

UNIVERSIDAD DE SALAMANCA  
MÁSTER UNIVERSITARIO EN MODELIZACIÓN MATEMÁTICA

# Esquemas Numéricos en Colisiones de Defectos Topológicos

AUTOR: Diego Martín Martín

TUTORES: Miguel Ángel González León

Jesús Martín Vaquero

Curso 2022-2023





VNiVERSiDAD  
D SALAMANCA  
CAMPUS DE EXCELENCIA INTERNACIONAL

UNIVERSIDAD DE SALAMANCA  
MÁSTER UNIVERSITARIO EN MODELIZACIÓN MATEMÁTICA

# Esquemas Numéricos en Colisiones de Defectos Topológicos

AUTOR: Diego Martín Martín

TUTORES: Miguel Ángel González León

Jesús Martín Vaquero

Curso 2022-2023



D. Miguel Ángel González León y D. Jesús Martín Vaquero, profesores del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Salamanca certifican que el trabajo titulado “Esquemas Numéricos en Colisiones de Defectos Topológico” que ha sido realizado por Diego Martín Martín es original e inédito, y que autorizan su presentación.

Fdo: Miguel Ángel González León

Fdo: Jesús Martín Vaquero

Fdo: Diego Martín Martín

**Curso 2022-2023**

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>I</b>
<b>1. Esquemas en diferencias finitas para EDPs hiperbólicas</b>	<b>1</b>
1.1. Nociones básicas de EDPs . . . . .	1
1.1.1. Clasificación de EDPs de segundo orden . . . . .	3
1.2. Métodos numéricos . . . . .	6
1.3. Convergencia . . . . .	9
1.3.1. Consistencia . . . . .	10
1.3.2. Estabilidad . . . . .	12
1.3.3. Ampliación a esquemas multipaso y EDPs de mayor orden . . . . .	19
1.4. Condiciones de contorno absorbentes . . . . .	22
<b>2. Solitones: EDPs no lineales</b>	<b>25</b>
2.1. Orígenes de la Teoría de Solitones . . . . .	25
2.2. Solitones en Teorías de Campos . . . . .	28
2.2.1. Formalismo lagrangiano . . . . .	28
2.2.2. Sistemas hamiltonianos infinito dimensionales . . . . .	30
2.2.3. Teoría de Campos Relativista en (1+1) dimensiones . . . . .	34
<b>3. Métodos numéricos para la ecuación <math>\phi^4</math></b>	<b>39</b>
3.1. Esquemas numéricos . . . . .	40
3.1.1. Primer esquema . . . . .	41
3.1.2. Segundo esquema . . . . .	42
3.1.3. Tercer esquema . . . . .	43
3.1.4. Cuarto esquema . . . . .	43
<b>4. Resultados</b>	<b>46</b>
4.1. Soluciones kink y antikink . . . . .	46
4.2. Pares kink-antikink y antikink-kink . . . . .	47
4.3. Cálculo de número de rebotes y velocidad de salida . . . . .	50
<b>5. Conclusiones</b>	<b>55</b>
<b>Apéndice A: Código de Mathematica</b>	<b>57</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>60</b>

# Índice de figuras

2.1. Solución ecuación KdV representada a tiempo $t$ fijo únicamente como función de la variable espacial $x$ . . . . .	27
2.2. Soluciones de la ecuación SG (solución kink en azul y solución antikink en rojo). . . . .	37
2.3. Visualización de los vacíos estables (obtenido de [16]). . . . .	38
4.1. Evolución temporal de la solución kink utilizando el primer esquema. . . . .	46
4.2. Evolución temporal de la solución antikink utilizando el primer esquema. . . . .	47
4.3. Evolución temporal del par kink-antikink para $x_0 = 15$ y $v = 0.2$ utilizando el primer esquema. . . . .	48
4.4. Evolución temporal y espacial del par kink-antikink para diferentes velocidades utilizando el primer esquema. . . . .	48
4.5. Evolución temporal del par antikink-kink para $x_0 = 15$ y $v = 0.2$ utilizando el primer esquema. . . . .	49
4.6. Máximos y mínimos del par kink-antikink para $x_0 = 15$ utilizando el primer esquema. . . . .	50
4.7. Número de rebotes avistados con cada esquema para un rango de velocidades de 0.15 a 0.30, utilizando incrementos de $1.5 \times 10^{-3}$ . . . . .	51
4.8. Mecanismo de transferencia de energía por resonancia (obtenido de [3]). . . . .	51
4.9. Evolución del centro del kink y del antikink para diferentes velocidades utilizando el primer esquema. . . . .	52
4.10. Velocidad de salida calculada con cada esquema para un rango de velocidades de 0.15 a 0.30, utilizando incrementos de $1.5 \times 10^{-3}$ . . . . .	53
4.11. Estructura fractal de las velocidades de salida (obtenido de [3]). . . . .	53
4.12. Restricción de la figura 4.7 a los casos reflexivos (el resto de casos se sustituyen por 0). . . . .	54
A.1. Código empleado para el cálculo numérico del primer esquema. . . . .	57
A.2. Código empleado para el cálculo numérico de las primeras iteraciones del cuarto esquema. . . . .	58
A.3. Código empleado para graficar la evolución temporal de la solución. . . . .	58
A.4. Código empleado para el cálculo del número de rebotes. . . . .	59
A.5. Código empleado para el cálculo de la velocidad de salida. . . . .	59

# Introducción

El objetivo fundamental de este Trabajo Fin de Máster es el estudio de varios esquemas numéricos para el análisis de las colisiones entre solitones en Teorías de Campos, comúnmente denominados defectos topológicos.

En el caso particular de teorías relativistas con un único campo escalar definidas en un espacio tiempo 1+1 dimensional este proceso viene determinado por la ecuación en derivadas parciales:

$$u_{tt} - u_{xx} = -\frac{dV(u)}{du} \quad (1)$$

para una determinada función  $V(u)$  (función potencial) del campo escalar real  $u(x, t)$ , y tomándose en consideración diferentes condiciones iniciales  $u(x, 0)$ .

La resolución de este tipo de problemas de forma exacta es en general inabordable (salvo para funciones potenciales y condiciones iniciales triviales), por lo que se hace necesario bien buscar soluciones de un determinado tipo funcional (como es el caso de los solitones u ondas solitarias) o bien utilizar cálculo numérico. En este trabajo se proponen y analizan diferentes esquemas para resolver numéricamente la ecuación (1) cuando la condición inicial describe la combinación de dos soluciones de tipo solitónico. De esta forma la solución numérica obtenida representa la evolución en el tiempo de dicha configuración, y en definitiva la descripción del proceso de colisión entre los solitones originales.

El cálculo numérico es una herramienta matemática que aparece en una amplia variedad de áreas de gran interés. Sus numerosas aplicaciones permanecieron desconocidas hasta la década de los años cincuenta, cuando el avance de los medios informáticos y la capacidad de computación de alta velocidad permitieron la resolución de problemas matemáticos, físicos e ingenieriles que hasta entonces eran insolubles. Actualmente, esta teoría se puede englobar dentro de lo que se conoce como Análisis Numérico y su relevancia puede verse reflejada en la gran cantidad de literatura o en el extenso abanico de publicaciones de investigación científica que abordan este tema.

Las aproximaciones por diferencias finitas para las derivadas ya habían sido encontradas por Euler en 1768 [15]. La diferencia finita más sencilla aparece cuando se estudia el problema  $dx/dt = f(x, t)$ ,  $x(0) = a$ , sustituyendo la derivada  $(dx/dt)_{n-1}$  por la aproximación  $(x_n - x_{n-1})/\Delta t$ . De este modo se obtiene una relación de recurrencia  $x_n = x_{n-1} + \Delta t f(x_{n-1}, t_{n-1})$ ,  $x_0 = a$  para  $n > 0$ , conocido como método de Euler.

Su extensión a problemas bidimensionales fue llevada a cabo probablemente de la mano de Runge en 1908 [30], analizando la solución numérica del problema de Poisson

$u_{xx} + u_{yy} = C$ , con  $C$  una constante a determinar. Posteriormente, el estudio numérico se generalizó a una gran diversidad de problemas en múltiples dimensiones y es, a día de hoy, un área de gran interés científico, enfocada en mejorar las aproximaciones numéricas con el menor coste computacional posible.

Esta memoria recoge las bases de la teoría de esquemas en diferencias finitas haciendo un énfasis particular en las ecuaciones de tipo hiperbólico (ecuación 1), especialmente, las que resultan atractivas en el ámbito de la Teoría de Campos. El objetivo primordial será el análisis de las soluciones numéricas del modelo  $\phi^4$ , descrito por medio de la expresión:

$$u_{tt} - u_{xx} = 2u - 2u^3$$

que se utilizará como ejemplo representativo a lo largo de este trabajo.

El estudio de la teoría de la ecuación  $\phi^4$  es uno de los modelos centrales de la física teórica moderna. Sus defectos topológicos, o kinks, describen excitaciones estables, similares a partículas, que desempeñan un papel fundamental en procesos que van desde la cosmología a la física de partículas y la teoría de la materia condensada. El modelo  $\phi^4$  constituye un ejemplo de una ecuación no lineal con soluciones de tipo solitónico o ondas viajeras, por lo que es un modelo muy adecuado para estudiar las colisiones entre dichos solitones.

Las soluciones de tipo solitón aparecen en numerosos sistemas no lineales y han demostrado ser de gran importancia dentro de campos como la óptica no lineal, la física nuclear o las teorías de supersimetría, aparte de los ya previamente citados. El estudio de las ondas solitarias y su construcción viene acompañado siempre de modelos matemáticos sumamente relevantes, como es el caso de la ecuación de Korteweg-de Vries, el modelo de Seno-Gordon o la ecuación de Schrödinger no lineal.

La búsqueda de soluciones de estos sistemas dinámicos no lineales viene motivada por la Mecánica Clásica. En el siglo XIX, las investigaciones de Liouville establecieron un marco general que caracterizaba los casos en donde las ecuaciones de movimiento eran resolubles via cuadraturas. Los descubrimientos realizados para los sistemas hamiltonianos finito dimensionales fomentaron la generalización de estas ideas a los sistemas dinámicos hamiltonianos infinito dimensionales, entre los cuales se encuentra el modelo protagonista de este Trabajo de Fin de Máster.

A continuación, se describirá brevemente la estructura y contenido de este trabajo. La memoria consta de cinco capítulos y un apéndice.

En el capítulo 1, se introducen los esquemas en diferencias finitas y sus propiedades más elementales. Se dará inicio a este capítulo presentando resumidamente las ecuaciones en derivadas parciales de tipo hiperbólico. Una vez analizados los aspectos fundamentales asociados a estas ecuaciones, que se podrán encontrar con un mayor nivel de detalle en las referencias empleadas en su redacción y descritas más abajo, se procederá a introducir los esquemas numéricos y estudiar la convergencia de los mismos. La convergencia de un esquema vendrá determinada por su consistencia y estabilidad y, para el estudio de esta última, se empleará un método basado en el análisis de Fourier, el análisis de Von Neumann, que permitirá efectuar este análisis de una forma mucho más sencilla.

Para finalizar, se presentarán las condiciones de contorno absorbentes, cruciales dentro de las simulaciones numéricas de colisiones de defectos topológicos. Las referencias más importantes en la redacción de este capítulo han sido [5], [28], [35] y [36].

Al principio del capítulo 2, se introduce el contexto histórico de las ondas solitarias o solitones. Dentro de este marco histórico, se describen algunas de las ecuaciones en derivadas parciales más destacables que dan origen a soluciones de tipo solitónico. Debido a la gran complejidad de algunas de ellas, no se incluirá en esta memoria un análisis en profundidad, sin embargo, este podrá ser consultado dentro de las citas bibliográficas que aparecen a lo largo del capítulo. El capítulo continúa con una ligera introducción al formalismo lagrangiano que dará paso al estudio de la teoría de campos relativista en (1+1) dimensiones. La bibliografía empleada en su redacción es [6], [9], [17] y [20].

En el siguiente capítulo se da a conocer el modelo  $\phi^4$ , exponiendo algunas de sus particularidades. Utilizando los conocimientos adquiridos en los anteriores capítulos, se estudiarán de forma teórica cuatro esquemas en diferencias finitas asociados a su ecuación en derivadas parciales. Para la redacción de este capítulo se han empleado, además de las referencias citadas en los capítulos anteriores, [21], [34], [25], [4].

En el cuarto capítulo se exponen los resultados obtenidos en las simulaciones de los esquemas estudiados en el capítulo anterior. En la primera parte del capítulo, imponiendo como condición inicial la solución kink o antikink, se obtendrán aproximaciones de la solución exacta del modelo  $\phi^4$ . En la segunda parte, se optará por una condición inicial diferente, un par kink-antikink o antikink-kink, que permitirá aproximar la colisión entre las soluciones estudiadas en la primera parte del capítulo. La última parte se destinará a las mediciones realizadas sobre cada uno de los métodos numéricos que permitirán establecer una comparativa.

En el capítulo final, se expondrán los objetivos logrados y se abordarán los desafíos que surgieron a lo largo de la ejecución de este proyecto. Adicionalmente, se llevará a cabo un análisis exhaustivo de los resultados obtenidos en el capítulo anterior.

El apéndice recoge fragmentos de código utilizados en las simulaciones numéricas de los diferentes esquemas. El software elegido para estas tareas de computación ha sido Wolfram Mathematica. La memoria finaliza con la bibliografía empleada en su elaboración.

# Capítulo 1

## Esquemas en diferencias finitas para EDPs hiperbólicas

El cometido de este primer capítulo será la presentación de los conceptos clave que constituyen la base matemática para este Trabajo de Final de Máster. Como el objetivo primordial de esta memoria será establecer una comparativa entre esquemas numéricos empleados en la resolución de ecuaciones en derivadas parciales (EDPs); será beneficioso recordar y tener en mente algunos conocimientos adquiridos durante el grado y enriquecidos en el máster.

Sin ánimo de extendernos demasiado, estas nociones irán encaminadas al estudio de la ecuaciones de tipo hiperbólico, no obstante, la mayoría de los resultados serán adaptables, bajo ligeras modificaciones, al resto de las EDPs. Estas ideas generales se ilustrarán utilizando un ejemplo que frecuenta la literatura; la ecuación de ondas de primer orden. Sin embargo, como se ha mencionado en la introducción, la ecuación objetivo será la ecuación  $\phi^4$  que, a diferencia de la anterior, destaca por ser uno de los ejemplos más representativos de ecuación de segundo orden. La aplicabilidad de estos principios a una ecuación de mayor orden no será trivial y requerirá la modificación de ciertos aspectos con el fin de mantener su veracidad.

Aunque no se profundizará en ello en este trabajo, cabe mencionar que se puede llegar a construir una teoría mucho más extensa que generalice estas particularidades a espacios de mayor dimensión y a ecuaciones de orden superior [36].

### 1.1. Nociones básicas de EDPs

Antes de dar cualquier definición, conviene fijar una notación que aparecerá de manera frecuente en este documento.

Mientras que no se indique lo contrario, las derivadas parciales de una función

$u(x_1, x_2, \dots, x_n)$  se denotarán mediante subíndices, es decir,

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \partial_{x_i} u = u_{x_i}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = \partial_{x_i x_j} u = u_{x_i x_j}, \quad \dots \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\}$$

Las colisiones de defectos topológicos y, en general, innumerables problemas de física e ingeniería vienen definidos por una ecuación que enlaza estas derivadas parciales.

**Definición 1.1.1.** *Una ecuación en derivadas parciales (EDP) es una igualdad que relaciona una variable dependiente  $u$ , sus derivadas parciales y las variables independientes; esto es,*

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n, u, u_{x_1}, u_{x_2}, \dots, u_{x_n}, u_{x_1 x_1}, u_{x_1 x_2}, \dots) = 0$$

*El orden de la ecuación vendrá dado por la derivada de mayor grado que este presente.*

Si  $F$  es una EDP de orden  $k$  definida sobre un dominio  $\Omega$ , se considerará una solución clásica de  $F$  a una función  $u \in C^k(\Omega)$  que verifique la ecuación 1.1.

A diferencia de las ecuaciones diferenciales ordinarias, no existe una teoría general para encontrar las soluciones clásicas de EDPs de segundo orden. La búsqueda de estas soluciones ha dado origen a teorías de gran importancia en la actualidad como es el caso de la teoría de Distribuciones y espacios de Sobolev [2] o, la teoría que impulsa el desarrollo de esta memoria, el análisis numérico.

**Ejemplo 1.1.1.** *A continuación, se expondrán una serie de ejemplos de EDPs, todos ellos fundamentados en problemas reales:*

1.  $u_x + u_y = 0$  (transporte).
2.  $u_t + cu_x = 0$  con  $c$  una constante que describe la velocidad de la onda (ecuación de ondas de primer orden).
3.  $\Delta u = u_{x_1 x_1} + u_{x_2 x_2} + \dots + u_{x_n x_n} = 0$  (ecuación de Laplace).
4.  $u_t - \Delta u = 0$  (ecuación del calor).
5.  $u_{tt} - cu_{xx} = 0$  siendo  $c$  una constante que describe la velocidad (ecuación de ondas de segundo orden).
6.  $u_{tt} - u_{xx} = 2u - 2u^3$  (ecuación  $\phi^4$ ).
7.  $u_{tt} - u_{xx} = -m^2 \sin u$  con  $m > 0$  (ecuación de Seno-Gordon).
8.  $iu_t + u_{xx} = u f(|u|)$  (ecuación de Schrödinger no lineal).
9.  $u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0$  (ecuación de Korteweg-de Vries).

Cada una de las ecuaciones del anterior ejemplo tiene dos variables independientes. Las dos primeras ecuaciones son de primer orden, las seis siguientes son de segundo orden y la última es de tercer orden.

Como se había comentado, estas ecuaciones hacen referencia a problemas que surgen de la observación de la propia naturaleza. Cabe destacar que la ecuación de Laplace, del calor y de ondas aparecen en la literatura como ejemplos ilustrativos de ecuaciones de tipo elíptico, parabólico e hiperbólico, respectivamente (esta clasificación será analizada en la próxima sección). Asimismo, los tres últimos ejemplos son representativos dentro de los solitones y la teoría de campos.

Una propiedad básica de las EDPs que facilita la búsqueda de soluciones exactas es la linealidad.

**Definición 1.1.2.** *Dada una ecuación en derivadas parciales, si dicha ecuación se puede expresar como*

$$Du = g$$

*donde  $D$  es un operador lineal y  $g$  una función, entonces se dice que la ecuación es lineal. Si además,  $g$  es igual a cero, la ecuación es homogénea.*

Notése que dado un problema lineal, la combinación lineal de soluciones también es una solución del problema.

**Observación 1.1.1.** *Si se considera el operador lineal*

$$D = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}$$

*se tiene que la ecuación 1 del ejemplo 1.1.1 se puede reescribir como  $Du = 0$ , luego, es una ecuación lineal homogénea. De manera similar, se demuestra que las ecuaciones 2, 3, 4 y 5 son lineales homogéneas. En cambio, el resto de ecuaciones no son lineales debido a que no existe tal operador lineal.*

### 1.1.1. Clasificación de EDPs de segundo orden

Limitando el estudio al plano real, parece natural que la ecuación de Laplace, con expresión algebraica el círculo  $x^2 + y^2 = 1$ , tenga diferentes propiedades que la ecuación de ondas, con ecuación algebraica la hipérbola  $x^2 - y^2 = 1$ . En base a estas analogías de las EDPs con las secciones cónicas, se puede establecer una clasificación elemental de las ecuaciones de segundo orden.

Sea entonces una EDP de segundo orden en un espacio bidimensional, es decir,

$$Du \equiv a_{11}(x, y)u_{xx} + 2a_{12}(x, y)u_{xy} + a_{22}(x, y)u_{yy} + a_1(x, y)u_x + a_2(x, y)u_y + a_0(x, y)u = g$$

**Definición 1.1.3.** *Se denomina parte principal del símbolo de  $D$  a*

$$D_p(x, y; i\xi, i\eta) = -a_{11}\xi^2 - 2a_{12}\xi\eta - a_{22}\eta^2$$

Esta operación permite asociar a las EDPs de segundo orden una operación alge-

braica. Además, esta forma cuadrática puede ser representada en forma matricial como

$$D_p(x, y; i\xi, i\eta) = (\xi, \eta) \begin{pmatrix} -a_{11} & -a_{12} \\ -a_{12} & -a_{22} \end{pmatrix} (\xi, \eta) \quad (1.1)$$

Recuérdese que la forma cuadrática es definida si su matriz asociada es definida (positiva o negativa) o, en otras palabras, si sus autovalores tienen el mismo signo. Se considera indefinida cuando sus autovalores difieren en el signo y singular o degenerada cuando presenta un autovalor nulo.

**Definición 1.1.4.** *La ecuación en derivadas parciales  $Du = g$  es elíptica si la matriz dada en 1.1 es definida, hiperbólica si es indefinida y parabólica si su matriz es singular o degenerada.*

**Ejemplo 1.1.2.** *La ecuación de Laplace es elíptica debido a que la matriz asociada a la parte principal de su símbolo es*

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

*y, por tanto, esta ecuación es de tipo elíptico.*

*De igual modo, podemos observar que la ecuación del calor es parabólica y la ecuación de ondas es hiperbólica, ya que sus matrices asociadas vienen dadas por*

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

*respectivamente.*

Como consecuencia de los resultados anteriores, la clasificación de las ecuaciones se puede reducir al siguiente teorema de demostración trivial.

