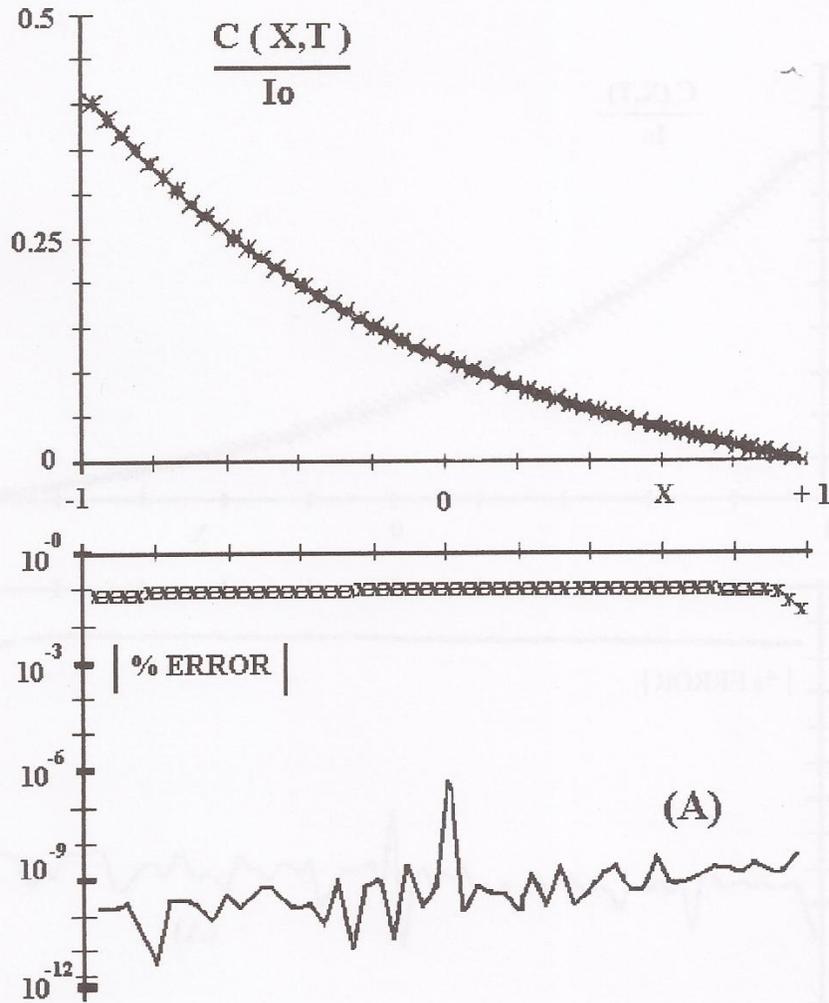


Figura 4. Gráfico superior: $C(x,T)/I_0$ vs x para una red uniforme de $N=52$, $a=1, b=1, T=1$, línea continua=solución analítica, + MAA y métodos espectrales, y X MAA y diferencias finitas de segundo orden. Gráfico inferior: % de error vs x , línea continua para MAA y métodos espectrales, x para error MAA y de diferencias finitas de segundo orden.

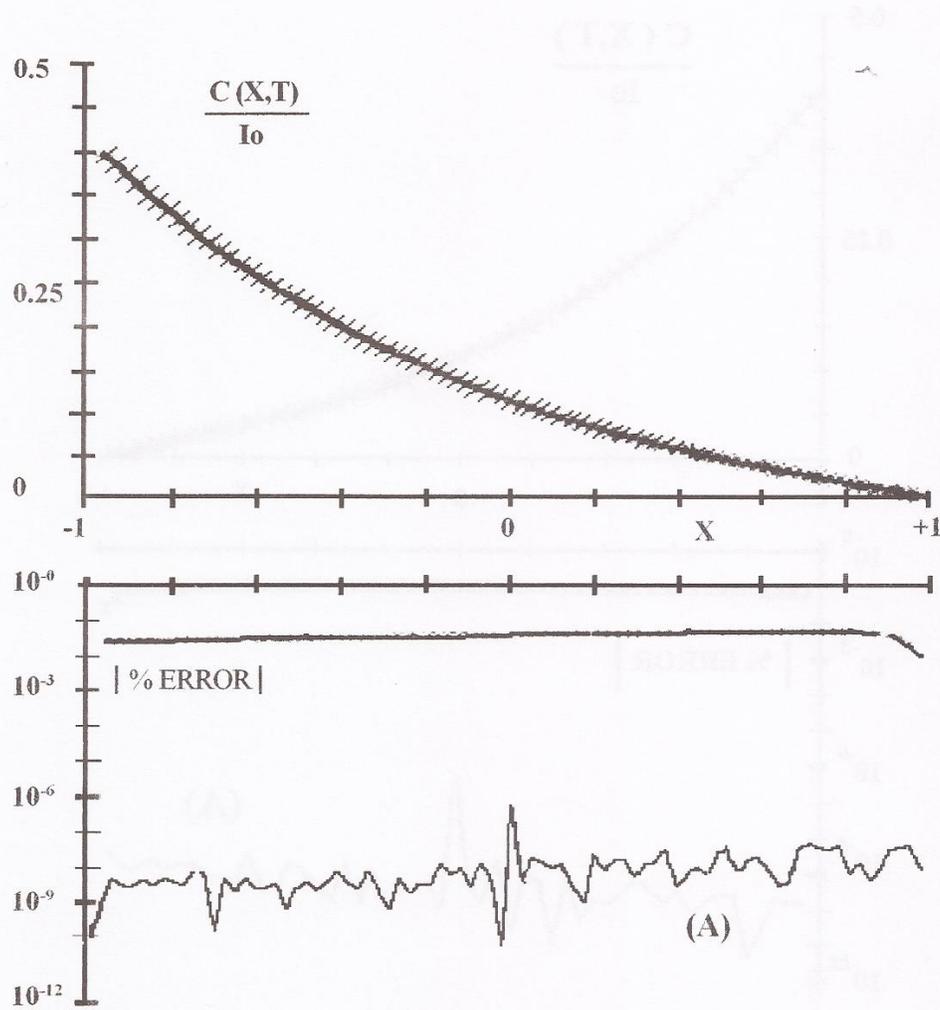


Figura 5. Gráfico superior: $C(x,T)/I_0$ vs x para una red uniforme de $N=82$, $a=1, b=1, T=1$, línea continua=solución analítica, + MAA y métodos espectrales, y X MAA y diferencias finitas de segundo orden. Gráfico inferior: % de error vs x , línea continua para MAA y métodos espectrales, x para error MAA y de diferencias finitas de segundo orden.