**Teorema 1.1.1.** *Sea  $F$  una EDP de segundo orden en un espacio bidimensional que tenga  $(a_{ij})$  como matriz asociada a la parte principal de su símbolo. Entonces,  $F$  es elíptica si  $a_{12}^2 < a_{11}a_{22}$ ,  $F$  es parabólica si  $a_{12}^2 = a_{11}a_{22}$  y  $F$  es hiperbólica si  $a_{12}^2 > a_{11}a_{22}$ .*

**Corolario 1.1.1.** *Siguiendo la notación del anterior teorema, si  $F$  es elíptica, su expresión es equivalente a la dada por*

$$u_{xx} + u_{yy} + a_1u_x + a_2u_y + a_0u = g$$

*si  $F$  es parabólica, su ecuación equivale a*

$$u_{xx} + a_1u_x + a_2u_y + a_0u = g$$

*y si  $F$  es hiperbólica, se puede expresar como*

$$u_{xx} - u_{yy} + a_1u_x + a_2u_y + a_0u = g$$

Demostración: La demostración consiste en una sencilla transformación lineal de las variables dependientes. ■

Con el fin de dar una clasificación generalizada de las ecuaciones de segundo orden, considérese un espacio  $n$ -dimensional sobre el que tenemos definida una *EDP* de segundo orden de la forma:

$$Du \equiv a_{ij}(X) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + b_i(X) \frac{\partial u}{\partial x_i} + c(X)u = 0 \quad (1.2)$$

**Definición 1.1.5.** *La ecuación 1.2 es elíptica si todos los autovalores de la matriz  $A = (a_{ij}(X))$  tienen el mismo signo, parabólica, si  $A$  es singular, y hiperbólica, si un único autovalor de  $A$  tiene diferente signo al resto. En caso de que existan más autovalores con signo diferente y  $A$  sea no singular, se denominará ultrahiperbólica.*

Notése que, para cualquier dimensión, la ecuación de Laplace continuará siendo elíptica y la del calor, parabólica. Asimismo, generalizando la ecuación de ondas a un espacio  $n$ -dimensional, es decir, la ecuación dada por  $u_{tt} - c\Delta$ , se obtiene que mantiene el tipo hiperbólico.

**Observación 1.1.2.** *Esta clasificación no se restringe únicamente al orden dos, sino que puede ser generalizada a cualquier orden. Con este objetivo, en [28] se define un operador sobre superficies características que permite establecer una clasificación global de las *EDPs*. No obstante, no se proporcionarán detalles debido a su gran extensión y se dejará a discreción del lector interesado en explorar este tema en profundidad.*

Existe una relación entre el tipo de ecuación y el problema físico o ingenieril que trata de describir. Según [5], estos problemas se pueden dividir en tres categorías: problemas de equilibrio, de autovalores y de propagación. Como se verá a continuación cada uno de ellos conlleva asociada un tipo de ecuación.

Los problemas de equilibrio son problemas de estado estacionario en los que la configuración de  $u$  sobre un dominio  $\Omega$  se determina por medio de la ecuación diferencial

$$Du = g$$

con  $\Omega$  sujeto a ciertas restricciones, denominadas condiciones de contorno. Generalmente,  $\Omega$  suele ser un conjunto cerrado y acotado. Este tipo de problemas se denominan problemas de valor de frontera y ejemplos típicos son la dinámica de fluidos viscosos, problemas de elasticidad o distribución de la temperatura de un material. Habitualmente, suelen venir dados por ecuaciones de tipo elíptico.

Los problemas de autovalores pueden ser considerados una extensión de los anteriores. Consisten en la búsqueda de una o varias constantes  $\lambda$  y las correspondientes funciones  $u$  que verifiquen la ecuación diferencial

$$Du = \lambda Lu$$

con ciertas condiciones de contorno sobre un dominio  $\Omega$ . En este caso, los operadores diferenciales  $D$  y  $L$  son de tipo elíptico y algunos ejemplos son los problemas de estabilidad de estructura, de resonancia en circuitos eléctricos y de frecuencia de vibraciones.

Por último, los problemas de propagación son problemas de valor inicial que tienen

un estado inestable o transitorio. El objetivo consiste en predecir el comportamiento de un sistema a partir de un estado inicial, es decir, resolver la ecuación diferencial

$$Du = g$$

en un dominio  $\Omega$  sujeto a condiciones iniciales y a condiciones de contorno sobre fronteras abiertas. En este caso,  $\Omega$  es abierto y los ejemplos físicos más frecuentes son la propagación de ondas de presión en un fluido o la propagación del calor. Las ecuaciones más frecuentes que rigen este tipo de fenómenos son las parabólicas o hiperbólicas.

Como se ha mencionado con anterioridad, los problemas físicos a tratar en esta presentación vienen descritos por ecuaciones de tipo hiperbólico. Por consiguiente, de aquí en adelante y mientras no se indique lo contrario, se supondrá que las EDPs se comportarán de manera elíptica dentro de un espacio bidimensional.

## 1.2. Métodos numéricos

Habiendo repasado los conceptos fundamentales asociados a las ecuaciones en derivadas parciales, se dedicará esta sección al estudio de los esquemas en diferencias finitas. En este enfoque numérico, las ecuaciones en derivadas parciales se aproximan mediante discretizaciones espaciales y temporales, lo que permite su resolución de manera aproximada utilizando métodos computacionales.

Como el enfoque principal de este trabajo es modelar procesos físicos, a partir de este punto en adelante, se asumirá que cualquier problema de valor inicial está bien planteado, debido a que la propia naturaleza de estos fenómenos exige que satisfagan la siguiente definición:

**Definición 1.2.1.** *Un problema de valor inicial para una ecuación en derivadas parciales está bien planteado si dado un tiempo  $T \geq 0$ , existe una constante  $C_T$  tal que cualquier solución  $u(x, t)$  satisfice*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(x, t)|^2 dx \leq C_T \int_{-\infty}^{\infty} |u(x, 0)|^2 dx$$

para  $0 \leq t \leq T$ .

Una herramienta fundamental para la construcción de esquemas en diferencias finitas es la creación de una malla de puntos. Su función consiste en discretizar el dominio de la EDP en una serie de puntos espaciados regularmente. Cada punto de la malla representará una ubicación en el espacio y se asignará un valor numérico correspondiente a la solución aproximada en ese punto.

Debido a las condiciones de los problemas a tratar, se supondrá que el dominio de la EDP es de la forma  $\Omega = [-s, s] \times [0, t_e] \subset \mathbb{R}_x \times \mathbb{R}_t$  y dados  $h = \Delta x$  y  $k = \Delta t$ , se definirá sobre  $\Omega$  la malla de puntos  $(x_m, t^n) = (-s + mh, nk)$  con  $n = 0, 1, \dots, t_e/k$  y  $m = 0, 1, \dots, 2s/h$ .

Conforme a la costumbre, para cualquier función  $u$  definida sobre la malla se denotará por  $u_m^n$  al valor de  $u$  en el punto  $(x_m, t^n)$ .

El siguiente ejemplo nos muestra la construcción de los esquemas básicos utilizando las ya conocidas series de Taylor

**Ejemplo 1.2.1.** *El desarrollo de las series de Taylor del punto  $u_{m+1}^n$  sobre  $(x_m, t^n)$  nos dice que*

$$u_{m+1}^n = u_m^n + hu_x(x_m, t^n) + \frac{h^2}{2!}u_{xx}(x_m, t^n) + \frac{h^3}{3!}u_{xxx}(x_m, t^n) + \mathcal{O}(h^4)$$

Luego, reescribiendo esta ecuación se obtiene una diferencia progresiva de primer orden para  $u_x$  valorada sobre el punto  $(x_m, t^n)$ :

$$u_x(x_m, t^n) = \frac{u_{m+1}^n - u_m^n}{h} + \mathcal{O}(h)$$

De manera similar, utilizando las series de Taylor de  $u_{m-1}^n$  sobre  $(x_m, t^n)$  se llega a una diferencia regresiva de primer orden

$$u_x(x_m, t^n) = \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Ahora bien, si se restan los desarrollos de Taylor del punto  $u_{m+1}^n$  y del punto  $u_{m-1}^n$  sobre  $(x_m, t^n)$  se llega a que

$$u_{m+1}^n - u_{m-1}^n = 2hu_x(x_m, t^n) + \frac{h^3}{3}u_{xxx}(x_m, t^n) + \mathcal{O}(h^5)$$

y de esta forma se puede construir la diferencia centrada de primer orden:

$$u_x(x_m, t^n) = \frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Considérese la ecuación de ondas de primer orden (ejemplo 1.1.1). Siguiendo los pasos anteriores, se pueden construir diferentes esquemas para dicha ecuación:

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} + c \frac{u_{m+1}^n - u_m^n}{h} = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} + c \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} + c \frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} = 0 \quad (1.5)$$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^{n-1}}{2k} + c \frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} = 0 \quad (1.6)$$

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^{n-1}}{2k} + c \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} = 0 \quad (1.7)$$

Utilizando este método se pueden construir esquemas en diferencias finitas para cualquier EDP de primer orden. Simplemente bastará con obtener los desarrollos de Taylor de sus derivadas parciales y sustituir en la ecuación original.

Cada uno de los esquemas de este último ejemplo permiten expresar  $u_m^{n+1}$  como una combinación lineal de los valores de  $u$  en los niveles  $n$  y  $n - 1$ . A título ilustrativo, el esquema 1.3 puede expresarse de la forma

$$u_m^{n+1} = u_m^n - cn_c(u_{m+1}^n - u_m^n) = (1 + cn_c)u_m^n - cn_c u_{m+1}^n \quad (1.8)$$

con  $n_c = k/h$ . La cantidad  $n_c$  será un elemento recurrente en los esquemas de ecuaciones hiperbólicas y siempre se referirá al cociente entre las longitudes de paso.

Los esquemas numéricos de un solo paso o unipaso se caracterizan por calcular la solución en el instante  $t + 1$  utilizando únicamente la información del tiempo  $t$ . Dicho de otro modo, los esquemas numéricos de un solo paso son aquellos en los que solo aparece  $u$  en dos niveles,  $n + 1$  y  $n$ . Trivialmente, se observa que los tres primeros esquemas del ejemplo son unipaso.

Aquellos esquemas en los que aparezcan más de dos niveles de la variable temporal se denominarán esquemas multipaso.

**Observación 1.2.1.** *A diferencia de los esquemas unipaso, que solo necesitarán como datos iniciales los valores  $u_m^0$ , en los esquemas multipaso será necesaria una inicialización con valores de  $u$  para diferentes niveles temporales. Para obtener estas condiciones iniciales requeridas en los esquemas multipaso, existen múltiples estrategias que dependerán del problema tratado y del esquema utilizado.*

*Por ejemplo, en [4] se emplea para la primera iteración, un desarrollo de Taylor de orden cuarto y, para las tres posteriores, un esquema implícito. Estas aproximaciones les permiten inicializar un esquema multipaso explícito.*

Además, se distinguirá entre esquemas explícitos e implícitos. Los métodos considerados en el ejemplo 1.2.1 eran todos explícitos. Se dirá que un esquema en diferencias finitas es explícito cuando  $u_m^{n+1}$  se pueda escribir como una suma finita de  $u_m^{n'}$ , con  $n' \leq n$  y, en caso contrario, se dirá que el esquema es implícito.

Para obtener la solución de los esquemas implícitos se requerirá la resolución de ecuaciones algebraicas no lineales. Por consiguiente, el coste computacional de estos esquemas es considerablemente mayor, sin embargo, estos esquemas ofrecen la ventaja de una mayor región de estabilidad como se discutirá posteriormente.

**Ejemplo 1.2.2.** *De manera similar, se pueden construir aproximaciones para derivadas de orden superior. Por ejemplo, una diferencia progresiva de segundo orden para  $u_{xx}$  sobre  $u_m^n$  viene dada por la expresión:*

$$u_{xx}(x_m, t^n) = \frac{u_{m+2}^n - 2u_{m+1}^n + u_m^n}{h^2} + \mathcal{O}(h)$$

La diferencia regresiva vendrá dada por:

$$u_{xx}(x_m, t^n) = \frac{u_m^n - 2u_{m-1}^n + u_{m-2}^n}{h^2} + \mathcal{O}(h)$$

La diferencia central se expresará como:

$$u_{xx}(x_m, t^n) = \frac{u_{m+2}^n - 2u_m^n + u_{m-2}^n}{4h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

o, lo que es lo mismo,

$$u_{xx}(x_m, t^n) = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

A partir de estas aproximaciones se pueden construir esquemas en diferencias finitas para EDPs de cualquier orden. En particular, el esquema central para la ecuación  $\phi^4$  (detallada en el ejemplo 1.1.1) es de la forma:

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + 2u_m^n - 2(u_m^n)^3 \quad (1.9)$$

Este último esquema será analizado en detalle más adelante.

Tras ver estos ejemplos, una pregunta recurrente sería qué esquema utilizar. A lo largo de este capítulo, se intentará dar información sobre cada uno de ellos para ayudar a seleccionar el más adecuado. No obstante, esta elección dependerá de cada problema y de nuestras prioridades. Por ejemplo, como se verá a continuación, un esquema de mayor orden suele garantizar mejores aproximaciones, sin embargo, el coste computacional suele incrementarse. Otra clara diferencia vendría marcada entre los esquemas implícitos y explícitos, cuyo uso, como ya se ha comentado anteriormente, dependerá también de si anteponeamos precisión sobre complejidad computacional.

Estos detalles tienen cierta relevancia, no obstante, el factor clave de un esquema es su convergencia. Un esquema es convergente si, a medida que se refina la discretización espacial y temporal, la solución numérica se aproxima cada vez más a la solución exacta del problema continuo. En el siguiente apartado, se analizará esta convergencia y, para ello, bastará con demostrar la consistencia, que no es más que la solución exacta coincida con la aproximación numérica cuando  $h$  se hace muy pequeña, y la estabilidad, que los errores que comete no aumente con las iteraciones.

### 1.3. Convergencia

El propósito principal de un esquema en diferencias finitas es obtener una aproximación numérica de la solución de una EDP. Por tanto, un aspecto de gran interés es el error que comete en dicha aproximación. Resulta crucial que este error disminuya a medida que la  $h$  y la  $k$  tiendan a cero. Para llegar a una definición adecuada de la consistencia comencemos por dar una serie de definiciones básicas.

Se comenzará explorando el escenario de una EDP en un espacio bidimensional con derivadas parciales de primer orden respecto de  $t$ , es decir,

$$D_{x,t}u \equiv F(x, t, u, u_x, u_t, u_{xx}, u_{xt}, u_{xxx}, u_{xxt}, \dots) = g(x, t) \quad (1.10)$$

con una serie de condiciones iniciales  $u(x, 0)$  que determinen una única solución.

**Definición 1.3.1.** *Un esquema en diferencias finitas para la ecuación 1.10 se dice convergente si dada cualquier solución de la ecuación diferencial,  $u(x, t)$ , las aproximaciones del esquema,  $u_m^n$ , verifican:*

1.  $u_m^0$  converge a  $u(x, 0)$  cuando  $x_m \rightarrow x$ .
2.  $u_m^n$  converge a  $u(x, t)$  cuando  $(x_m, t^n) \rightarrow (x, t)$ .

cuando  $(h, k) \rightarrow (0, 0)$ .

Como se puede ver la convergencia es la propiedad esencial de cualquier esquema en diferencias finitas. Un esquema que no sea convergente resulta poco útil en la mayoría de los casos. Sin embargo, probar de manera directa que un esquema sea convergente no es una tarea sencilla. El teorema 1.3.4 permitirá dividir su estudio en dos partes: consistencia y estabilidad, que junto con el análisis de Fourier se establecerá una alternativa más eficiente para el estudio de dicha convergencia.

### 1.3.1. Consistencia

La consistencia de un esquema en diferencias finitas se basa en comprobar si cuando la malla pasa al continuo, es decir, cuando  $k$  y  $h$  se hacen 0, el esquema converge. En otras palabras,

**Definición 1.3.2.** *Se dice que un esquema en diferencias finitas,  $P_{h,k}u = g$ , de la ecuación 1.10 es consistente si para toda función  $u$  diferenciable,  $P_{h,k}u$  converge a  $D_{x,t}u$  cuando  $(h, k) \rightarrow (0, 0)$ .*

A continuación, se introducirá un ejemplo a título ilustrativo que permita conceptualizar esta propiedad.

**Ejemplo 1.3.1.** *Considérese el esquema en diferencias progresivas de la ecuación de ondas de primer orden (presentado en la ecuación 1.3). En este caso, se tiene que el operador diferencial del esquema viene dado por*

$$P_{h,k}u = \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} + c \frac{u_{m+1}^n - u_m^n}{h}$$

El desarrollo de Taylor nos dice que

$$\begin{aligned} u_{m+1}^n &= u_m^n + hu_x(x_m, t^n) + \frac{1}{2}h^2u_{xx}(x_m, t^n) + \mathcal{O}(h^3) \\ u_m^{n+1} &= u_m^n + ku_t(x_m, t^n) + \frac{1}{2}k^2u_{tt}(x_m, t^n) + \mathcal{O}(k^3) \end{aligned}$$

Luego, sustituyendo estos valores y simplificando se llega a que

$$P_{h,k}u = u_t + cu_x + \frac{1}{2}ku_{tt} + \frac{1}{2}chu_{xx} + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2)$$

y, por tanto, como

$$D_{x,t}u = u_t + cu_x$$

fácilmente se observa que cuando  $h$  y  $k$  se hacen 0,  $P_{h,k}u$  tiende a  $D_{x,t}u$ . Consecuentemente, el esquema es consistente.

De una manera similar, se puede comprobar que el resto de los esquemas asociados a esta ecuación son consistentes. Sin embargo, la propiedad de consistencia no implica convergencia como se ilustra en el siguiente contraejemplo:

**Ejemplo 1.3.2.** *Considérese la ecuación de ondas de primer orden con  $c = 1$  y el mismo esquema utilizado en el anterior ejemplo, es decir,*

$$u_m^{n+1} = (1 + n_c)u_m^n - n_c u_{m+1}^n$$

Además, se escogen las siguientes condiciones iniciales:

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } -1 \leq x \leq 0 \\ 0 & \text{en el resto} \end{cases}$$

La solución de esta EDP es un desplazamiento de  $u(x, 0)$  hacia la derecha dado por  $t$ . En particular, para  $t \geq 0$  existen valores positivos de  $x$  para los que  $u(x, t)$  es distinto de cero.

Ahora bien, el esquema tendrá como datos iniciales

$$u_m^0 = \begin{cases} 1 & \text{si } -1 \leq x_m \leq 0 \\ 0 & \text{en el resto} \end{cases}$$

y como nuestra solución aproximada  $u_m^n$  depende solo de  $x_{m'}$  para  $m' \geq m$ , se concluye que

$$u_m^n = 0 \quad \text{si } x_m > 0, \quad n \geq 0$$

Luego,  $u_m^n$  no converge a  $u(x, t)$ .

Por tanto, aunque exista una relación entre la consistencia y la convergencia, estas no son equivalentes en la mayoría de los casos. Si se recuerda la definición introducida de la consistencia, podría considerarse como una convergencia puntual. Sin embargo, el propósito de un esquema es aplicarlo repetitivamente sobre unas condiciones iniciales para obtener un conjunto de aproximaciones para cada punto de la malla. Por consiguiente, resulta fundamental incorporar un nuevo concepto, la estabilidad, encargada de evaluar si la solución aproximada no experimenta un crecimiento desmedido en las sucesivas iteraciones del esquema.

### 1.3.2. Estabilidad

Hasta ahora, se ha estudiado exclusivamente la consistencia como un indicador de convergencia de un esquema. Sin embargo, como se ilustró en el ejemplo 1.3.2, esta característica no siempre garantiza la convergencia. El teorema 1.3.4 revela la existencia de otra propiedad crucial en el análisis de un esquema, que junto con la anteriormente mencionada, confirma la convergencia del esquema.

En el análisis de la estabilidad de un esquema en diferencias finitas se buscan las condiciones, en términos de parámetros del método numérico (principalmente, las longitudes de paso  $h$  y  $k$ ), que contribuyen a que la solución numérica permanezca acotada. Por consiguiente, se establece una clasificación en la que se distinguen los esquemas estables, los condicionalmente estables y los inestables.

Un esquema se dice estable si para cualquier elección de estos parámetros, la solución numérica se mantiene acotada y no experimenta un crecimiento sin límites. Si esta acotación se da solo en ciertos casos, se dirá que el esquema es condicionalmente estable y, si nunca ocurre, se dirá que el esquema es inestable.

Estas condiciones vendrán dadas por la región de estabilidad del esquema:

**Definición 1.3.3.** *Una región de estabilidad es un subconjunto cerrado del primer cuadrante de  $\mathbb{R}^2$  que tiene el origen como punto de acumulación.*

En líneas generales, esta región de estabilidad vendrá determinada por unas constantes  $C_1$  y  $C_2$  que determinarán una región del tipo  $\{(h, k) : 0 < k \leq C_1 h \leq C_2\}$ .

**Definición 1.3.4.** *Un esquema en diferencias finitas,  $P_{h,k}u = g$ , para una ecuación de primer orden es estable en una región de estabilidad  $A$  si hay un entero  $r$  tal que para cualquier tiempo positivo  $t$ , existe una constante  $C_t$  tal que*

$$h \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^n|^2 \leq C_t h \sum_{i=0}^r \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^i|^2 \quad (1.11)$$

para  $0 \leq t^n \leq t$  y  $(h, k) \in A$ .

Para explicar esta definición se introducirá la siguiente notación

$$\|v\|_h = \left( h \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_m|^2 \right)^{1/2} \quad (1.12)$$

para cualquier función  $v$  de la malla.

Esta cantidad  $\|v\|_h$  se denomina norma de  $L^2$  de la función  $v$ .

**Observación 1.3.1.** *Esta magnitud se considera un componente fundamental en el análisis numérico, y es importante destacar que también tiene una relevancia significativa como una medida física. Un ejemplo ilustrativo se presenta en [29], donde se construye un esquema numérico para las ecuaciones no lineales de aguas poco profundas.*

Mediante el uso de esta nueva norma, se puede reescribir la expresión dada en la definición de estabilidad (ecuación 1.11) como

$$\|u^n\|_h^2 \leq C_t \sum_{i=0}^r \|u^i\|_h^2$$

que equivale a

$$\|u^n\|_h \leq C_t^* \sum_{i=0}^r \|u^i\|_h \quad (1.13)$$

para cierta constante  $C_t^*$ . La estabilidad de un esquema determina si el crecimiento de la norma de la solución en cualquier tiempo  $t^n$  con  $0 \leq t^n \leq t$  está acotado. Se observa que el crecimiento es, como máximo, proporcional a la suma de las normas de la solución en los  $r + 1$  primeros pasos.

**Ejemplo 1.3.3.** *Sea el esquema en diferencias progresivas para la ecuación de ondas de primer orden (ecuación 1.3), es decir,*

$$u_m^{n+1} = (1 + cn_c)u_m^n - cn_c u_{m+1}^n$$

*y se demostrará bajo qué condiciones este esquema es estable.*

*Por simplicidad, se denotará  $a = 1 + cn_c$  y  $b = cn_c$ . Usando que  $2xy \leq x^2 + y^2$  se puede ver fácilmente que*

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^{n+1}|^2 &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} |au_m^n - bu_{m+1}^n|^2 \\ &\leq \sum_{m=-\infty}^{\infty} |a|^2 |u_m^n|^2 + 2|a||b| |u_m^n| |u_{m+1}^n| + |b|^2 |u_{m+1}^n|^2 \\ &\leq \sum_{m=-\infty}^{\infty} |a|^2 |u_m^n|^2 + |a||b| (|u_m^n|^2 + |u_{m+1}^n|^2) + |b|^2 |u_{m+1}^n|^2 \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} (|a|^2 + 2|a||b| + |b|^2) |u_m^n|^2 = (|a| + |b|)^2 \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^n|^2 \end{aligned}$$

*Luego, como*

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^{n+1}|^2 \leq (|a| + |b|)^2 \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^n|^2 \leq (|a| + |b|)^{2n} \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^0|^2$$

*se obtiene que dicho esquema será estable si se verifica que*

$$|1 + cn_c| + |cn_c| \leq 1$$

*o, dicho de otra manera, si  $-1 \leq cn_c \leq 0$ .*

Este ejemplo muestra cómo calcular una región de estabilidad de un esquema aplicando únicamente la definición, sin embargo, en la práctica, estos cálculos, aparte de ser

laboriosos, resultan complicados en algunos casos. Además, resulta interesante encontrar la región máxima de estabilidad y no únicamente un subconjunto suyo. Por estas razones, resulta imprescindible buscar un método alternativo.

## Análisis de Fourier

Una técnica comúnmente empleada para analizar la estabilidad de un esquema es el método de Von Neumann, el cual se fundamenta en el análisis de Fourier. En consecuencia, se comenzará con una breve síntesis del análisis de Fourier. Para aquel lector interesado en profundizar en los detalles, existe una amplia cantidad de literatura disponible como, por ejemplo, [32], [2], [36].

**Definición 1.3.5.** *La transformada de Fourier de una función  $u \in L^1(\mathbb{R}^n)$  es la función  $\hat{u}$  definida sobre  $\mathbb{R}^n$  por*

$$\hat{u}(\xi) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} u(x) e^{-ix\xi} dx \quad (1.14)$$

Por convergencia dominada, la función  $\hat{u}$  es continua, además, se tiene que  $\|\hat{u}\|_\infty \leq (2\pi)^{-n/2} \|u\|_1$ .

**Definición 1.3.6.** *La transformada de Fourier inversa de una función  $u \in L^1(\mathbb{R}^n)$  es la función  $\check{u}$  definida sobre  $\mathbb{R}^n$  por*

$$\check{u}(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} u(\xi) e^{ix\xi} d\xi \quad (1.15)$$

**Observación 1.3.2.** *De manera equivalente, se puede definir la transformada de cualquier función  $v$  de la malla como*

$$\hat{v}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-im\xi} v_m \quad (1.16)$$

para  $\xi \in [-\pi, \pi]$  y  $\hat{v}(-\pi) = \hat{v}(\pi)$ . Además, si el espacio entre los puntos de la malla es  $h$ , mediante un sencillo cambio de variables se puede definir la transformada de Fourier como

$$\hat{v}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-imh\xi} v_m h \quad (1.17)$$

para  $\xi \in [-\pi/h, \pi/h]$ .

Sea  $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$  el espacio generado por todas las funciones  $u \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^n)$  que para todos los multi-índices  $\alpha \geq 0$  y  $\beta \geq 0$  la función dada por  $x \mapsto x^\alpha D^\beta u(x)$  está acotada en  $\mathbb{R}^n$ . Este espacio  $\mathcal{S}$  es conocido en la literatura como el espacio de Schwartz y sus elementos como las funciones de decrecimiento rápido.

**Ejemplo 1.3.4.** *La función  $u(x) = e^{-x^2}$  es de decrecimiento rápido. De hecho, para cualquier polinomio  $p$ , se cumple que  $v(x) = p(x)e^{-x^2}$  también pertenece a  $\mathcal{S}$ .*

Se puede demostrar que el espacio  $\mathcal{S}$  es denso en  $L^p(\mathbb{R}^n)$  para  $1 \leq p < \infty$ . De hecho, este espacio de las funciones de decrecimiento rápido permite garantizar que la transformada de Fourier de un elemento de  $\mathcal{S}$  continúe perteneciendo a  $\mathcal{S}$ . Además, dado un funcional lineal  $F$  en  $\mathcal{S}$ , se puede definir otro funcional  $\hat{F}$  imponiendo que  $\hat{F}(u) = F(\hat{u})$  para todo  $u \in \mathcal{S}$ .

**Teorema 1.3.1** (Teorema de inversión de Fourier). *La transformada de Fourier es un isomorfismo de  $\mathcal{S}$  en  $\mathcal{S}$ , cuya función inversa es la transformada de Fourier inversa. Esto es, para todo  $u \in \mathcal{S}$  se tiene que  $\hat{\hat{u}} = \check{\check{u}} = u$*

*Demostración:* La demostración de este teorema se puede encontrar en el teorema 3.4.1 de [32] y se basa en una consecuencia directa de varios resultados omitidos en este trabajo debido a su extensión, pero que pueden encontrarse en este mismo artículo. ■

**Observación 1.3.3.** *Este teorema se puede adaptar al caso de las funciones de la malla. Se obtiene que la fórmula de inversión para una función  $v$  de la malla viene dada por*

$$v_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{im\xi} \hat{v}(\xi) d\xi \quad (1.18)$$

y si los puntos de la malla son equiespaciados de longitud  $h$ , se obtiene que

$$v_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{imh\xi} \hat{v}(\xi) d\xi \quad (1.19)$$

Un operador de bastante importancia dentro del análisis funcional y que servirá como preámbulo al siguiente teorema, es el producto de convolución de dos funciones  $u$  y  $v$ , que se define como

$$u * v(x) = \int_{\mathbb{R}} u(x - \xi) v(\xi) d\xi \quad (1.20)$$

cuando esta integral exista.

**Observación 1.3.4.** *Se puede demostrar que si  $u \in L^p(\mathbb{R}^n)$  y  $v \in L^q(\mathbb{R}^n)$ , entonces la integral 1.20 converge absolutamente por la desigualdad de Hölder. Además,  $u * v$  es uniformemente continuo en estos casos (véase [2]).*

**Proposición 1.3.1.** *Sean  $u$  y  $v$  dos funciones de  $L^1(\mathbb{R}^n)$ , entonces se verifica:*

1.  $\widehat{u * v} = (2\pi)^{n/2} \hat{u} \hat{v}$ .
2. Si  $\tilde{u}(x) = \overline{u(-x)}$ , entonces  $\hat{\tilde{u}} = \bar{\hat{u}}$  y  $\widehat{u * \tilde{u}} = (2\pi)^{n/2} |\hat{u}|^2$ . Además, si  $u \in \mathcal{S}$ , entonces  $u * \tilde{u}$  y  $|\hat{u}|^2$  pertenecen a  $\mathcal{S}$ .

La demostración de esta proposición consiste en un mero cálculo y aplicando el teorema de inversión de Fourier sobre  $u * \tilde{u}$  en el punto  $x = 0$  se llega al siguiente resultado:

**Teorema 1.3.2** (Identidad de Parseval). *Sea  $u \in \mathcal{S}$  equipado con la norma  $\|\cdot\|$  de  $L^2(\mathbb{R}^n)$ , entonces se verifica*

$$\|\hat{u}\|_2^2 = \|u\|_2^2 \quad (1.21)$$

Por consiguiente, la transformada de Fourier es un isomorfismo isométrico de  $\mathcal{S}$ . Asimismo, como  $\mathcal{S}$  es denso en  $L^2(\mathbb{R}^n)$ , podemos extender esta isometría a las funciones de  $L^2(\mathbb{R}^n)$ .

**Observación 1.3.5.** *Se puede demostrar que si  $v$  es una función de la malla la identidad de Parseval se continúa verificando, obteniéndose así con la norma introducida en la ecuación 1.12 que*

$$\|\hat{v}\|_h^2 = \|v\|_h^2 \quad (1.22)$$

## Análisis de Von Neumann

Conocidos ya los resultados del análisis de Fourier requeridos para este trabajo, a continuación, se procederá a introducir el análisis de Von Neumann mediante un ejemplo a título ilustrativo:

**Ejemplo 1.3.5.** *Sea el esquema en diferencias progresivas de la ecuación de ondas de primer orden (ecuación 1.3) y aplicando sobre él la fórmula de inversión de Fourier para  $u^n$  (observación 1.3.3) se tiene que*

$$u_m^n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{imh\xi} \hat{u}^n(\xi) d\xi$$

y, por tanto, sustituyendo esta expresión en el esquema se obtiene que

$$u_m^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{imh\xi} [(1 + cn_c) - cn_c e^{ih\xi}] \hat{u}^n(\xi) d\xi$$

Si se compara esto con la fórmula de inversión que se obtendría para  $u^{n+1}$ , es decir,

$$u_m^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{imh\xi} \hat{u}^{n+1}(\xi) d\xi$$

y usando que la transformada de Fourier es única, se llega a que

$$\hat{u}^{n+1}(\xi) = [(1 + cn_c) - cn_c e^{ih\xi}] \hat{u}^n(\xi) = \phi(h\xi) \hat{u}^n(\xi)$$

Esta función  $\phi(h\xi)$  recibe el nombre de factor de amplificación debido a que su magnitud es la cantidad que la amplitud de cada frecuencia en la solución, dada por  $\hat{u}^n(\xi)$ , se amplifica al avanzar la solución un instante de tiempo. Se tiene por tanto que

$$\hat{u}^n(\xi) = \phi^n(h\xi) \hat{u}^0(\xi) \quad (1.23)$$

y gracias a la identidad de Parseval (teorema 1.3.2) se deduce

$$\begin{aligned} h \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^n|^2 &= \int_{-\pi/h}^{\pi/h} |\hat{u}^n(\xi)|^2 d\xi \\ &= \int_{-\pi/h}^{\pi/h} |\phi(h\xi)|^{2n} |\hat{u}^0(\xi)|^2 d\xi \end{aligned}$$

Seguindo la expresión 1.11 de la definición de estabilidad, el esquema será estable para  $r = 0$ , si  $|\phi(h\xi)|^{2n}$  está acotado. Denotando  $\theta = h\xi$ , se observa que

$$\phi(\theta) = (1 + cn_c) - cn_c e^{i\theta} = (1 + cn_c) - cn_c \cos \theta - icn_c \sin \theta$$

Luego, usando identidades trigonométricas se obtiene que

$$\begin{aligned} |\phi(\theta)|^2 &= (1 + cn_c - cn_c \cos \theta)^2 + c^2 n_c^2 \sin^2 \theta \\ &= (1 + 2cn_c \sin^2(\theta/2))^2 + 4c^2 n_c^2 \sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2) \\ &= 1 + 4cn_c \sin^2(\theta/2) + 4c^2 n_c^2 \sin^4(\theta/2) + 4c^2 n_c^2 \sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2) \\ &= 1 + 4cn_c \sin^2(\theta/2) + 4c^2 n_c^2 \sin^2(\theta/2) \\ &= 1 + 4cn_c(1 + cn_c) \sin^2(\theta/2) \end{aligned}$$

y se puede ver que esta expresión está acotada cuando  $-1 \leq cn_c \leq 0$ . Por tanto, se ha llegado al mismo resultado que el obtenido en el ejemplo 1.3.3.

En este último ejemplo, el factor de amplificación depende únicamente de  $\theta$ , sin embargo, de forma general  $\phi$  dependerá de  $k$  y de  $h$ . Además, se ha definido la estabilidad para ecuaciones en derivadas parciales cuya diferenciación respecto del tiempo es de primer orden y, para el estudio de las ecuaciones de este trabajo, será necesario poder determinar la estabilidad de EDPs de segundo orden en la variable temporal. Para generalizar al resto de ecuaciones, se debe permitir que la magnitud del factor de amplificación sobrepase 1 por una pequeña cantidad.

**Teorema 1.3.3.** *Un esquema en diferencias finitas de un solo paso es estable en una región  $A$  si y solo si existe una constante  $C$  (independiente de  $\theta$ ,  $k$  y  $h$ ) tal que*

$$|\phi(\theta, k, h)| \leq 1 + Ck \quad (1.24)$$

con  $(h, k) \in A$ . Si  $\phi(\theta, k, h)$  es independiente de  $h$  y  $k$ , la condición de estabilidad puede ser reemplazada por

$$|\phi(\theta)| \leq 1$$

Demostración: Aplicando la identidad de Parseval y por la definición de  $\phi$  se llega a que

$$\|u^n\|_h^2 = \int_{-\pi/h}^{\pi/h} |\phi(h\xi, h, k)|^{2n} |\hat{u}^0(\xi)|^2 d\xi$$

Si  $|\phi(\theta, k, h)| \leq 1 + Ck$  para  $(h, k) \in A$ , se deduce que

$$\|u^n\|_h^2 \leq \int_{-\pi/h}^{\pi/h} (1 + Ck)^{2n} |\hat{u}^0(\xi)|^2 d\xi = (1 + Ck)^{2n} \|u^0\|_h^2$$

Luego, siguiendo la definición de estabilidad, para un tiempo positivo  $t$ , se tiene que  $n \leq t/k$  y, por tanto,

$$(1 + Ck)^n \leq (1 + Ck)^{t/k} \leq e^{Ct}$$

Como consecuencia,  $\|u^n\|_h \leq e^{Ct} \|u^0\|_h$  y por consiguiente, el esquema es estable en  $A$ .

A continuación, se considera el recíproco. Se supondrá que no se verifica la ecuación 1.24 y se llegará que el esquema no es estable en  $A$ .

Si para una constante  $K > 0$  existe un intervalo  $[\theta_1, \theta_2] \ni \theta$  y  $(h, k) \in A$  con  $|\phi(\theta, h, k)| > 1 + Kk$ , entonces se puede construir una función  $u_m^0$  como

$$\hat{u}^0(\xi) = \begin{cases} 0 & \text{si } h\xi \notin [\theta_1, \theta_2] \\ \sqrt{h(\theta_2 - \theta_1)^{-1}} & \text{si } h\xi \in [\theta_1, \theta_2] \end{cases}$$

Obsérvese que  $\|\hat{u}^0\|_h = 1$ . Por tanto,

$$\begin{aligned} \|u^n\|_h^2 &= \int_{-\pi/h}^{\pi/h} |\phi(h\xi, h, k)|^{2n} |\hat{u}^0(\xi)|^2 d\xi \\ &= \int_{\theta_1/h}^{\theta_2/h} |\phi(h\xi, h, k)|^{2n} \frac{h}{\theta_2 - \theta_1} d\xi \\ &\geq (1 + Kk)^{2n} \\ &\geq \frac{1}{2} e^{2Kt} \|u^0\|_h^2 \end{aligned}$$

para  $n$  cercanos a  $t/k$ . Lo que muestra que el esquema es inestable si  $K$  es lo suficientemente grande, ya que no existe una región en la que  $\phi(\theta, h, k)$  este acotado. ■

Con lo cual, bastará con conocer el factor de amplificación de un esquema para obtener su región de estabilidad. Asimismo, tampoco será necesario realizar los cálculos del ejemplo 1.3.5 para obtener dicho factor. Simplemente, será suficiente con reemplazar  $u_m^n$  por  $\phi^n e^{im\theta}$  para cada valor  $n$  y  $m$  y resolver esta ecuación para obtener el factor de amplificación.

**Ejemplo 1.3.6.** *Considérese el esquema de la ecuación 1.5, es decir,*

$$\frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{k} + c \frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} = 0$$

Entonces, reemplazando  $u_m^n$  por  $\phi^n e^{im\theta}$  se obtiene

$$\frac{\phi^{n+1} e^{im\theta} - \phi^n e^{im\theta}}{k} + c \frac{\phi^n e^{i(m+1)\theta} - \phi^n e^{i(m-1)\theta}}{2h} = \phi^n e^{im\theta} \left( \frac{\phi - 1}{k} + c \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2h} \right) = 0$$

con lo que se obtiene como factor de amplificación

$$\phi = 1 - icn_c \sin \theta$$

Luego, si  $n_c$  es constante,  $\phi$  es independiente de  $h$  y de  $k$  y

$$|\phi(\theta)|^2 = 1 + c^2 n_c^2 \sin^2 \theta$$

Como  $|\phi(\theta)| > 1$  para  $\theta$  distinto de 0 y de  $\pi$ , este esquema es inestable.

### 1.3.3. Ampliación a esquemas multipaso y EDPs de mayor orden

El objetivo final de este capítulo será extender estas ideas de convergencia para esquemas unipaso de una ecuación con derivadas de primer orden respecto de  $t$  a esquemas multipaso y con una diferenciación de orden superior. El proceso para llegar a estos resultados es bastante extenso y no se detallará en su totalidad, sin embargo, el lector interesado puede encontrarlo en [36].

En primer lugar, resulta necesario introducir brevemente los operadores de truncado y de interpolación. Para ello, recuérdese que cualquier  $u \in L^2(\mathbb{R})$  verificaba la conocida fórmula de inversión:

$$u(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix\xi} \hat{u}(\xi) d\xi$$

y se podía obtener una expresión similar sobre cada función de la malla  $v$ :

$$v_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{imh\xi} \hat{v}(\xi) d\xi$$

Luego, se puede definir de manera natural un operador que mande las funciones de  $L^2(\mathbb{R})$  a las funciones  $L^2$  de la malla. A cada función  $u \in L^2(\mathbb{R})$  se le asigna el valor

$$\mathcal{T}u_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{imh\xi} \hat{u}(\xi) d\xi$$

para cada punto  $mh$  de la malla. Este operador  $\mathcal{T}$  se denomina operador de truncado. Una propiedad destacada del operador de truncado es que mantiene invariante la transformada de Fourier, es decir,

$$\widehat{\mathcal{T}u}(\xi) = \hat{u}(\xi)$$

para  $|\xi| \leq \pi/h$ .

De forma análoga, se puede encontrar un operador que mande las funciones  $L^2$  de la malla a las funciones  $L^2(\mathbb{R})$ , que viene definido para cada función  $v$  de la malla y cada punto  $x \in \mathbb{R}$  por

$$\mathcal{I}v(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi/h}^{\pi/h} e^{ix\xi} \hat{v}(\xi) d\xi$$

Este operador se denomina operador de interpolación y su transformada de Fourier viene dada por

$$\widehat{\mathcal{I}v}(\xi) = \begin{cases} \hat{v}(\xi) & \text{si } |\xi| \leq \pi/h \\ 0 & \text{si } |\xi| > \pi/h \end{cases}$$

Gracias a estos operadores se puede obtener una definición de la convergencia más generalizada:

**Definición 1.3.7.** *Un esquema en diferencias finitas que aproxima el problema homogéneo de valor inicial para una ecuación en derivadas parciales se dice convergente si  $\mathcal{I}u^n$  converge a  $u(\cdot, t^n)$  en  $L^2(\mathbb{R})$ , para cualquier solución  $u(x, t)$  de la ecuación diferencial y cualquier conjunto de soluciones del esquema  $u_m^n$ , que dependen de  $h$  y  $k$ , para las cuales  $Su^0$  converge a  $u(\cdot, 0)$  en  $L^2(\mathbb{R})$  cuando  $h$  y  $k$  tienden a 0 en la región de estabilidad  $A$ .*

Con ello, se introduce el ya mencionado teorema que permite desglosar el análisis de la convergencia de un esquema. Su demostración no se incluirá en esta memoria debido a su gran extensión, sin embargo, el lector interesado puede encontrar su demostración detallada en las secciones 10.5 y 10.6 de [36].

**Teorema 1.3.4** (Teorema de Equivalencia de Lax-Richtmyer). *Un esquema en diferencias finitas consistente para una ecuación en derivadas parciales cuyo problema de valor inicial está bien planteado es convergente si y solo si es estable.*

Conociendo este teorema se puede proceder a la generalización de la consistencia y la estabilidad que traía como objetivo esta última parte del capítulo.

Los resultados vistos para la consistencia de un esquema unipaso seguirán valiendo si se consideran esquemas multipaso construidos sobre ecuaciones con derivadas de orden superior para  $t$ . No obstante, el estudio de la estabilidad de este tipo de esquemas varía ligeramente.

Se empezará considerando un esquema multipaso  $P_{h,k}u = g$  con derivada de primer orden en el parámetro  $t$ . Su estabilidad viene dada por las raíces del polinomio de amplificación:

$$\psi(\phi, \theta) = k p_{h,k} \left( \frac{\ln \phi}{k}, \theta h^{-1} \right)$$

Este polinomio puede ser obtenido imponiendo que

$$u_m^n = \phi^n e^{im\theta}$$

es solución del esquema con  $g = 0$ . Si  $s + 1$  es el número de pasos del esquema, entonces el grado de  $\psi(\phi, \theta)$  es  $s$ .

**Observación 1.3.6.** *Este polinomio de amplificación es una generalización de lo estudiado anteriormente, ya que  $\psi(\phi, \theta)$  sería un polinomio lineal en  $\phi$  y la solución general de la ecuación homogénea sería equivalente a la dada en 1.23.*

Por tanto, supóngase que  $s > 1$ . Si  $\psi$  tiene raíces distintas,  $\phi_j(\theta)$ , entonces la solución

viene dada por

$$\hat{u}^n(\xi) = \sum_j^s \phi_j(h\xi)^n A_j(\xi)$$

en donde los coeficientes  $A_j(\xi)$  vienen dados por los niveles de tiempo para  $n$  desde 0 hasta  $s - 1$ . Si las raíces  $\phi_j(\theta)$  se encuentran alejadas unas de otras, independientemente de  $k$  y de  $h$ , entonces los valores de  $A_j(\xi)$  están acotados por la suma

$$K \sum_{i=0}^{s-1} |u^i(\xi)|$$

para alguna constante  $K$ . Se demuestra fácilmente que la condición de estabilidad es

$$|\phi_j(h\xi)| \leq 1 + Ck \quad \forall i \in \{1, \dots, s\}$$

con  $C$  una constante. En los casos donde  $\psi(\phi, \theta)$  sea independiente de  $k$  y de  $h$  se debe cumplir una restricción de lo anterior:

$$|\phi_j(h\xi)| \leq 1 \quad \forall i \in \{1, \dots, s\} \quad (1.25)$$

Considérese ahora que el polinomio de amplificación tiene raíces múltiples y hágase la premisa que la condición 1.25 continúa verificándose. Si  $\phi_1(\theta_0)$  es una raíz múltiple del polinomio de amplificación en  $\theta_0$ , entonces la función

$$\hat{u}_m^n = [\phi_1(\theta_0)^n B_0 + n\phi_1(\theta_0)^{n-1} B_1] e^{im\theta_0}$$

es una solución de la ecuación en diferencias para cualquier valor de los coeficientes  $B_0$  y  $B_1$ . Si  $B_0 = 0$ , entonces la magnitud de  $\hat{u}_m^n$  es

$$n|\phi_1(\theta_0)|^{n-1}|B_1|$$

Si  $|\phi_1(\theta_0)| \leq 1$ , entonces esta cantidad está acotada por un múltiplo de

$$(|\phi_1(\theta_0)| \ln |\phi_1(\theta_0)|^{-1})^{-1} |B_1|$$

Sin embargo, si  $|\phi_1(\theta_0)| = 1$ , entonces esta cantidad no puede estar acotada independientemente de  $n$ . Como en la demostración del teorema 1.3.3, se puede construir una solución para que el esquema en diferencias finitas no esté acotado dando lugar a los siguientes teoremas:

**Teorema 1.3.5.** *Si el polinomio de amplificación  $\psi(\phi, \theta)$  es explícitamente independiente de  $h$  y  $k$ , entonces la condición necesaria y suficiente para que el esquema en diferencias finitas sea estable es que para todas las raíces  $\phi_j(\theta)$  se verifique*

1.  $|\phi_j(\theta)| \leq 1$
2. Si  $|\phi_j(\theta)| = 1$ , entonces  $\phi_j(\theta)$  debe ser una raíz simple.

**Teorema 1.3.6.** *Un esquema en diferencias finitas para una ecuación escalar es estable*

si y solo si todas las raíces,  $\phi_j(\theta)$ , del polinomio de amplificación  $\psi(\theta, h, k)$  verifican las siguientes condiciones:

1. Existe una constante  $C$  tal que  $|\phi_j| \leq 1 + Ck$ .
2. Existen dos constantes positivas  $C_0$  y  $C_1$  tales que si  $C_0 \leq |\phi_j| \leq 1 + Ck$ , entonces  $\phi_j$  es una raíz simple, y para cualquier otra raíz  $\phi_i$  la relación

$$|\phi_j - \phi_i| \geq C_1$$

se mantiene para  $h$  y  $k$  lo suficientemente pequeños.

De manera similar, se puede estudiar la estabilidad en esquemas con una diferenciación de mayor valor respecto del parámetro  $t$ . En estos casos, la definición de estabilidad vendrá sustituida por la siguiente:

**Definición 1.3.8.** *Un esquema en diferencias finitas  $P_{h,k}u_m^n = g$  para una ecuación de segundo orden en  $t$  es estable en una región de estabilidad  $A$  si hay un número entero  $r$  tal que para cualquier tiempo positivo  $t$ , existe una constante  $C_t$  tal que*

$$h \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^n|^2 \leq (1 + n^2)C_t h \sum_{i=0}^r \sum_{m=-\infty}^{\infty} |u_m^i|^2$$

para todas las soluciones  $u_m^n$  y todo  $0 \leq t^n \leq t$  con  $(h, k) \in A$ .

Obsérvese que, respecto a la anterior definición, aparece un nuevo factor  $(1 + n^2)$  que refleja este crecimiento en la variable  $t$ . De forma análoga, el teorema que permitía relacionar el polinomio de amplificación con el estudio de la estabilidad es reemplazado por:

**Teorema 1.3.7.** *Si el polinomio de amplificación  $\psi(\phi, \theta)$  para una ecuación de segundo orden respecto de  $t$  es explícitamente independiente de  $h$  y  $k$ , entonces la condición necesaria y suficiente para que el esquema en diferencias finitas sea estable es que para todas las raíces  $\phi_j(\theta)$  se verifique*

1.  $|\phi_j(\theta)| \leq 1$
2. Si  $|\phi_j(\theta)| = 1$ , entonces  $\phi_j(\theta)$  debe ser como máximo una raíz doble.

## 1.4. Condiciones de contorno absorbentes

En la modelización de la mayoría de los problemas basados en EDPs es crucial introducir unas condiciones de frontera para limitar el área de computación. Por eso mismo conviene dedicar una sección al estudio de estas condiciones. Dado que el interés de esta memoria consiste en el estudio de las colisiones de defectos topológicos, las condiciones de frontera comúnmente encontradas en la literatura de este tema son las de tipo absorbente.

Se comenzará este capítulo analizando uno de los casos más simples, la ecuación de ondas de segundo orden, y, sin ánimo de extenderse demasiado, se generalizará a

las ecuaciones que aparecen en el último capítulo. Sin embargo, se puede encontrar una descripción de este método con todo lujo de detalles y adaptada al caso bidimensional en [14].

Considérese por tanto la ecuación de ondas de segundo orden

$$u_{tt} - cu_{xx} = \left( \frac{\partial}{\partial t} - \sqrt{c} \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial}{\partial t} + \sqrt{c} \frac{\partial}{\partial x} \right) u = 0$$

Como los dos operadores diferenciales que definen esta ecuación conmutan entre sí, las soluciones de las ecuaciones

$$u_t + \sqrt{c}u_x = 0 \quad (1.26)$$

$$u_t - \sqrt{c}u_x = 0 \quad (1.27)$$

son también soluciones de la ecuación de ondas de segundo orden. Estas ecuaciones se conocen como ecuaciones de advección. Nótese que, a excepción de los casos triviales, las soluciones de la ecuación de ondas serán solución de una de las ecuaciones, pero nunca de las dos. De hecho, los campos pueden ser una solución a la ecuación de ondas de segundo orden y, sin embargo, no ser solución de ninguna de las ecuaciones de advección.

Por ejemplo, una posible solución de la ecuación 1.26 viene dada por

$$u(x, t) = f(x - \sqrt{c}t) = x - \sqrt{c}t$$

que representa una perturbación que se propaga sin distorsión a lo largo del eje X hacia la derecha con velocidad  $c$ . Además, destacar que dicha expresión es solución de la ecuación de ondas de segundo orden, pero no de la ecuación 1.27. Este tipo de soluciones serán de cierto interés más adelante.

Sean  $x = -s$  y  $x = s$  con  $s > 0$  las fronteras de nuestro dominio. Si la solución se desplaza a la derecha, cuando llegue al final de la malla, los campos deberían proseguir hacia la derecha y, por tanto, continuar verificando la ecuación 1.26. Para solventar este problema, se calculará el promedio en el tiempo o en el espacio. Por ejemplo, para calcular la aproximación de  $u_{s-1/2}^n$ , se utilizará la media  $(u_{s-1}^n + u_s^n)/2$ . De modo similar,  $(u_{s-1}^{n+1} + u_s^{n+1})/2$  aproximará  $u_{s-1/2}^{n+1}$ . Luego, se puede aproximar la derivada temporal mediante la siguiente diferencia finita

$$u_t|_{s-1/2, n+1/2} \simeq \frac{\frac{u_{s-1}^{n+1} + u_s^{n+1}}{2} - \frac{u_{s-1}^n + u_s^n}{2}}{k} \quad (1.28)$$

y de manera análoga se obtiene

$$u_x|_{s-1/2, n+1/2} \simeq \frac{\frac{u_s^{n+1} + u_s^n}{2} - \frac{u_{s-1}^{n+1} + u_{s-1}^n}{2}}{h} \quad (1.29)$$

Entonces, se puede obtener el siguiente esquema en diferencias finitas para la ecuación de

advección

$$\frac{\frac{u_{s-1}^{n+1} + u_s^{n+1}}{2} - \frac{u_{s-1}^n + u_s^n}{2}}{k} + \sqrt{c} \frac{\frac{u_s^{n+1} + u_s^n}{2} - \frac{u_{s-1}^{n+1} + u_{s-1}^n}{2}}{h} = 0 \quad (1.30)$$

o equivalentemente

$$u_s^{n+1} = u_{s-1}^n + \frac{\sqrt{cn_c} - 1}{\sqrt{cn_c} + 1} (u_{s-1}^{n+1} - u_s^n) \quad (1.31)$$

Por otro lado, recurriendo a la ecuación de advección de signo opuesto, se puede llegar al siguiente esquema para los campos que se desplacen hacia la izquierda

$$u_{-s}^{n+1} = u_{-s+1}^n + \frac{\sqrt{cn_c} - 1}{\sqrt{cn_c} + 1} (u_{-s+1}^{n+1} - u_{-s}^n) \quad (1.32)$$

Estas dos últimas ecuaciones son conocidas como las condiciones de contorno absorbentes de primer orden.

**Observación 1.4.1.** *Existen unas condiciones de contorno absorbentes de segundo orden. La forma de conseguir las consiste en aplicar dos veces el operador de advección y con ello obtener unas ecuaciones de mayor precisión que dependan de tres nodos. En el capítulo 6 de [33] aparece detallado su cálculo para el caso de las ecuaciones de ondas de un campo eléctrico en una dimensión. Notése que mediante un sencillo cambio de variables estas ecuaciones se pueden adaptar al caso estudiado en este capítulo. Por último, mencionar que se pueden llegar a construir unas condiciones de contorno absorbentes para ecuaciones de ondas electromagnéticas tridimensionales cuyo procedimiento aparece detallado en [26].*

# Capítulo 2

## Solitones: EDPs no lineales

En este segundo capítulo, se introducirá una clase de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que se caracterizan por un equilibrio entre los términos lineales (normalmente dispersivos) y no lineales de la ecuación. Habitualmente, este tipo de ecuaciones van a permitir la existencia de una solución de onda viajera que es lo que se denomina ondas solitarias o solitones.

Son muchas las definiciones que se encuentran en la literatura acerca de la idea de solitón que dependerán del enfoque del estudio realizado. Por lo general, se suele considerar un solitón como una solución de tipo onda solitaria de una ecuación no lineal, esto es, una onda viajera que sigue la expresión

$$u(x, t) = f(x - ct)$$

siendo  $c \in \mathbb{R}$  una constante y  $f$  una función diferenciable que rápidamente tiende a cero cuando se aproxima al infinito. Antes de introducir ejemplos que engloben este tipo de soluciones, se discutirá de manera concisa el trasfondo histórico y los orígenes de la rama tanto física como matemática encargada de su investigación.

### 2.1. Orígenes de la Teoría de Solitones

Los inicios de la Teoría de Solitones datan del año 1834 cuando el ingeniero naval y naturalista John Scott Russell, mientras cabalgaba, avistó lo que él denominó una “Onda de Traslación” en un canal cercano a la ciudad de Edimburgo. Este informe, disponible en [31], contemplaba lo que a día de hoy se conoce como solitón.



Recreación del solitón el miércoles 12 de Julio de 1995, cuando un grupo de científicos que participaban en una conferencia sobre ondas no lineales en física y biología, en la Heriot-Watt University, se reunió en el Union Canal, cerca de Edimburgo, para reproducir el primer "avistamiento" de una onda solitaria en dicho canal.

Este avistamiento motivó al propio J. Scott Russell a seguir investigando sobre este tipo de ondas dentro de un tanque diseñado por él mismo, con lo que se llegó a dos descubrimientos relevantes:

- La existencia de una onda solitaria, es decir, una ola larga y poco profunda que se mantenía indefinidamente.
- Para estas olas, Russell demostró que su velocidad,  $c$ , venia determinada por

$$c = \sqrt{g(h + \eta)}$$

donde  $\eta$  es la amplitud de la ola medida desde el plano del agua,  $h$  es la profundidad del canal y  $g$  la aceleración de la gravedad. Nótese que en los experimentos de Russell se verificaba que  $\eta/h < 1$ .

En base a estas observaciones, sugirió el hallazgo de un tipo general de soluciones de la Hidrodinámica que denominaría más adelante "ondas solitarias".

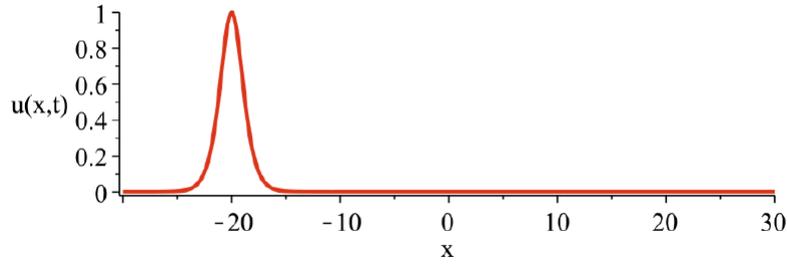
Por desgracia, no sería hasta 1895 en el artículo redactado por D.J. Korteweg y G. de Vries, [24], cuando se acepta finalmente la existencia de este tipo de soluciones. Estos autores propusieron la denominada ecuación de Korteweg-de Vries (KdV):

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0 \tag{2.1}$$

cuya solución de tipo "onda solitaria" es

$$u(x, t) = 2\kappa^2 \operatorname{sech}^2[\kappa(x - 4\kappa^2 t - x_0)]$$

siendo  $\kappa$  y  $x_0$  constantes. Es el actualmente conocido como solitón de Russell o solución de un solitón de la ecuación KdV.



**Figura 2.1:** Solución ecuación KdV representada a tiempo  $t$  fijo únicamente como función de la variable espacial  $x$ .

**Observación 2.1.1.** Esta solución se puede obtener de una manera muy sencilla. Se busca una solución de la forma  $u(x,t) = f(x - ct)$ , luego sustituyendo en la ecuación 2.1 se obtiene

$$-cf' + 6ff' + f''' = 0$$

donde el superíndice  $'$  significa obviamente diferenciación respecto del argumento  $x - ct$ . Imponiendo la condición de que  $f, f', f''' \rightarrow 0$  cuando  $|x| \rightarrow \infty$  e integrando se obtiene

$$(f')^2 = cf^2 - 2f^3$$

que es una ecuación de Riccati que resolviendo explícitamente se llega al siguiente resultado

$$u(x,t) = f(x - ct) = \frac{c}{2} \operatorname{sech}^2 \left[ \frac{\sqrt{c}(x - ct - x_0)}{2} \right]$$

donde el cambio de variable que dará la solución anterior es evidente.

Gracias a este contexto histórico se puede llegar a dar la primera definición precisa de onda solitaria:

**Definición 2.1.1.** Sea una EDP de la forma  $F(x,t,u) = 0$  con variable dependiente  $u : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  y variables independientes  $x, t \in \mathbb{R}$ . Una solución “onda solitaria” de  $F$  es una solución de onda viajera de expresión:

$$u(x,t) = f(x - ct) = f(z)$$

para cierta velocidad  $c$ , y que evoluciona desde un estado asintótico constante en  $z \rightarrow -\infty$  hasta otro estado asintótico constante en  $z \rightarrow \infty$ .

Después de la publicación de [24], el interés por los solitones fue disminuyendo hasta 70 años después. Gracias a la construcción de una nueva computadora, MANIAC I, encargada de realizar los cálculos correspondientes al origen de la primera bomba de hidrógeno, se incrementó la curiosidad por este tipo de ondas. Enrico Fermi y Stanislaw Ulam decidieron probar esta máquina mediante un sencillo problema con solución en principio conocida, pero que englobase gran cantidad de cálculos. El problema consistía un conjunto de 32 masas puntuales iguales unidas mediante un resorte a lo largo de una línea recta sujeto a una iteración no lineal y el resultado, conocido como experimento de Fermi-Pasta-Ulam, difirió completamente de lo esperado. Se suponía que la energía

del problema resultase equidistribuida entre los diferentes nodos de vibración del sistema (lo que se conoce como termalización), sin embargo, la energía aparentemente circulaba pasando en su totalidad entre todos ellos y, al cabo de cierto tiempo, dicha energía volvía a estar concentrada en el primero de ellos con una exactitud del 99 %.

La correcta interpretación del problema vendría más adelante de la mano de Zabusky y Kruskal [27]. Estos identifican las ecuaciones del problema en términos de la ecuación KdV de manera que el comportamiento observado para la energía en el experimento numérico era equivalente a la solución solitón de Russell en el contexto de la hidrodinámica. En este trabajo se introdujo el término de “solitones” o “pulsos de onda solitaria” por primera vez:

**Definición 2.1.2.** *Un solitón es una onda solitaria que preserva asintóticamente su forma y su velocidad bajo interacciones no lineales con otras ondas solitarias, o de manera más general, con otra perturbación localizada arbitraria.*

En los años siguientes se estudiaron este tipo de soluciones en diferentes áreas. En particular, en la Teoría de Campos surgieron muchas e interesantes aplicaciones.

## 2.2. Solitones en Teorías de Campos

Habiendo llegado a una definición válida del concepto de solitón, esta sección se enfocará en presentar de forma concisa las nociones básicas de la Teoría de Solitones que se necesitarán en los posteriores capítulos. Se dará inicio con una breve introducción a la Mecánica Clásica, ver, por ejemplo, [40], [6] ó [17]. A continuación, se discutirán las analogías entre el formalismo lagrangiano y la teoría de campos relativista mediante los ejemplos tradicionales. Utilizando estos ejemplos a modo ilustrativo, se estudiarán los aspectos básicos de la teoría de campos relativista en un espacio-tiempo (1+1)-dimensional dotado con la métrica de Minkowski.

### 2.2.1. Formalismo lagrangiano

En la Mecánica Newtoniana, el movimiento de una partícula de masa  $m$  en  $\mathbb{R}^n$  bajo un potencial  $V(\mathbf{q})$  en dicho espacio viene descrito por el sistema de e.d.o. de segundo orden:

$$m\ddot{q}_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.2)$$

donde  $\cdot$  denota la derivada respecto del tiempo. El sistema 2.2 no es más que la 2ª ley de Newton para un sistema conservativo en  $\mathbb{R}^n$ .

Desde un punto de vista más general, consideremos una variedad Riemanniana  $n$ -dimensional  $M$ , y un sistema de coordenadas locales  $q = (q_1, \dots, q_n)$ . El principio de mínima acción o principio de Hamilton establece que la evolución del sistema, desde una posición inicial  $q(t_1)$  hasta  $q(t_2)$  viene dada por las trayectorias para las cuales el funcional

de acción:

$$S[\mathbf{q}] = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, s) ds \quad (2.3)$$

es estacionaria.  $\mathcal{L}$  es el lagrangiano del sistema, una función diferenciable del fibrado tangente  $TM$  a la variedad.

En el caso previo, donde  $M = \mathbb{R}^n$ , el lagrangiano viene dado por:

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = T - V = \frac{1}{2}m \sum_{i,j} g_{ij} \dot{q}_i(t) \dot{q}_j(t) - V(\mathbf{q}(t)) \quad (2.4)$$

siendo  $g_{ij}$  la métrica riemanniana de  $M$ , que para este caso es  $g_{ij} = \delta_{ij}$ , es decir, la métrica euclídea en  $\mathbb{R}^n$ . Por simplicidad nos restringiremos en lo que sigue a este caso.

Luego, la trayectoria seguida será aquella con acción estacionaria, es decir,  $\delta S = 0$ , que conduce a las ecuaciones de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}, \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \quad (2.5)$$

**Observación 2.2.1.** *Un cálculo sencillo muestra que sustituyendo la expresión del lagrangiano 2.4 en las ecuaciones de Euler-Lagrange 2.5 se obtienen las ecuaciones de Newton del sistema 2.2.*

La energía total del sistema viene determinada por la función hamiltoniana

$$H = 2T - \mathcal{L} = T + V = \frac{1}{2}m \sum_i \dot{q}_i^2 + V(\mathbf{q}(t)) \quad (2.6)$$

La transformación de Legendre [37, 11] permite reescribir las ecuaciones de movimiento como un sistema hamiltoniano definido por

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i \in \{1, \dots, n\} \quad (2.7)$$

considerando el vector de momento  $\mathbf{p} = (p_i)$ ,

$$p_i = m\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.8)$$

y como consecuencia directa de definir la energía total como

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (2.9)$$

**Observación 2.2.2.** *Con estas definiciones*

$$\frac{\partial H}{\partial \dot{q}_i} = p_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad (2.10)$$

y, por tanto, si  $F$  es una función arbitraria que depende de  $\mathbf{p}, \mathbf{q}$ , se tiene que

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (2.11)$$

Esta última observación incita a dar una definición del paréntesis de Poisson de dos funciones  $F, G$

$$\{F, G\} = \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} \quad (2.12)$$

que permite reescribir la última expresión como

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{H, F\} \quad (2.13)$$

y si el sistema es conservativo, se tiene que  $\dot{F} = \{H, F\}$ .

**Observación 2.2.3.** *Para definir con rigor el paréntesis de Poisson es adecuado recurrir al estudio de variedades simplécticas (variedades diferenciables dotadas de una dos-forma diferencial cerrada y no degenerada). Si se define una variedad de Poisson como una variedad diferenciable con una operación bilineal sobre sus funciones, el paréntesis de Poisson, que verifica la antisimetría, la identidad de Jacobi y la regla de Leibniz, se puede llegar a demostrar que toda variedad simpléctica es una variedad de Poisson y que, para cierto sistema de coordenadas, el paréntesis de Poisson queda expresado según esta última definición [12, 39].*

**Observación 2.2.4.** *Utilizando el paréntesis de Poisson se puede llegar a redefinir las ecuaciones de movimiento como solución del sistema*

$$\frac{dq_i}{dt} = \{H, q_i\}, \quad \frac{dp_i}{dt} = \{H, p_i\}, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.14)$$

de donde se deduce que para toda función  $F$  diferenciable que satisfaga  $\{H, F\} = 0$  es una constante de movimiento, es decir, una integral primera del sistema. En particular, se tiene que  $H$  es una integral primera del sistema.

Como consecuencia de estos hechos, si un sistema tiene  $n$  integrales primeras independientes en involución, es decir,  $\{F_i, F_j\} = 0$ , entonces sus ecuaciones del movimiento se pueden obtener como cuadraturas. Este resultado es conocido como el famoso teorema de Arnold-Liouville y su demostración se puede encontrar en [6].

## 2.2.2. Sistemas hamiltonianos infinito dimensionales

En definitiva, cualquier sistema hamiltoniano es equivalente a una terna  $(X, \{, \}, H)$  con  $X$  una variedad de Poisson,  $\{, \}$  el paréntesis de Poisson y  $H$  el hamiltoniano del sistema (o equivalentemente, a una terna  $(X, \omega, H)$  con  $\omega$  una forma simpléctica). La dimensión de  $X$  es necesariamente par y para cierto sistema de coordenadas locales,  $\{x_i\}$ ,

en  $X$ , las ecuaciones de Hamilton se expresan como

$$\dot{x}_i = \{H, x_i\} \quad (2.15)$$

Es posible extender los conceptos anteriores al caso infinito dimensional. Todo es formalmente similar, y así un sistema dinámico Hamiltoniano infinito dimensional será un triple  $(P, \{, \}, H)$  siendo  $P$  una variedad diferenciable infinito dimensional (un espacio de funciones),  $\{, \}$  un paréntesis de Poisson definido en el espacio de funcionales en  $P$  y las ecuaciones de la evolución del sistema vendrán dadas por

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \{H, F\} \quad (2.16)$$

que serán ahora un sistema de ecuaciones en derivadas parciales.

Un problema que surge al analizar estos casos es que no existen teoremas generales de existencia y unicidad para las ecuaciones en derivadas parciales, así que cada caso debe ser analizado en si mismo.

Además, se debe definir con precisión quién es el paréntesis de Poisson y el correspondiente funcional hamiltoniano. Para visualizar estos conceptos se examinará el caso particular de la ecuación KdV. Por tanto, el siguiente objetivo será demostrar la equivalencia

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0 \Leftrightarrow u_t = \{H, u\} \quad (2.17)$$

De forma natural, se puede reescribir la ecuación KdV como

$$u_t = \frac{\partial}{\partial x}(-3u^2 - u_{xx})$$

y si se denota por  $P$  el espacio de funciones reales de variable real, se puede definir un funcional hamiltoniano  $H : P \rightarrow \mathbb{R}$  como

$$H[u] = \int_{-\infty}^{\infty} h(u, u_x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( -u^3 + \frac{1}{2}u_x^2 \right) dx$$

y como

$$\frac{\delta H}{\delta u(x)} = \frac{\partial h}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial h}{\partial u_x} \right) = -3u^2 - u_{xx}$$

se puede reescribir la ecuación KdV de la siguiente forma

$$u_t = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta H}{\delta u(x)} \quad (2.18)$$

Si tenemos en cuenta la observación 2.2.3 se tiene que

$$\{F, G\} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta F}{\delta u(x)} f(x, y) \frac{\delta G}{\delta u(y)} dx dy, \quad \{u(x), u(y)\} = f(x, y) \quad (2.19)$$

define una estructura de paréntesis de Poisson. Luego, si elegimos

$$f(x, y) = \{u(x), u(y)\} = -\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - y)$$

se obtiene que

$$\begin{aligned} \{H, u(x)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta H}{\delta u(x)} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - y)\right) \frac{\delta u(x)}{\delta u(y)} dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta H}{\delta u(x)} \left(-\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - y)\right) \delta(x - y) dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta H}{\delta u(y)} \left(-\frac{\partial}{\partial y}\delta(x - y)\right) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\delta H}{\delta u(y)} \delta(x - y) dy = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\delta H}{\delta u(x)} \end{aligned} \quad (2.20)$$

y con ello, queda definido el sistema hamiltoniano  $(P, \{, \}, H)$  correspondiente a la ecuación KdV.

A continuación, se determinarán las cantidades conservadas o integrales primeras del problema, que serán funcionales

$$Q[u] = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(u) dx \quad (2.21)$$

tales que sobre las soluciones de KdV,  $u(x, t)$ , verifiquen:

$$\frac{dQ}{dt} = \{H, Q\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho(u(x, t))}{\partial t} dx = 0 \quad (2.22)$$

y donde  $\rho(u)$ , densidad conservada, es en principio una función de  $u$ . Se buscarán densidades conservadas utilizando una ecuación de continuidad de la forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (2.23)$$

donde  $j$  es la corriente o flujo, que se supondrá integrable en  $\mathbb{R}$  y que verifique  $j(\infty) = j(-\infty) = 0$ . Luego, si se encuentran funciones que verifiquen la ecuación de continuidad, quedará determinada una cantidad conservada del sistema hamiltoniano.

De manera sencilla, se puede ver que

$$Q_1[u] = \int_{-\infty}^{\infty} u(x, t) dx \quad (2.24)$$

es una cantidad conservada con corriente asociada  $j = u_{xx} - 3u^2$ . Dicha cantidad conservada puede entenderse como la conservación de la masa total de agua.

De forma similar, se pueden obtener las siguientes cantidades conservadas:

$$\begin{aligned}
 Q_2[u] &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} u^2(x, t) \, dx \\
 Q_3[u] &= H[u] \\
 Q_4[u] &= \int_{-\infty}^{\infty} (5u^4 + 10uu_x^2 + u_{xx}^2) \, dx
 \end{aligned}
 \tag{2.25}$$

Si se considera el paréntesis de Poisson, el funcional  $Q_2$  representa el papel generador de las traslaciones espaciales. Del mismo modo, la interpretación de  $Q_3$  es evidente, la conservación de la energía del sistema, sin embargo, la obtención de la cuarta cantidad conservada que no se puede explicar con analogías finito-dimensionales, levantó un gran interés en su momento. Miura, Gardner y Kruskal fueron capaces de encontrar 8 cantidades conservadas más y Kruskal llegó a predecir la existencia de infinitas cantidades conservadas y el entendimiento de KdV como un sistema hamiltoniano infinito dimensional completamente integrable.

Para finalizar este apartado, se va a discutir una ecuación de gran importancia que es conocida como la ecuación de Schrödinger no lineal (SNL)

$$iu_t + u_{xx} = uf(|u|) \tag{2.26}$$

observada por primera vez en una tesis doctoral del italiano Da Rios tutorizada por Levi-Civita. Esta ecuación describe la dinámica de filamentos de vórtice en fluidos viscosos y su relación con la ecuación SNL junto con sus transformaciones de Bäcklund se puede encontrar en [18].

Las aplicaciones de esta ecuación han sido ampliamente estudiadas. Por ejemplo, en la física nuclear [19], oceanografía [13], etc. De hecho, se considera un modelo relevante dentro de la física de la materia condensada [1] (condensado de Bose-Einstein, superfluidez, etc) y de la óptica no lineal [22].

La función  $f$  (que asumiremos diferenciable) puede tomar distintos valores;  $f(|u|^2) = \pm|u|^2$ ,  $f(|u|^2) = 1 - |u|^2$  (denominada ecuación de Gross-Pitaevskii) o  $f(|u|^2) = -|u|^4$  (en el caso del condensado de Bose-Einstein), etc. Se asumirá que  $f$  satisface la condición impuesta de manera natural dentro de la óptica no lineal o de la condensación de Bose-Einstein, es decir,

$$|u|^2 \rightarrow r_0^2, \quad \text{cuando } |x| \rightarrow +\infty$$

con  $r_0$  un número positivo que verifica  $f(r_0^2) = 0$ .

Debido a que los conocimientos requeridos para un completo análisis de esta ecuación escapan del objetivo de esta memoria, nos centraremos en examinar con la mayor brevedad posible el caso en que  $f$  toma la forma

$$f(|u|^2) = |u|^2$$

**Observación 2.2.5.** *El resto de casos se pueden encontrar resumidos en [10]. Dentro*

de este artículo, se menciona además que las únicas soluciones de esta ecuación que no desaparecen son las que vienen dadas por una transformada de Madelung (interpretación de Copenhague), esto es,  $u = a \exp(i\phi)$  con  $a$  y  $\phi$  dos factores reales.

Se asumirá, por tanto, que una solución onda viajera de esta ecuación tiene que ser de la forma

$$u(x, t) = f(x - ct) \exp(i\theta(x - ct) + i\theta_0 t) \quad (2.27)$$

con  $f(x - ct)$  y  $\theta(x - ct)$  funciones reales a determinar y  $\theta_0$  una constante. Sustituyendo en la ecuación SNL se obtiene como resultado las siguientes dos ecuaciones

$$\begin{aligned} -cf' + 2\theta'f' + \theta''f &= 0 & (\text{parte imaginaria}) \\ c\theta'f + f'' - (\theta')^2f + f^3 + \theta_0f &= 0 & (\text{parte real}) \end{aligned} \quad (2.28)$$

La primera ecuación es separable y, entonces, se obtiene una solución

$$\theta' = \frac{1}{2} \left( c + \frac{A}{f} \right) \quad (2.29)$$

con  $A$  una constante arbitraria. Usando este resultado y sustituyendo, finalmente se obtiene que las soluciones onda viajera vienen dadas por

$$u(x, t) = a \operatorname{sech} \left( \frac{a(x - ct)}{\sqrt{2}} \right) \exp \left( \frac{ic(x - ct)}{2} + i\theta_0 t \right) \quad (2.30)$$

con

$$a^2 = 2 \left( \theta_0 - \frac{c^2}{4} \right)$$

### 2.2.3. Teoría de Campos Relativista en (1+1) dimensiones

Sea  $\mathbb{R}^{1,1} \simeq \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x$  un espacio-tiempo (1+1)-dimensional dotado con la métrica de Minkowski

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

y sea  $u : \mathbb{R}^{1,1} \rightarrow \mathbb{R}$  un campo escalar real. Sus dinámicas vienen determinadas por el funcional de acción

$$S[u] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(u, u_t, u_x) dx dt \quad (2.32)$$

donde  $\mathcal{L}$  hace referencia a su densidad lagrangiana. El principio de mínima acción nos lleva ahora a las expresiones

$$\delta S = 0 \Rightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t} = 0 \quad (2.33)$$

**Observación 2.2.6.** *En mecánica clásica, se suele describir un evento mediante su localización y su tiempo relativo a una sistema de referencia inercial. Si un segundo sistema*

de referencia inercial se desplaza respecto del primero con una velocidad  $v$  surgen las denominadas transformaciones de Galileo. Como la masa permanece inalterada por la transformación, ambos sistemas observan las mismas fuerzas  $F = ma$  actuando sobre los objetos y, por tanto, verifican las mismas leyes de Newton. Luego, las leyes de mecánica son consistentes con el primer postulado de relatividad.

Sin embargo, estas transformaciones no se adaptan a los postulados de Einstein debido a que las ecuaciones de velocidad establecen que un pulso de luz que se mueve con velocidad  $c$  viajaría con velocidad  $c-v$  dentro del segundo sistema inercial. De aquí surgen las ecuaciones conocidas como las transformaciones de Lorentz que vienen dadas por

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned}$$

Si una ecuación es invariante por transformaciones de Lorentz y  $u(x)$  una solución suya independiente del tiempo, entonces  $u(x')$  es también solución para cualquier  $v \leq c \in \mathbb{R}$ . A menos que se especifique lo contrario, la invarianza Lorentz se asumirá con  $c = 1$ .

Si se buscan ecuaciones que presenten invarianza Lorentz, una opción es considerar densidades lagrangianas de la forma

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(u_t^2 - u_x^2) - V(u) \quad (2.34)$$

siendo  $V(u)$  una función potencial que determina el sistema y que conduce directamente a la ecuación de Euler-Lagrange

$$u_{tt} - u_{xx} = -V'(u) \quad (2.35)$$

Este fenómeno define una teoría relativista para un campo escalar real  $u$ . Un caso particular, es la ecuación de Seno-Gordon (SG) enunciada en su forma original como

$$u_{tt} - u_{xx} = -m^2 \sin u, \quad m > 0 \quad (2.36)$$

o equivalentemente, bajo un cambio de coordenadas de cono de luz se puede expresar como

$$u_{xt} = m^2 \sin u \quad (2.37)$$

La ecuación SG surgió al estudiar superficies de curvatura Gaussiana constante negativa, o en otras palabras, superficies pseudoesféricas y la teoría asociada a ella dio como resultado las transformaciones de Bäcklund basadas en la obtención de una nueva familia biparamétrica de soluciones a partir de una solución particular conocida. Esta técnica no constituye un caso particular de esta ecuación, sino que es fácilmente trasladable al caso anterior de la ecuación KdV y, más en general, a cualquier ecuación solitónica completamente integrable. Esta ecuación tuvo además posteriores aplicaciones dentro de la teoría de dislocación de una red cristalina, o en el magnetismo (movimiento Bloch-wall), que se

pueden verificar en [7].

Además de la mencionada invarianza por transformaciones de Lorentz, la ecuación SG es invariante bajo traslaciones temporales y espaciales.

La densidad Lagrangiana de esta ecuación viene dada por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}[u_x^2 - u_t^2 + 2m^2(1 - \cos u)] \quad (2.38)$$

**Observación 2.2.7.** *Notése que la ecuación (2.38) no es más que una generalización de la densidad Lagrangiana para la ecuación de Klein-Gordon sustituyendo por  $u^2$  el término  $2(1 - \cos \varphi)$ . De hecho, cuando  $u \rightarrow 0$ , la ecuación SG se convierte en la propia ecuación de Klein-Gordon.*

*La función del término periódico no lineal de la densidad Lagrangiana SG tiene el efecto de restringir el rango del campo  $u$  a la 1-esfera, en otras palabras, el espacio de los números reales módulo  $2\pi$ . Obsérvese que la 1-esfera es la variedad topológica no trivial más simple y la única variedad unidimensional no trivial. Entonces, restringiendo el rango del campo  $u$  a una variedad no trivial es la única manera de poder asegurarnos que  $u$  contenga cantidades discretas conservadas.*

*Esta memoria no abarcará en detalle el estudio de la ecuación de Klein-Gordon, sin embargo, esta ecuación constituye otro buen ejemplo con soluciones de tipo “ondas solitarias”. Sin embargo, su estudio, como se puede apreciar, comparte similitudes con la ecuación SG como se detalla por ejemplo en [23].*

Para la búsqueda de soluciones de tipo viajero, se supone  $u(x, t) = f(x - ct)$ . Luego, la ecuación se reescribe como

$$(c^2 - 1)f'' = -m^2 \sin f$$

una e.d.o. de segundo orden que si se impone la condición de que  $f, f' \rightarrow 0$  en  $x \pm \infty$  se llega a que la solución onda viajera puede escribirse como

$$u(x, t) = 4 \arctan e^{\pm \theta_1}$$

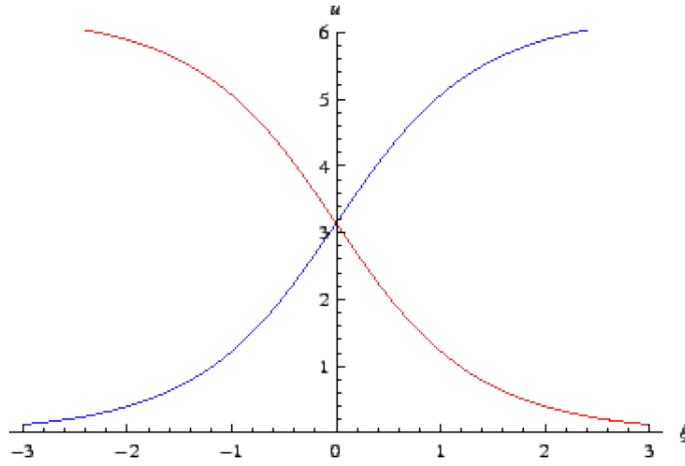
o equivalentemente,

$$\sin(u/2) = \operatorname{sech} \theta_1$$

con

$$\theta_1 = m \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} + \delta$$

y  $v, \delta$  constantes arbitrarias.



**Figura 2.2:** Soluciones de la ecuación SG (solución kink en azul y solución antikink en rojo).

**Observación 2.2.8.** Como ya se ha comentado, utilizando la invarianza de Lorentz se puede llegar a obtener la familia de soluciones anterior a partir de la solución estática

$$u(x, 0) = u(x) = 4 \arctan e^{\pm mx + \delta}$$

**Observación 2.2.9.** Si representamos la primera expresión eligiendo el signo positivo se obtendrá una función monótonamente creciente que se denomina kink. En cambio, eligiendo el signo negativo, obtendremos una solución de tipo antikink. En particular, el campo asociado a la solución kink rotará en sentido opuesto al generado por la solución antikink. Matemáticamente, este sentido de rotación puede ser interpretado por medio de invariantes topológicos a través de la expresión

$$R = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial u}{\partial x} dx$$

que satisface  $R = \pm 1$  para la solución kink y antikink, respectivamente.

La transformación de Legendre va a permitir caracterizar estas soluciones kink y antikink por medio de la energía de una solución de la ecuación. Si se definen los momentos canónicos asociados al campo real y escalar  $u$  como

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t} = u_t \quad (2.39)$$

se obtiene que el funcional hamiltoniano o funcional de energía es de la forma

$$H[u] = \int_{-\infty}^{\infty} \pi u_t - \mathcal{L} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{2} (u_t^2 + u_x^2) + V(u) \right) dx \quad (2.40)$$

Es frecuente identificar la energía cinética  $T$  y la energía potencial  $U$  de la forma

$$T[u] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 dx, \quad U[u] = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + V[u] \right] dx \quad (2.41)$$

de tal manera que  $H[u] = T[u] + V[u]$ . Las ecuaciones de Hamilton del sistema son

$$u_t = \frac{\delta H}{\delta \pi}, \quad \pi_t = -\frac{\delta H}{\delta u} \quad (2.42)$$

es decir,

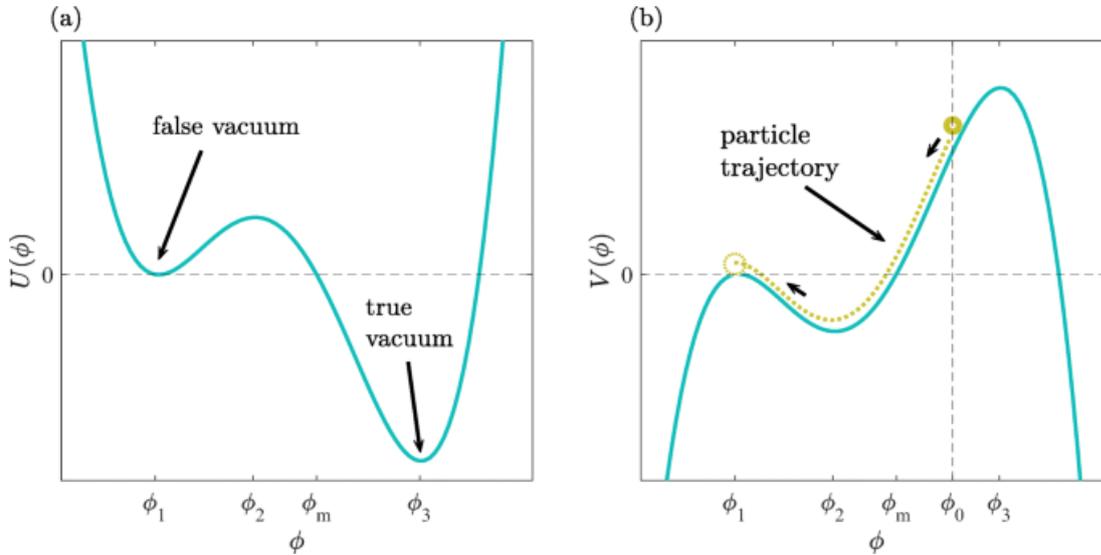
$$u_t = \pi, \quad \pi_t = -\frac{dV}{du} + u_{xx} \quad (2.43)$$

Ahora bien, dentro del contexto de la teoría de campos lagrangiana, el término solitón adquiere un diferente significado al comentado con anterioridad. Un solitón se define como una solución no singular, estática y de energía finita de las ecuaciones de campo clásicas.

Para encontrar un vacío estable, es necesario hallar un mínimo  $V_0$  tal que  $V(u) \geq V_0$ . Si dicho mínimo existe, se puede normalizar para tomar  $V_0 = 0$ . Si se asume que el conjunto  $V^{-1}(0) = \{u_1, u_2, \dots\}$  es no vacío y discreto, entonces las soluciones de energía finita deben aproximarse asintóticamente a un elemento de dicho conjunto. Sin embargo, este elemento puede ser diferente en los distintos extremos de una recta real. Los solitones topológicos más sencillos se caracterizan por las condiciones de contorno

$$u \cong u_1 \text{ cuando } x \rightarrow -\infty \text{ y } u \cong u_2 \text{ cuando } x \rightarrow \infty \quad (2.44)$$

que no pueden ser tratadas por medio de la teoría de perturbaciones. Estas son las soluciones kink que conectan los entornos de los vacíos.



**Figura 2.3:** Visualización de los vacíos estables (obtenido de [16]).

# Capítulo 3

## Métodos numéricos para la ecuación $\phi^4$

En este capítulo, se pondrán en práctica los conocimientos aprendidos sobre esquemas numéricos para poder observar las colisiones entre dos ondas solitarias.

El modelo a tratar es un caso particular de la expresión (2.35) para un potencial  $V(u) = (1 - u^2)^2/2$ . Este modelo, conocido como el modelo  $\phi^4$ , tiene múltiples aplicaciones dentro de la física de la materia condensada [8], cosmología [38] e incluso en la rama biofísica, para describir las excitaciones solitónicas en las dobles hélices del ADN [41]. En la teoría cuántica de campos es considerado un modelo de referencia para investigar las diferentes transiciones entre estados perturbativos y no perturbativos. Por tanto, este modelo juega un papel similar al del oscilador armónico dentro de numerosos sistemas lineales.

El modelo  $\phi^4$  viene determinado por el funcional de acción

$$S[u] = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} [u_t^2 - u_x^2 - (1 - u^2)^2] dx dt \quad (3.1)$$

y el principio de mínima acción nos lleva a las ecuaciones de Euler-Lagrange

$$u_{tt} - u_{xx} = 2u - 2u^3 \quad (3.2)$$

que no es más que un caso particular de la ecuación (2.35) y, por tanto, invariante bajo transformaciones de tipo Lorentz.

La transformada de Legendre permite obtener el funcional de energía

$$H = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} [u_t^2 + u_x^2 + (1 - u^2)^2] dx \quad (3.3)$$

y de forma trivial, se pueden obtener la energía cinética  $T$  y la potencial  $U$  de esta ecuación. Además, se puede ver que mediante una simetría reflexiva  $\mathbb{Z}_2$  existen dos vacíos estables  $u_{1,2} = \pm 1$  que constituyen junto con el vacío inestable  $u_0 = 0$  las soluciones

triviales o no topológicas de la ecuación.

Una solución particular se puede calcular por medio de un superpotencial  $W(u)$  que se define como una función asociada a el potencial  $V(u)$  dada por

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial W}{\partial u} \right)^2 = V(u) \quad (3.4)$$

que hace referencia al estado minimal de energía [34]. De esta forma, mediante la ecuación de primer orden

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \pm \frac{\partial W}{\partial u} \quad (3.5)$$

se puede obtener una solución estática. En el caso del modelo  $\phi^4$ , el superpotencial correspondiente viene dado por  $W(u) = u - u^3/3$  y, por tanto, una posible solución vendrá dada por

$$x - x_0 = \pm \int \frac{du}{1 - u^2} = \pm \operatorname{arctanh} u$$

y aplicando un boost de Lorentz se llega a que la ecuación

$$u(x, t) = \pm \tanh \left( \frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \quad (3.6)$$

es solución para una velocidad  $v$  constante.

**Observación 3.0.1.** *Existe otra solución estática de esta ecuación dada por el seno elíptico como se describe en [25].*

Por simplicidad, se denotará  $u_K(x_0, v)$  a la solución positiva (kink) y  $u_{\bar{K}}(x_0, v)$  a la negativa (antikink). Además, para visualizar las colisiones topológicas, se considerará que un par kink-antikink ( $K\bar{K}$ ) vienen dados por la siguiente expresión

$$u_{K\bar{K}}(x, t) = u_K(-x_0, v) + u_{\bar{K}}(x_0, -v_0) - 1 \quad (3.7)$$

y un par antikink-kink ( $\bar{K}K$ ) vendrá determinado por

$$u_{\bar{K}K}(x, t) = u_K(x_0, -v) + u_{\bar{K}}(-x_0, v_0) + 1 \quad (3.8)$$

**Observación 3.0.2.** *Un sencillo cálculo muestra que las ecuaciones (3.7) y (3.8) no son soluciones estáticas del modelo  $\phi^4$ , se trata de una posible configuración que se toma como condición inicial para los esquemas numéricos abordados en el siguiente apartado.*

### 3.1. Esquemas numéricos

A continuación, se estudiará la convergencia de cuatro esquemas asociados al modelo  $\phi^4$ . En las simulaciones numéricas, se utilizará una malla uniforme  $\Omega = [-s, s] \times [0, t_e]$  con  $s, t_e \in \mathbb{R}$  y unas condiciones de contorno absorbentes de primer orden (expresiones

(1.31) y (1.32)). Para la inicialización de los tres primeros métodos, se utilizarán como condiciones iniciales

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= f(x) \\ u_t(x, 0) &= \bar{f}(x) \end{aligned} \quad (3.9)$$

y para la primera iteración una aproximación de Taylor de segundo orden

$$u_m^1 = u_m^0 + ku_t(x_m, 0) + \frac{k^2}{2}u_{tt}(x_m, 0) + \mathcal{O}(k^3)$$

en donde  $u_m^0$  y  $u_t(x_m, 0)$  son conocidos por las condiciones iniciales y  $u_{tt}(x_m, 0) = f''(x_m) + 2u_m^0 - 2(u_m^0)^3$ .

A diferencia de los tres primeros esquemas que serán de segundo orden, en el caso del cuarto esquema, se utilizará un desarrollo de Taylor de cuarto orden para la primera iteración y como se comentará más adelante, será necesario obtener tres iteraciones más para poder inicializarlo.

### 3.1.1. Primer esquema

El primer esquema consiste en el obtenido al final del ejemplo 1.2.2

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + 2u_m^n - 2(u_m^n)^3 \quad (3.10)$$

En primer lugar, se estudiará la convergencia de este esquema, o en otras palabras, su consistencia y estabilidad. Para estudiar la consistencia del esquema, se recurre al desarrollo de la serie de Taylor

$$u_{m+1}^n = u_m^n + hu^{(1,0)}(x_m, t^n) + \frac{1}{2}h^2u^{(2,0)}(x_m, t^n) + \mathcal{O}(h^3)$$

que sustituyéndola en el esquema (3.10) y simplificando se obtiene que el error de truncado local viene determinado por

$$\begin{aligned} \frac{h^2}{12} & \left( -u^{(4,0)}(x_m, t^n) + n_c^2(4u^{(2,0)}(x_m, t^n) + u^{(4,0)}(x_m, t^n) + 4u_m^n(1 - 4(u_m^n)^2 + 3(u_m^n)^4 \right. \\ & \left. - 3u^{(1,0)}(x_m, t^n)^2 - 3u_m^n u^{(2,0)}(x_m, t^n) - 3u^{(0,1)}(x_m, t^n)^2) \right) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \quad (3.11)$$

que tiende a cero cuando  $h \rightarrow 0$ . Por otro lado, para calcular la estabilidad de este esquema, se recurrirá a la ecuación de los factores de amplificación, en concreto, la dada por la expresión

$$\frac{\phi^{n+1}e^{im\theta} - 2\phi^n e^{im\theta} + \phi^{n-1}e^{im\theta}}{k^2} = \frac{\phi^n e^{i(m+1)\theta} - 2\phi^n e^{im\theta} + \phi^n e^{i(m-1)\theta}}{h^2} + \lambda\phi^n e^{im\theta} \quad (3.12)$$

para  $\lambda \geq 0$ . Fácilmente, se puede comprobar que esta ecuación tiene dos raíces no triviales dadas por

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \frac{1}{2}(a + \sqrt{a^2 - 4}) \\ \phi_2 &= \frac{1}{2}(a - \sqrt{a^2 - 4})\end{aligned}$$

con

$$a = 2 - 2n_c^2 + k^2\lambda + 2n_c^2 \cos \theta$$

y teniendo en cuenta la primera condición de estabilidad se tiene que  $|\phi_j| \leq 1$  cuando  $-2 \leq a \leq 2$ . Luego, se tiene que el esquema es estable siempre que se verifique

$$\frac{2}{h^2} - \frac{2 \cos \theta}{h^2} - \frac{4}{k^2} \leq \lambda \leq \frac{2}{h^2} - 2 \frac{\cos \theta}{h^2} \quad (3.13)$$

y como  $\cos \theta$  está acotado,

$$\frac{4}{h^2} - \frac{4}{k^2} \leq \lambda \leq 0 \quad (3.14)$$

Por tanto, se observa que  $h \geq k$  y que  $\lambda$  debe ser un valor negativo. Sin embargo, en nuestra EDP,  $g(u) = 2u - 2u^3$  y esto obliga a que  $-4 \leq \lambda \leq 2$ . Este problema de estabilidad para los valores positivos de  $\lambda$  aparece comentado en varios textos como [21] y se puede comprobar que cuando  $u \in (-1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3})$  existirán ciertos problemas de estabilidad. No obstante, este crecimiento de la solución numérica es bastante lento y únicamente generará problemas a largo plazo.

### 3.1.2. Segundo esquema

El segundo esquema a tratar es una generalización del esquema anterior que aparece comentada en [21]

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + \frac{G(u_{m+1}^n) - G(u_{m-1}^n)}{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n} \quad (3.15)$$

con  $G(u_m^n) = (u_m^n)^2 - (u_m^n)^4/2$ .

La estabilidad se obtiene de forma equivalente al esquema anterior y, por tanto, surgirá un problema para simulaciones de larga duración. La consistencia viene determinada por un error de truncado local

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{12} &(-16n_c^2(u_m^n)^3 + 12n_c^2(u_m^n)^5 + 4(n_c^2 - 3)u^{(2,0)}(x_m, t^n) - 12(n_c^2 - 3)(u_m^n)^2 u^{(2,0)}(x_m, t^n) \\ &+ (n_c^2 - 1)u^{(4,0)}(x_m, t^n) + 4u_m^n(-3(n_c^2 - 2)u^{(1,0)}(x_m, t^n)^2 + n_c^2(1 - 3u^{(0,1)}(x_m, t^n)^2)) \\ &+ \mathcal{O}(h^3)\end{aligned} \quad (3.16)$$

### 3.1.3. Tercer esquema

El siguiente esquema se puede encontrar en [21] y se trata de un esquema explícito de segundo orden:

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + \frac{G(u_m^{n+1}) - G(u_m^{n-1})}{u_m^{n+1} - u_m^{n-1}} \quad (3.17)$$

con  $G(u_m^n) = (u_m^n)^2 - (u_m^n)^4/2$ . Se puede comprobar fácilmente que la estabilidad se calcula de forma análoga al primer esquema y su error de truncado local es

$$\begin{aligned} \frac{h^2}{12} & \left( -u^{(4,0)}(x_m, t^n) + n_c^2(-8u^{(2,0)}(x_m, t^n) + u^{(4,0)}(x_m, t^n) + 4u_m^n(-5 + 20(u_m^n)^2 - 15(u_m^n)^4 \right. \\ & \left. - 3u^{(1,0)}(x_m, t^n)^2 + 6u_m^n u^{(2,0)}(x_m, t^n) + 3u^{(0,1)}(x_m, t^n)^2) \right) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned} \quad (3.18)$$

### 3.1.4. Cuarto esquema

El cuarto esquema aparece comentado en [4]

$$\begin{aligned} \frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} & = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} \\ & + (n_c^2 - 1) \frac{6u_m^n + u_{m-2}^n - 4u_{m-1}^n - 4u_{m+1}^n + u_{m+2}^n}{12h^2} + g(u_m^n) \\ & + \frac{35g(u_m^n) + 11g(u_m^{n-4}) - 56g(u_m^{n-3}) + 114g(u_m^{n-2}) - 104g(u_m^{n-1})}{144} \\ & + n_c^2 \frac{g(u_{m-1}^n) - 2g(u_m^n) + g(u_{m+1}^n)}{12} \end{aligned} \quad (3.19)$$

con  $g(u_m^n) = 2u_m^n - 2(u_m^n)^3$ .

De manera similar a los casos anteriores, se puede ver que este esquema es consistente, con un error de truncado local

$$\frac{h^4}{720} (-5n_c^2 g^{(4,0)}(x_m, t^n) + 2(4 - 5n_c^2) u^{(6,0)}(x_m, t^n) + 2n_c^4 u^{(0,6)}(x_m, t^n)) + \mathcal{O}(h^5) \quad (3.20)$$

Para calcular la estabilidad, recurriendo al análisis de Von Neumann y teniendo en cuenta que  $e^{-\theta i} + e^{\theta i} = 2 \cos \theta$ , se llega a la siguiente expresión:

$$\phi^2 - 2\phi + 1 - 2n_c^2 \phi (\cos \theta - 1) + (n_c^2 - 1) n_c^2 \phi \frac{6 + 2 \cos(2\theta) - 8 \cos \theta}{12} - k^2 \lambda \phi = 0$$

de donde se obtienen dos raíces

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \frac{1}{2}(a + \sqrt{a^2 - 4}) \\ \phi_2 &= \frac{1}{2}(a - \sqrt{a^2 - 4})\end{aligned}$$

con

$$a = 2 - \frac{5n_c^2}{2} + \frac{n_c^4}{2} + k^2\lambda + \frac{8}{3}n_c^2 \cos \theta - \frac{2}{3}n_c^4 \cos \theta - \frac{1}{6}n_c^2 \cos(2\theta) + \frac{1}{6}n_c^4 \cos(2\theta)$$

de donde se deduce que la estabilidad se verifica si

$$\frac{-24 + b}{6k^2} \leq \lambda \leq \frac{b}{6k^2} \quad (3.21)$$

con

$$b = 15n_c^2 - 3n_c^4 - 16n_c^2 \cos \theta + 4n_c^4 \cos \theta + n_c^2 \cos(2\theta) - n_c^4 \cos(2\theta)$$

Se puede observar que si  $\theta = 0$ , entonces  $b = 0$  y, por tanto, surge el mismo problema de estabilidad que en los tres esquemas anteriores. Además, sigue siendo necesario imponer la condición  $n_c < 1$  para que se verifiquen las condiciones de Von Neumann. En [4] recomiendan usar un valor  $n_c \leq 0.5$  para evitar estos problemas de estabilidad.

Para su inicialización, se utilizará un desarrollo de Taylor de cuarto orden para la primera iteración. En las iteraciones 2, 3 y 4, se utilizará el método central implícito

$$\begin{aligned}\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} &= \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} \\ &+ (n_c^2 - 1) \frac{6u_m^n + u_{m-2}^n - 4u_{m-1}^n - 4u_{m+1}^n + u_{m+2}^n}{12h^2} + g(u_m^n) \\ &+ \frac{g(u_m^{n+1}) - 2g(u_m^n) + g(u_m^{n-1}))}{12} + n_c^2 \frac{g(u_{m-1}^n) - 2g(u_m^n) + g(u_{m+1}^n)}{12}\end{aligned} \quad (3.22)$$

para los casos  $m = 2, \dots, s - 2$ . La estabilidad de este método (3.22) es equivalente al caso anterior (3.19) y su error de truncando local viene dado por la expresión

$$\begin{aligned}\frac{h^4}{720} &(-5n_c^2 g^{(4,0)}(x_m, t^n) + (8 - 10n_c^2)u^{(6,0)}(x_m, t^n) \\ &+ n_c^4(-5g^{(0,4)}(x_m, t^n) + 2u^{(0,6)}(x_m, t^n)) + \mathcal{O}(h^5)\end{aligned} \quad (3.23)$$

Para  $m = 1$ , se sustituirá en (3.22) el término

$$\frac{6u_m^n + u_{m-2}^n - 4u_{m-1}^n - 4u_{m+1}^n + u_{m+2}^n}{12h^2}$$

por la diferencia progresiva

$$- \left( \frac{9u_m^n + u_{m+4}^n - 2(3u_{m+3}^n - 7u_{m+2}^n + 8u_{m+1}^n + u_{m-1}^n)}{12h^2} \right)$$

y de manera similar, en  $m = s - 1$ , se sustituye este mismo término por la fórmula simétrica de la diferencia regresiva. Esta sustitución se aplicará también en el esquema (3.19) en los casos  $m = 1, s - 1$ .

# Capítulo 4

## Resultados

En este capítulo, se expondrán los resultados que se han alcanzado durante el desarrollo de este proyecto y se realizarán algunas observaciones y comentarios al respecto. En el próximo capítulo, se proporcionará una descripción más exhaustiva de estos resultados y se analizará su relevancia en el ámbito científico.

### 4.1. Soluciones kink y antikink

La solución exacta del modelo  $\phi^4$  (expresión (3.6)) se trata de una onda que avanza con una velocidad constante  $v$ . Introduciendo como condición inicial esta solución en el instante  $t = 0$  en cualquiera de los cuatro esquemas se puede obtener su aproximación numérica:

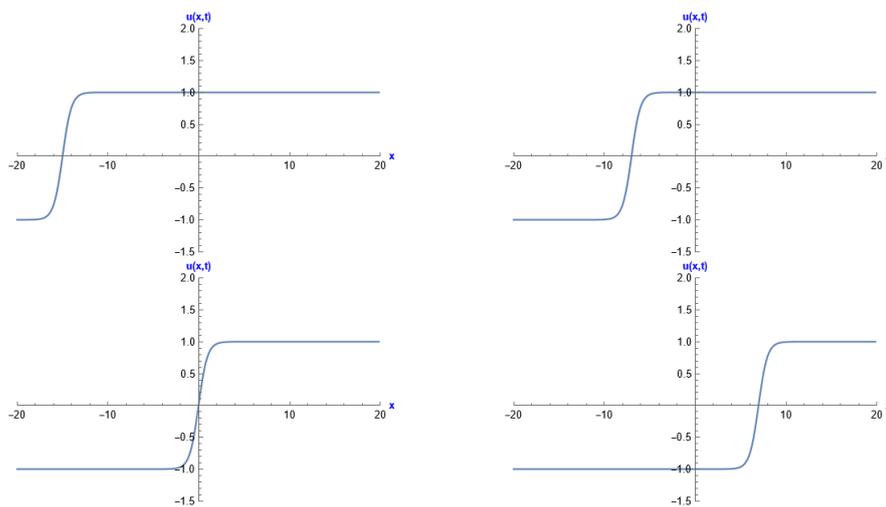
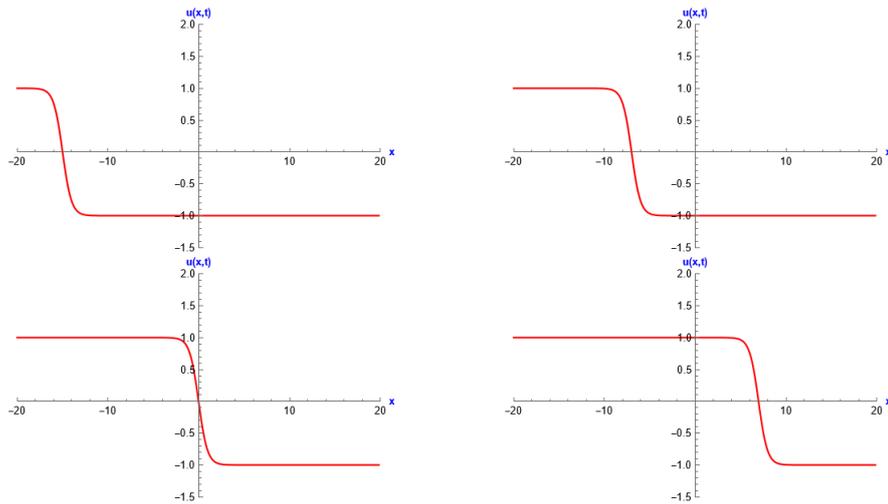


Figura 4.1: Evolución temporal de la solución kink utilizando el primer esquema.



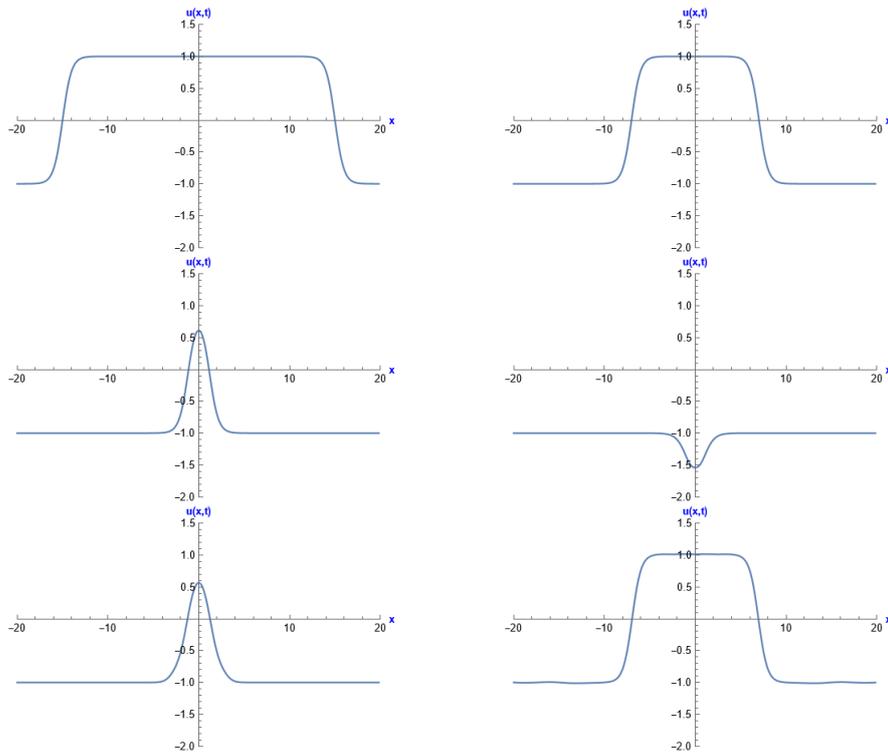
**Figura 4.2:** Evolución temporal de la solución antikink utilizando el primer esquema.

## 4.2. Pares kink-antikink y antikink-kink

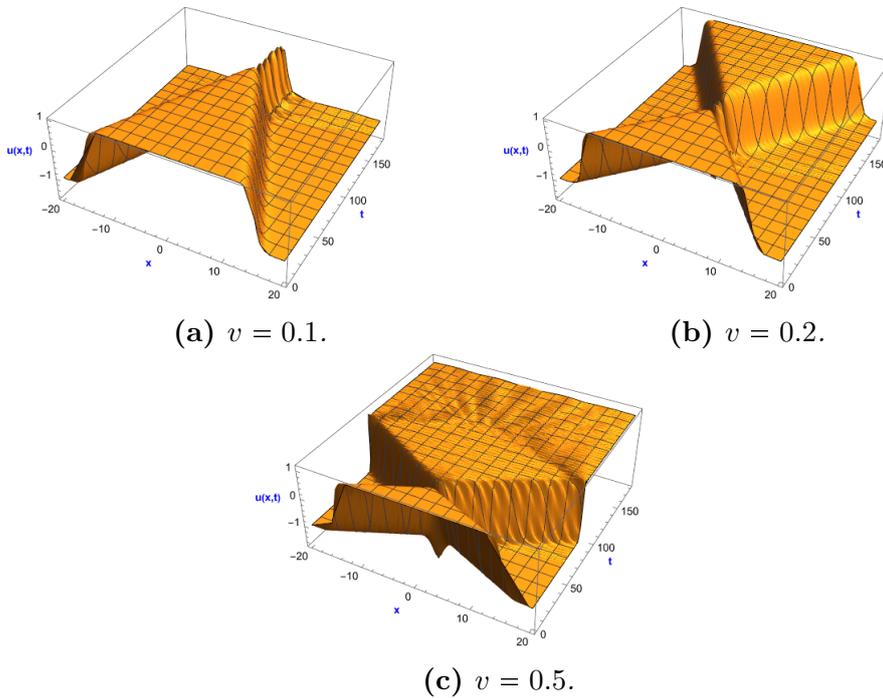
La relevancia de estos esquemas reside en el estudio de las colisiones de defectos topológicos, puesto que si se toma como condición inicial una de las expresiones (3.7) y (3.8) se obtiene una aproximación de una solución desconocida.

El principal interés de este trabajo es el análisis de dicha solución y las propiedades que presenta. Como se verá más adelante, estas representaciones dependen de la velocidad  $e$ , incluso, del tipo de esquema utilizado, que puede influir en lo que suceda tras el choque de las ondas. Por ejemplo, para ciertas velocidades puede ocurrir que las ondas se separen tras el choque y que algunos esquemas interpreten la solución como un choque disipativo.

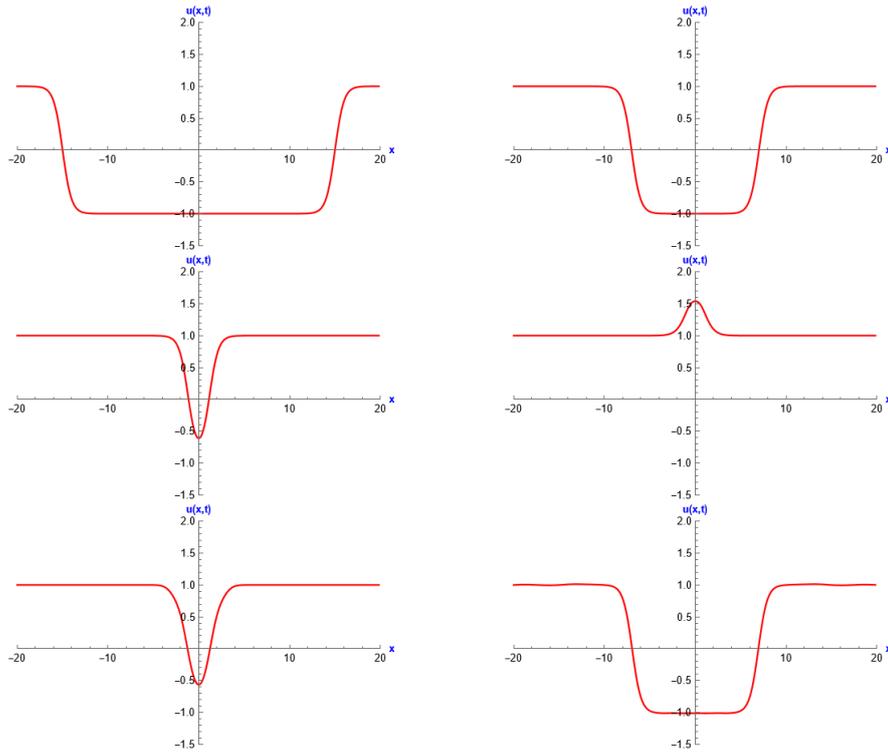
Este último fenómeno es digno de estudio, ya que la aplicación física de estas ondas depende en parte del suceso que surja tras la iteración de estas ondas. Pese a ello, como ya se ha comentado en esta memoria, una mejor aproximación de las soluciones incrementa el tiempo computacional.



**Figura 4.3:** Evolución temporal del par kink-antikink para  $x_0 = 15$  y  $v = 0.2$  utilizando el primer esquema.

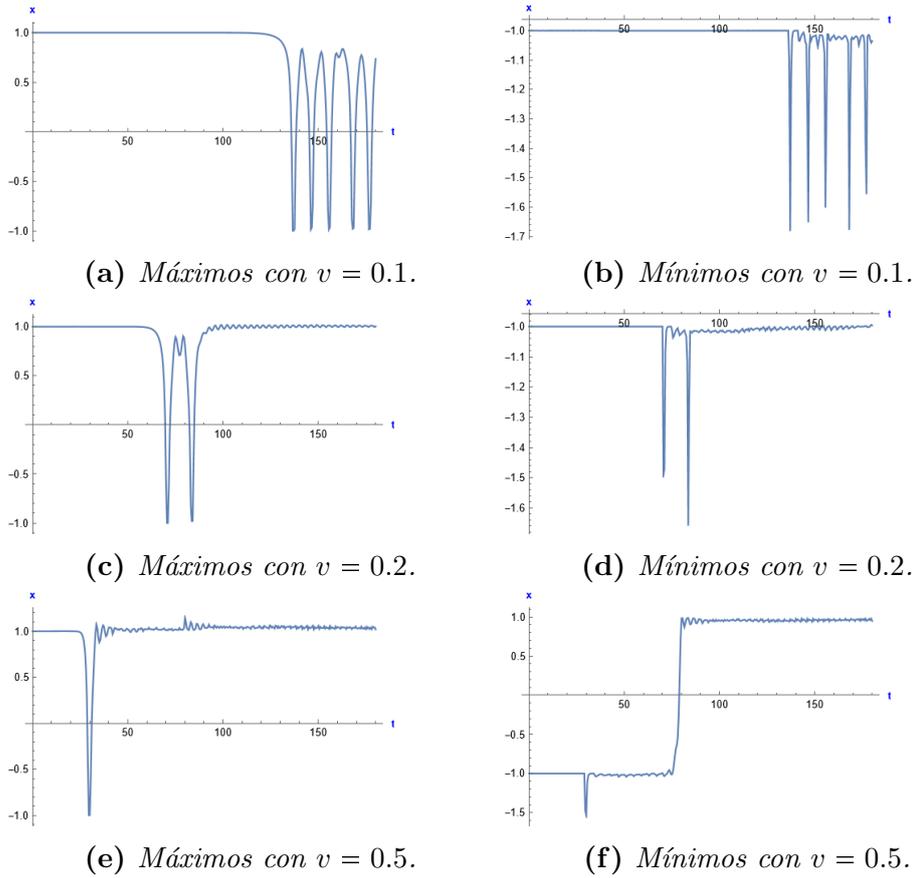


**Figura 4.4:** Evolución temporal y espacial del par kink-antikink para diferentes velocidades utilizando el primer esquema.



**Figura 4.5:** Evolución temporal del par antikink-kink para  $x_0 = 15$  y  $v = 0.2$  utilizando el primer esquema.

Esta solución representa un choque entre una solución kink y una solución antikink. Por simetría, solo será necesario estudiar uno de los dos pares, por ello, de aquí en adelante, en las simulaciones realizadas se utilizará como condición inicial el par kink-antikink. Modificando la velocidad  $v$ , los pares kink y antikink presentan diferentes evoluciones temporales. Mediante cualquiera de los cuatro esquemas se puede observar que cuanto mayor sea la velocidad, menor será el número de rebotes antes de alejarse. Este fenómeno se puede apreciar en el siguiente esquema que muestra los máximos y los mínimos que toma la solución para cada valor  $t^n$ :

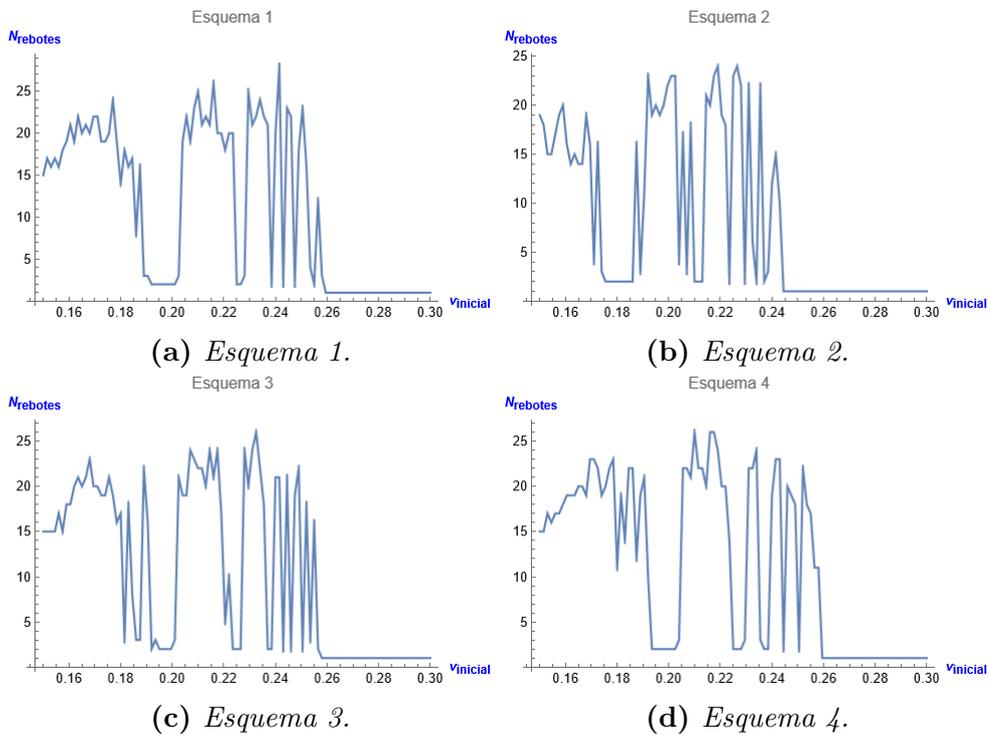


**Figura 4.6:** Máximos y mínimos del par kink-antikink para  $x_0 = 15$  utilizando el primer esquema.

### 4.3. Cálculo de número de rebotes y velocidad de salida

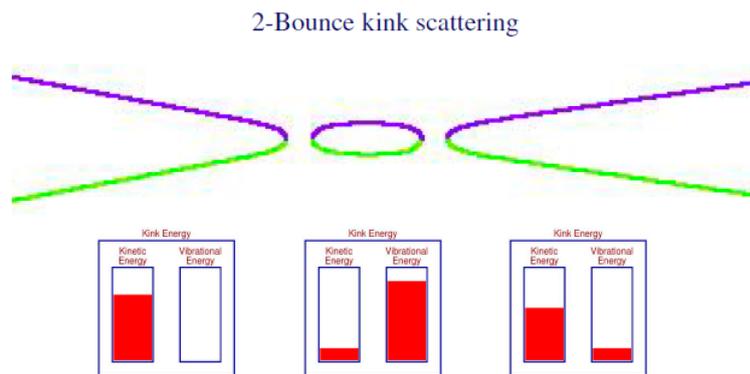
Para efectuar la comparativa entre los diferentes esquemas se ha calculado el número de rebotes obtenidos con cada uno de ellos para diferentes velocidades. En concreto, se han registrado con velocidades en el rango de 0.15 a 0.30, utilizando incrementos de  $1.5 \times 10^{-3}$ . El resto de parámetros impuestos en las simulaciones han sido  $h = 1/10$ ,  $k = 1/20$ ,  $t_e = 3600 * k = 180$ ,  $s = 20$  y  $x_0 = 15$ . En donde, como es habitual, la simulación se realiza sobre la malla de puntos  $\Omega = [-s, s] \times [0, t_e]$ , con  $h$  y  $k$  los parámetros que miden los incrementos espaciales y temporales.

La primera propiedad a analizar es si el número de rebotes depende del esquema utilizado. Si uno de los esquemas representase un número de rebotes superior al resto, los otros esquemas podrían estar perdiendo información que podría ser de gran importancia para un posterior análisis físico del modelo. Para automatizar esta medición, se calcularán los mínimos locales que aparecen en la gráfica de los máximos (figura 4.6) y que se encuentren por debajo del eje de abscisas (esto evita tomar como rebotes las vibraciones que aparecen tras el choque).



**Figura 4.7:** Número de rebotes avistados con cada esquema para un rango de velocidades de 0.15 a 0.30, utilizando incrementos de  $1.5 \times 10^{-3}$ .

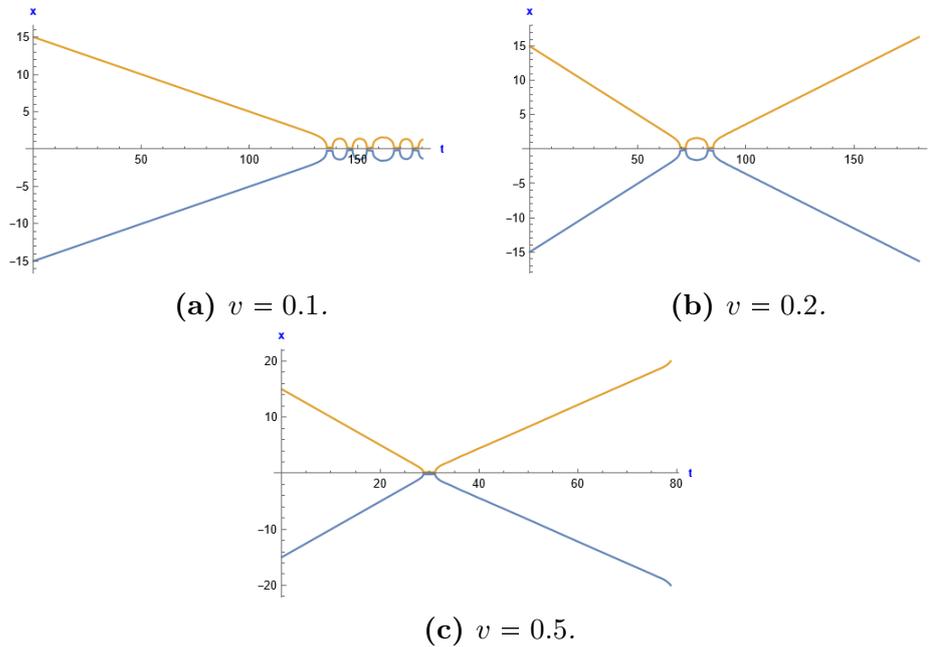
Como se puede apreciar en la anterior imagen, a partir de una cierta velocidad, diferente para cada uno de los esquemas, el número de rebotes permanece constante con valor unidad. Este hecho se debe a que cuando la velocidad alcanza un alto valor, las ondas adquieren la suficiente fuerza como para alejarse tras el choque. En cambio, para velocidades ínfimas, se puede observar como el número de rebotes es mucho mayor. De hecho, las ondas permanecen rebotando hasta el final de la simulación en muchos de los casos, es decir, no adquieren la suficiente energía para terminar alejándose.



MECANISMO DE TRANSFERENCIA DE ENERGÍA POR RESONANCIA

**Figura 4.8:** Mecanismo de transferencia de energía por resonancia (obtenido de [3]).

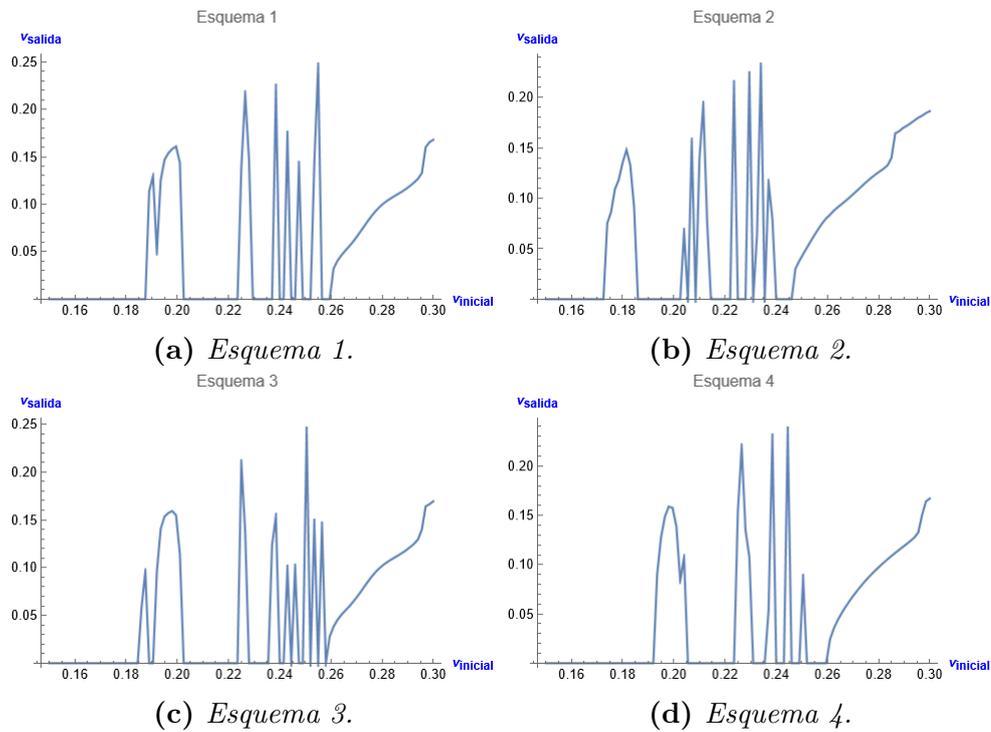
Otra propiedad de interés es la velocidad de salida tras el choque. Para obtener el avance de la solución en cada instante de tiempo, se calculará el centro del kink y del antikink, que no es más que el punto de intersección de la solución con el eje de abscisas.



**Figura 4.9:** Evolución del centro del kink y del antikink para diferentes velocidades utilizando el primer esquema.

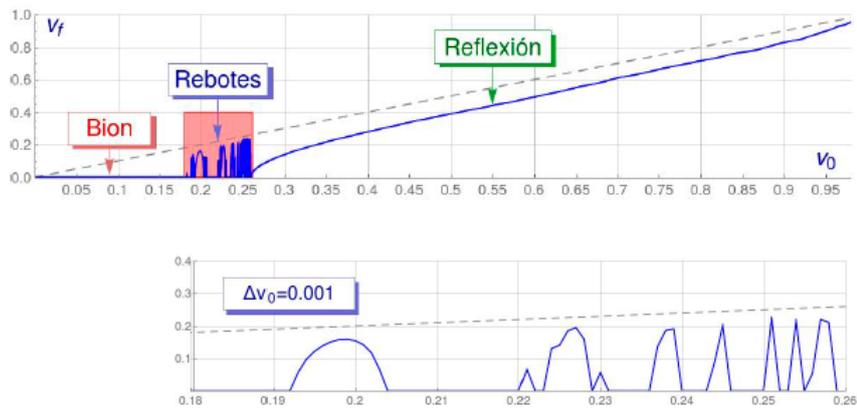
Como se puede observar en las imágenes, tras producirse el choque, la velocidad cambia. Es por eso que otro aspecto interesante a analizar es si varía esta velocidad utilizando diferentes esquemas. En la figura 4.9, se puede observar claramente que en los dos últimos casos la velocidad se estabiliza después del choque. Esta será la cantidad que se valorará en las simulaciones. En aquellos casos en los que las ondas se aniquilen (caso a) de la figura 4.9), se asumirá que la velocidad de salida es nula.

Con la misma discretización de velocidades elegida para el cálculo el número de rebotes (imagen 4.7), se obtiene la siguiente gráfica:



**Figura 4.10:** Velocidad de salida calculada con cada esquema para un rango de velocidades de 0.15 a 0.30, utilizando incrementos de  $1.5 \times 10^{-3}$ .

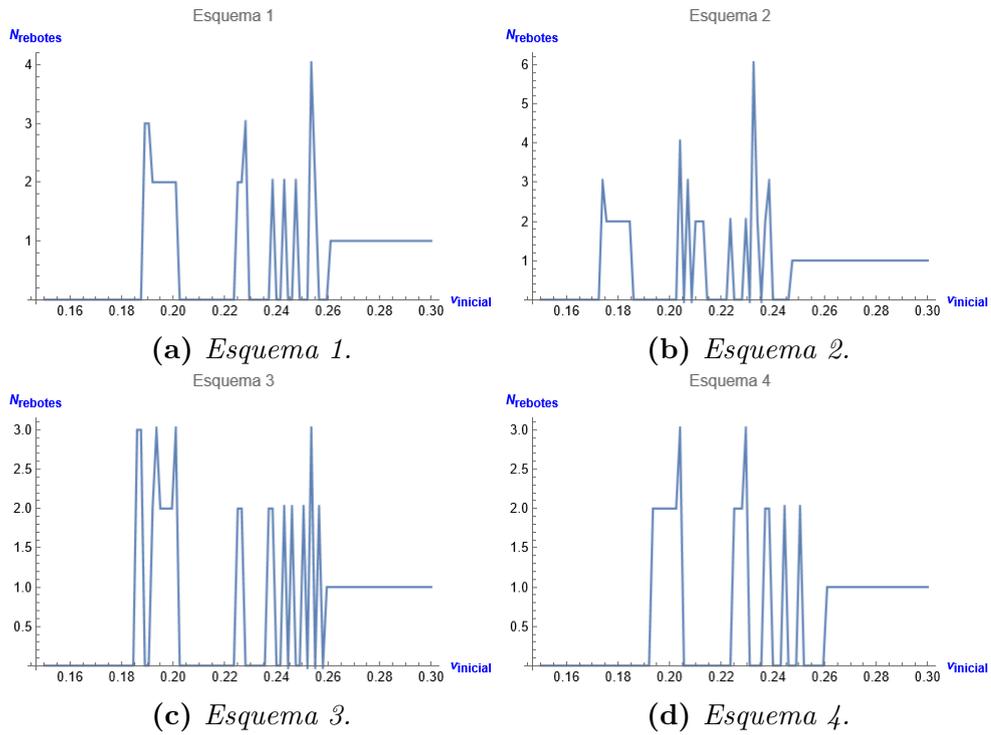
En esta última figura, se puede comprobar que la velocidad de salida es nula en un inicio y que, a partir de un cierto valor, aparece una estructura fractal que finaliza cuando se alcanza el límite de velocidad que permite la reflexión de las ondas en la primera colisión. Dicha estructura fractal es bastante común cuando se trabaja con colisiones de defectos topológicos y es un tema actual de estudio. La siguiente imagen proporciona una visión más amplia de esta singularidad:



**Figura 4.11:** Estructura fractal de las velocidades de salida (obtenido de [3]).

Como se había comentado con anterioridad, en los casos en los que no se produce

reflexión, la velocidad de salida es nula. Utilizando esta idea, si se impone en estos casos que el número de rebotes es 0, se puede obtener la siguiente imagen que permite visualizar el número de rebotes cuando si existe reflexión:



**Figura 4.12:** Restricción de la figura 4.7 a los casos reflexivos (el resto de casos se sustituyen por 0).

# Capítulo 5

## Conclusiones

El principal propósito conseguido en este Trabajo de Fin de Máster ha sido el análisis de cuatro esquemas numéricos destinados a investigar las colisiones de defectos topológicos del modelo  $\phi^4$ , teniendo en cuenta que la resolución exacta de la ecuación en derivadas parciales que caracteriza estos procesos es inabordable.

Las principales conclusiones del mismo son las siguientes:

- Se han estudiado de manera general en el primer capítulo de esta memoria las propiedades que caracterizan los esquemas en diferencias finitas. En primer lugar, se han introducido los conceptos básicos de las ecuaciones en derivadas parciales hiperbólicas y se han caracterizado los esquemas numéricos encargados de aproximar sus soluciones. En segundo lugar se ha estudiado de forma teórica la convergencia de los esquemas en diferencias finitas. Finalmente se han estudiado las condiciones de contorno absorbentes.
- Se ha realizado una presentación del contexto histórico de la Teoría de Solitones, introduciéndose los sistemas hamiltonianos infinito dimensionales y las propiedades básicas de las teorías de campos relativistas (1+1)-dimensionales.
- Se han planteado los cuatro esquemas en diferencias finitas elegidos para las simulaciones numéricas de las colisiones entre kink y antikink del modelo  $\phi^4$ . Se han estudiado además sus propiedades de consistencia y estabilidad.
- Se han obtenido distintas simulaciones numéricas, y diversos resultados y mediciones efectuadas en relación a estas. Estas representaciones se han construido empleando los cuatro métodos, aproximando las soluciones para diferentes velocidades iniciales y midiendo parámetros como la velocidad de salida o el número de rebotes.
- Se han observado notables diferencias entre los distintos esquemas. Basándonos en las gráficas obtenidas se observa que en el estudio de la colisión entre un kink y un antikink el primer y cuarto esquema son los más similares, mientras que el segundo esquema es el que más diverge del resto. En particular, observando el número de rebotes (figura 4.12), se aprecia que el esquema 2 muestra seis rebotes para uno de los valores, mientras que el resto de esquemas no superan los cuatro rebotes. De igual forma, en la gráfica de velocidades de salida (figura 4.9) se visualiza una

mayor discrepancia en el esquema 2 con respecto del resto. De hecho, es el único en el que se obtiene un valor de velocidad de salida no nulo para una velocidad inferior a 0.18. Se ha observado también que el cuarto esquema obtiene valores con mayor suavidad, es decir, el número de picos que aparecen es bastante inferior al resto.

- Todos los esquemas comienzan con una velocidad de salida nula y, a partir de cierta velocidad inicial, siguen una estructura fractal en las velocidades de salida. Finalmente, alcanzado cierto valor de velocidad inicial, todos ellos parecen adaptarse a una curva logarítmica. Es de resaltar que este último valor límite aparece con anterioridad en el segundo esquema y, junto con lo comentado sobre la obtención del primer valor de velocidad de salida no nulo, crea la sospecha de que este esquema presente un desplazamiento en las observaciones que lo haga diferir del resto de los métodos numéricos estudiados.
- En vista a las observaciones anteriores, se puede concluir que el esquema que mejor aproximaciones ha obtenido ha sido el cuarto esquema, seguido del primer esquema.
- Uno de los principales logros del trabajo ha sido la posibilidad de realizar simulaciones numéricas de considerable complejidad computacional en un ordenador convencional. Sin embargo, y lógicamente, el tiempo necesario para la realización de estos cálculos ha sido notable, incluyendo periodos que varían desde unos pocos minutos hasta varias horas, lo que ha representado uno de los principales desafíos que se han presentado en el trabajo.
- El tiempo de computación exigido para el tercer esquema ha sido superior al resto, fundamentalmente porque ha sido necesario trabajar con una precisión numérica superior debido a que la alta similitud existente entre algunos puntos producía una indeterminación en este caso. Este inconveniente ha provocado un incremento del tiempo computacional respecto al resto de los esquemas. En segundo lugar el cuarto esquema es el que ha requerido mayores tiempos.
- Finalmente, el estudio de las colisiones de defectos topológicos realizado en este trabajo presenta unos resultados que pueden ser de interés en este campo a la hora de estudiar las propiedades físicas de las soluciones solitónicas. Los análisis realizados confirman que un pequeño aumento del error numérico puede propiciar soluciones completamente diferentes. Este estudio se podría extender a esquemas de mayor orden e incluso a otros métodos numéricos destinados a aproximar ecuaciones en derivadas parciales que caractericen otros tipos diferentes de modelos físicos.

# Apéndice A: Código de Mathematica

Para el cálculo computacional de los diferentes esquemas y la elaboración de las gráficas que aparecen a lo largo de esta memoria, se ha empleado el software de Wolfram Mathematica. En este apéndice se recogerán algunos fragmentos de código utilizados en las simulaciones.

```
(* Esquema 1 *)
(* Parámetros iniciales *)
h = 1 / 10;
k = 1 / 20;
T = 3600 * k;

s = 20;
x0 = 15;
v = 0.2;

(* Par kink-antikink *)
USol1[x_, t_, x0_, v_] := Tanh[(x - v * t - x0) / Sqrt[1 - v^2]];
USol2[x_, t_, x0_, v_] := -Tanh[(x - v * t - x0) / Sqrt[1 - v^2]];
USol[x_, t_] := USol1[x, t, -x0, v] + USol2[x, t, x0, -v] - 1; (* La solución antikink-kink viene dada por USol1[x,t,x0,-v]+USol2[x,t,-x0,v]+1 *)

(* Condiciones iniciales *)
Do[u[x, 0] = USol[x, 0], {x, -s, s, h}];
Do[u[x, k] = USol[x, 0] + k * (D[USol[x, t], t] /. t -> 0) + (k^2 / 2) * ((D[USol[x1, 0], {x1, 2}] /. x1 -> x) + 2 USol[x, 0] - 2 (USol[x, 0])^3), {x, -s, s, h}];

(* Método numérico *)
Do[
  Do[u[x, t] = (2 * u[x, t - k] - u[x, t - 2 * k] + k^2 (u[x - h, t - k] - 2 * u[x, t - k] + u[x + h, t - k]) / h^2 + k^2 * (2 * u[x, t - k] - 2 * u[x, t - k]^3)), {x, -s + h, s - h, h}];
  Reptite

(* Condiciones de contorno *)
u[-s, t] = u[-s + h, t - k] + (k / h - 1) * (u[-s + h, t] - u[-s, t - k]) / (k / h + 1);
u[s, t] = u[s - h, t - k] + (k / h - 1) * (u[s - h, t] - u[s, t - k]) / (k / h + 1);
, {t, 2 * k, T, k}];
```

Figura A.1: Código empleado para el cálculo numérico del primer esquema.

El segundo y tercer esquema presentan unas líneas de código muy similares a las de este primer esquema, sin embargo, para implementar el cuarto esquema resulta necesaria la incorporación de un esquema implícito en las primeras iteraciones:

```
(* Esquema inicial *)
F[x_, t_] := 2 * u[x, t] - 2 * u[x, t]^3;
nc = k / h;

Do[
  [repite]
  sol =
  NSolve[
    [resuelve numéricamente]
    Rationalize[u1 == 2 * u[-s + h, t - k] - u[-s + h, t - 2 * k] + nc^2 * (u[-s, t - k] - 2 * u[-s + h, t - k] + u[-s + 2 h, t - k]) -
    [racionaliza]
    (nc^2 - 1) * nc^2 * (9 * u[-s + h, t - k] + u[-s + 5 h, t - k] - 2 (3 * u[-s + 4 h, t - k] - 7 * u[-s + 3 h, t - k] + 8 * u[-s + 2 h, t - k] + u[-s, t - k])) /
    12 + k^2 * (F[-s + h, t - k] + (2 * u1 - 2 * u1^3 - 2 * F[-s + h, t - k] + F[-s + h, t - 2 * k]) / 12 +
    nc^2 * (F[-s, t - k] - 2 * F[-s + h, t - k] + F[-s + 2 h, t - k]) / 12), u1, Reals];
    [números reales]
  u[-s + h, t] = (u1 /. sol) [[1]];

  sol =
  NSolve[
    [resuelve numéricamente]
    Rationalize[u1 == 2 * u[s - h, t - k] - u[s - h, t - 2 * k] + nc^2 * (u[s - 2 h, t - k] - 2 * u[s - h, t - k] + u[s, t - k]) -
    [racionaliza]
    (nc^2 - 1) * nc^2 * (9 * u[s - h, t - k] + u[s - 5 h, t - k] - 2 (3 * u[s - 4 h, t - k] - 7 * u[s - 3 h, t - k] + 8 * u[s - 2 h, t - k] + u[s, t - k])) / 12 +
    k^2 * (F[s - h, t - k] + (2 * u1 - 2 * u1^3 - 2 * F[s - h, t - k] + F[s - h, t - 2 * k]) / 12 +
    nc^2 * (F[s - 2 h, t - k] - 2 * F[s - h, t - k] + F[s, t - k]) / 12), u1, Reals];
    [números reales]
  u[s - h, t] = (u1 /. sol) [[1]];

  Do[
    [repite]
    sol =
    NSolve[
      [resuelve numéricamente]
      u1 == 2 * u[x, t - k] - u[x, t - 2 * k] + nc^2 * (u[x - h, t - k] - 2 * u[x, t - k] + u[x + h, t - k]) +
      (nc^2 - 1) * nc^2 * (6 * u[x, t - k] + u[x - 2 * h, t - k] - 4 * u[x - h, t - k] - 4 * u[x + h, t - k] + u[x + 2 * h, t - k]) / 12 +
      k^2 * (F[x, t - k] + (2 * u1 - 2 * u1^3 - 2 * F[x, t - k] + F[x, t - 2 * k]) / 12 + nc^2 * (F[x - h, t - k] - 2 * F[x, t - k] + F[x + h, t - k]) / 12),
      u1, Reals];
      [números reales]
    u[x, t] = (u1 /. sol) [[1]];

    , {x, -s + 2 * h, s - 2 * h, h};

    (* Condiciones de contorno *)
    u[-s, t] = u[-s + h, t - k] + (k / h - 1) * (u[-s + h, t] - u[-s, t - k]) / (k / h + 1);
    u[s, t] = u[s - h, t - k] + (k / h - 1) * (u[s - h, t] - u[s, t - k]) / (k / h + 1);
    , {t, 2 * k, 4 * k, k}];

```

Figura A.2: Código empleado para el cálculo numérico de las primeras iteraciones del cuarto esquema.

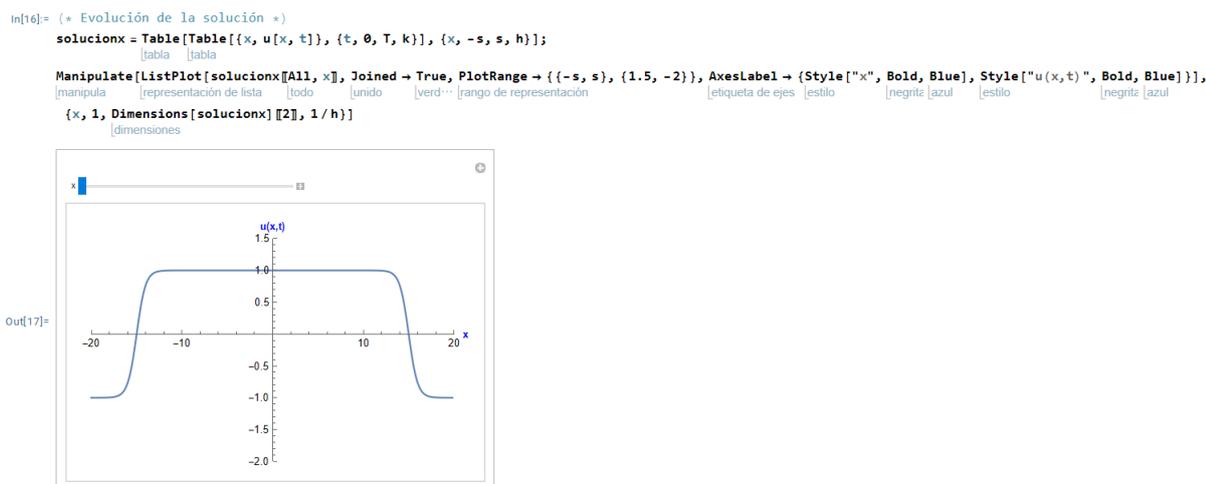
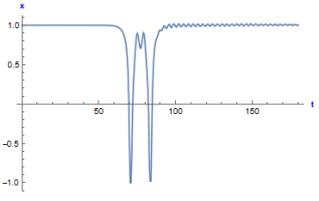


Figura A.3: Código empleado para graficar la evolución temporal de la solución.

```

In[26]= (* Máximos de la solución *)
maximos = Table[{x * k, Max[solucionx[All, #][[All, 2]]], {x, 1, Dimension[solucionx][2], 1/h}}];
ListPlot[maximos, Joined -> True, PlotRange -> All, AxesLabel -> {Style["t", Bold, Blue], Style["x", Bold, Blue]]
Out[27]=

```



```

In[28]= (* Selecciona todos los valores máximos por debajo de la cota superior y crea una lista con la posición *)
valorespequeños = {};
cotasuperior = 0;
For[i = 1, i < Length[Select[maximos[All, 2], # < cotasuperior &]], i++, AppendTo[valorespequeños, Position[maximos[All, 2], Select[maximos[All, 2], # < cotasuperior &][[1]]]];
valorespequeños = Flatten[valorespequeños]
Out[31]= {141, 142, 143, 144, 145, 166, 167, 168, 169, 170}

In[32]= (* Selecciona los valores de la lista anterior que sean mínimos locales *)
rebotes = {};
For[i = 1, i < Length[valorespequeños], i++,
If[i < Length[valorespequeños], If[maximos[valorespequeños[i] - 1][[2]] > maximos[valorespequeños[i]][[2]] < maximos[valorespequeños[i] + 1][[2]], AppendTo[rebotes, maximos[valorespequeños[i]][[1]]]]];
rebotes
Out[34]= rebotes
Out[24]= {{1411/20, -0.999968}, {1671/20, -0.980321}}

In[35]= (*Número de rebotes*)
Length[rebotes]
Out[35]= 2

```

Figura A.4: Código empleado para el cálculo del número de rebotes.

```

(* Evolución de los centros del kink *)
centros = {};
centro1 = -x0;
centro2 = x0;
For[i = 1, i < Dimension[solucionx][2], i++,
If[Min[solucionx[All, i][[All, 2]]] <= 0, If[Max[solucionx[All, i][[All, 2]]] >= 0,
f = Interpolation[solucionx[All, i]];
centro1 = FindRoot[f[x], {x, centro1}][[1, 2]];
centro2 = FindRoot[f[x], {x, centro2}][[1, 2]];
AppendTo[centros, {i * k, centro1, centro2}]]];
(* Velocidad final *)
NMedia = 800;
If[centros[All, {1, 3}][[-100][2]] >= 5,
Vfin = Sum[centros[All, {1, 3}][[-i][2]] - centros[All, {1, 3}][[-(i + 1)][2]], {i, 1, NMedia}] / (NMedia * k),
Vfin = 0];
In[25]= Vfin
Out[25]= 0.15902

In[24]= ListPlot[{centros[All, {1, 2}], centros[All, {1, 3}]}, Joined -> True, AxesLabel -> {Style["t", Bold, Blue], Style["x", Bold, Blue]]
Out[24]=

```

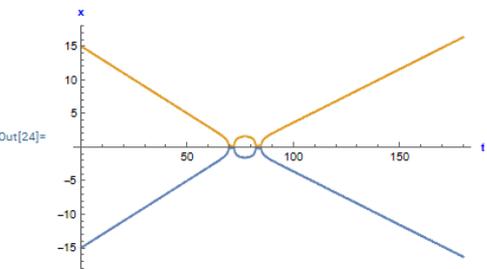


Figura A.5: Código empleado para el cálculo de la velocidad de salida.



# Bibliografía

- [1] M. M. Abid et al. «Gross–Pitaevskii dynamics of Bose–Einstein condensates and superfluid turbulence». En: *Fluid Dynamics Research* 33 (2003), págs. 509-544.
- [2] R. A. Adams y J. J. F. Fournier. *Sobolev spaces*. Elsevier, 2003.
- [3] A. Alonso-Izquierdo y M. Á. González León. “Una experiencia con Caléndula: colisiones entre defectos topológicos”. Conferencia en la jornada: “La Supercomputación en la I+D+i de la Universidad de Salamanca. Universidad de Salamanca”. [https://campus.usal.es/~mpg/General/ColisionDeKinks\\_v2.pdf](https://campus.usal.es/~mpg/General/ColisionDeKinks_v2.pdf). Último acceso: 02-09-2023. 2018.
- [4] A. Alonso-Izquierdo et al. «Kink scattering in a generalized Wess-Zumino model». En: *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 103 (2021).
- [5] W. F. Ames, W. Rheinboldt y A. Jeffrey. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Applications of Mathematics Series. Elsevier Science, 2014.
- [6] O. Babelon, D. Bernard y M. Talon. *Introduction to classical integrable systems*. Cambridge University Press, 2003.
- [7] A. Barone et al. «Theory and applications of the sine-Gordon equation». En: *La Rivista del Nuovo Cimento (1971-1977)* 1.2 (1971), págs. 227-267.
- [8] A. R. Bishop y T. Schneider. *Solitons and Condensed Matter Physics: Proceedings of the Symposium on Nonlinear (Soliton) Structure and Dynamics in Condensed Matter, Oxford, England, June 27–29, 1978*. Vol. 8. Springer Science & Business Media, 2012.
- [9] P. J. Caudrey, J. C. Eilbeck y J. D. Gibbon. «The sine-Gordon equation as a model classical field theory». En: *Il Nuovo Cimento B* 25.2 (1975), págs. 497-512.
- [10] D. Chiron. «Traveling waves for the Nonlinear Schrödinger Equation with general nonlinearity in dimension one». En: *Nonlinearity* 25.3 (2012), págs. 813-850.
- [11] R. Courant y D. Hilbert. *Methods of mathematical physics: partial differential equations*. John Wiley & Sons, 2008.

- [12] M. Dunajski. *Solitons, instantons, and twistors*. Vol. 19. OUP Oxford, 2009.
- [13] K. B Dysthe. «Note on a modification to the nonlinear Schrödinger equation for application to deep water waves». En: *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* 369.1736 (1979), págs. 105-114.
- [14] B. Engquist y A. Majda. «Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves». En: *Math. Comp* 31 (1977), págs. 629-651.
- [15] L. Euler. *Institutionum calculi integralis*. Institutionum calculi integralis v. 1. imp. Acad. imp. Saent., 1768.
- [16] J. A. González et al. «Solitons and instantons in vacuum stability: physical phenomena». En: *Brazilian Journal of Physics* 50 (2020), págs. 759-770.
- [17] M. Á. González León et al. «Kinks, Sistemas Integrables y Geodésicas: Solitones en el Modelo Sigma O(3) Lineal». Tesis doct. Universidad de Salamanca, 2001.
- [18] N. E. Gürbüz y D. W. Yoon. «Visco-Da Rios Equation in 3-Dimensional Riemannian Manifold». En: *Frontiers in Physics* 9 (2022).
- [19] E. F. Hefter. «Application of the nonlinear Schrödinger equation with a logarithmic inhomogeneous term to nuclear physics». En: *Phys. Rev. A* 32 (1985), págs. 1201-1204. DOI: 10.1103/PhysRevA.32.1201.
- [20] R. Horne. «A Brief Introduction to Solitons». En: *ResearchGate* (2015). DOI: 10.13140/RG.2.1.2314.0962.
- [21] S. Jiménez y L. Vázquez. «Analysis of four numerical schemes for a nonlinear Klein-Gordon equation». En: *Applied Mathematics and Computation* 35.1 (1990), págs. 61-94.
- [22] Y. S. Kivshar y B. Luther-Davies. «Dark optical solitons: physics and applications». En: *Physics Reports* 298.2 (1998), págs. 81-197.
- [23] *Klein-Gordon's equation*. [https://www.oulu.fi/tf/kvmIII/english/2004/20\\_klein.pdf](https://www.oulu.fi/tf/kvmIII/english/2004/20_klein.pdf). Último acceso: 15-06-2023.
- [24] D. J. Korteweg y G. De Vries. «XLI. On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal, and on a new type of long stationary waves». En: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 39.240 (1895), págs. 422-443.
- [25] M. Lizunova y J. van Wezel. «An introduction to kinks in  $\varphi^4$ -theory». En: *SciPost Physics Lecture Notes* (2021).

- [26] G. Mur. «Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time-domain electromagnetic-field equations». En: *IEEE transactions on Electromagnetic Compatibility* 4 (1981), págs. 377-382.
- [27] J. Norman Zabusky y D. Martin Kruskal. «Interaction of “solitons” in a collisionless plasma and the recurrence of initial states». En: *Physical review letters* 15.6 (1965), pág. 240.
- [28] M. Renardy y R. C. Rogers. *An Introduction to Partial Differential Equations*. Texts in Applied Mathematics. Springer New York, 2004.
- [29] T. D. Ringler et al. «A unified approach to energy conservation and potential vorticity dynamics for arbitrarily-structured C-grids». En: *Journal of Computational Physics* 229.9 (2010), págs. 3065-3090.
- [30] C. Runge. «Über eine Methode, die partielle Differentialgleichung  $u = \text{Constans}$  numerisch zu integrieren». En: *Z. Math. u. Phys. Bd* 56 (1908), págs. 225-232.
- [31] J. S. Russell. *Report on Waves: Made to the Meetings of the British Association in 1842-43*. 1845.
- [32] M. Salo. «Fourier analysis and distribution theory». En: *Department of Mathematics and Statistics, University of Jyväskylä* (2013).
- [33] J. B. Schneider. «Understanding the finite-difference time-domain method». En: *School of electrical engineering and computer science Washington State University* 28 (2010).
- [34] Y. M. Shnir. *Topological and non-topological solitons in scalar field theories*. Cambridge University Press, 2018.
- [35] W. A. Strauss. *Partial Differential Equations: An Introduction*. Wiley, 1992.
- [36] J. C. Strikwerda. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Second Edition. Society for Industrial y Applied Mathematics, 2004.
- [37] W. M. Tulczyjew. «The legendre transformation». En: *Annales de l'IHP Physique théorique*. Vol. 27. 1. 1977, págs. 101-114.
- [38] A. Vilenkin y E. P. S. Shellard. *Cosmic strings and other topological defects*. Cambridge University Press, 1994.
- [39] K. Vogtmann, A. Weinstein y V. I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, 1997.

- [40] Y. Yang. *Solitons in field theory and nonlinear analysis*. Springer Monographs in Mathematics. Springer New York, 2001.
- [41] S. Yomosa. «Soliton excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices». En: *Physical Review A* 27.4 (1983), pág. 2120.