CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATEMÁTICAS MATEMÁTICAS APLICADAS



Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

MÉTODO "SPLITTING-FLUX LIMITER" PARA ECUACIONES DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN CON REACCIÓN ESTOCÁSTICA

 $T \to S \to S$

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

MAESTRO EN CIENCIAS CON ESPECIALIDAD EN MATEMÁTICAS APLICADAS

PRESENTA:

ROBERTO DÍAZ ADAME

Guanajuato, Guanajuato, México, Junio 2017

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN MATEMÁTICAS MATEMÁTICAS APLICADAS

MÉTODO "SPLITTING-FLUX LIMITER" PARA ECUACIONES DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN CON REACCIÓN ESTOCÁSTICA

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

ROBERTO DÍAZ ADAME

APROBADO POR:

DRA. SILVIA JEREZ GALIANO DIRECTOR DE TESIS

DR. ABRAHAM MARTÍN DEL CAMPO SÁNCHEZ DR. MIGUEL ÁNGEL UH ZAPATA SINODAL

SINODAL

A mi Familia.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco atentamente al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico que me fue otorgado a través de una beca para la realización de mis estudios de maestría.

RESUMEN de la Tesis de Roberto Díaz Adame presentada como requisito parcial para la obtención de la Maestría en Matemáticas Aplicadas. Guanajuato, Guanajuato, México, Junio 2017.

MÉTODO "SPLITTING-FLUX LIMITER" PARA ECUACIONES DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN CON REACCIÓN ESTOCÁSTICA

En este trabajo, se deriva la ecuación de advección-difusión con término de reacción estocástico y se construye un método splitting para su resolución numérica. Este método splitting resuelve: una ecuación de advección-difusión mediante el método limitador de flujo Switch y la ecuación ordinaria estocástica asociada al término reactivo mediante el algoritmo Euler-Maruyama. Se estudia numéricamente convergencia del método propuesto y su eficiencia para flujos convexos y no convexos. Además este método se aplica a varios problemas de interés epidemiológico e ingenieril.

Palabras clave: ecuación de advección-difusión-reacción, método splitting, método limitador de flujo, ecuaciones diferenciales estocásticas, ruido ambiental.

Resumen aprobado por:

Dra. Silvia Jerez Galiano

Índice general

1 Int	roducción	1		
1.1.	Motivación	1		
1.2.	Antecedentes	2		
1.3.	Objetivo	3		
1.4.	Metodología	4		
2 Ec	uaciones diferenciales parciales de interés	6		
2.1.	Ecuación de advección	6		
	2.1.1. Método de las curvas características	7		
	2.1.2. Solución débil y entrópica	9		
	2.1.3. Problema de Riemann	11		
2.2.	Ecuación de advección-difusión	13		
	2.2.1. Solución clásica	15		
	2.2.2. Solución débil y entrópica	16		
3 Métodos numéricos				
3.1.	Ecuación de advección	19		
	3.1.1. Métodos conservativos	20		
	3.1.2. Métodos limitadores de flujo o "flux-limiter"	23		
	3.1.3. Convergencia	24		
3.2.	Ecuación de advección-difusión	26		
	3.2.1. Métodos conservativos	27		
	3.2.2. Método limitador de flujo Switch	28		
4 A p	roximación de la ecuación de advección-difusión con reacción es-			
toc	astica	33		

4.1.	Ecuación de advección-difusión con reacción estocástica						
4.2.	Métod	lo splitting	35				
	4.2.1.	Método splitting flux-limiter	37				
4.3.	Método de Euler-Maruyama						
4.4. Simulaciones numéricas							
	4.4.1.	Ecuación advección-reacción con ruido aditivo	42				
	4.4.2.	Ecuación advección-difusión-reacción con ruido no lineal $\ .\ .$.	45				
	4.4.3.	Flujos degenerados	51				
5 Cor	nclusio	\mathbf{nes}	53				
Apéndi	ce		55				
A Eler	nentos d	de Probabilidad	56				
A.2. Ecuaciones Diferenciales Estocásticas							

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Motivación

Una de las ecuaciones parciales más conocidas en el campo científico es la ecuación de advección-difusión-reacción (ADR), que en el caso unidimensional es:

$$u_t + f(u)_x - K(u)_{xx} = h(u)$$
(1.1.1)

donde $u(x,t) : \mathbb{R} \times [0,T] \to \mathbb{R}$; f(u) es la función que define el flujo de transporte, K(u) es la función de difusión y h(u) es un término fuente o de reacción. La razón de su relevancia viene determinada por su gran utilidad para las diversas áreas de la ciencia, ya que modela diversos fenómenos de la física, química, biología y economía, veáse por ejemplo [4, 35]. Tiene su derivación a partir de las leyes de conservación de las propiedades de la materia como: masa, momento, energía, entropía, etc.

En las últimas décadas ha habido muchos trabajo científicos enfocados al estudio de la existencia, unicidad y propiedades de su solución. Teniendo en cuenta que la obtención de la solución analítica para ecuaciones en derivadas parciales no lineales es un problema de gran dificultad, muchos trabajos en el área de análisis numérico se han dirigido en desarrollar métodos eficientes y estables que aproximen la solución de la ecuación (1.1.1).

Un paso más en la modelación de los fenómenos naturales nos lleva a introducir ruido aleatorio en la ecuación ADR, bajo el interés de introducir variaciones medioambientales, las cuales están presentes en todos los fenómenos y que no son considerados en el caso de la modelación determinista. En particular, si consideramos la introducción de estas perturbaciones en el término de reacción, se buscaría describir el efecto que provoca la aleatoriedad medioambiental por ejemplo, en el crecimiento de las poblaciones o en la expansión de una enfermedad. De este modo, la ecuación de advección-difusión con término reactivo se escribe como

$$u_t + f(u)_x - K(u)_{xx} = h_1(u) + h_2(u) \, dW_t, \quad (x,t) \in \mathbb{R} \times [0,T]$$
(1.1.2)

donde $\{u_t\}_{t\geq 0}$ ahora es un proceso estocástico generada por un movimiento Browniano $W(t) = W_t$ para $t \geq 0$, y que está definido en el espacio de probabilidad (Ω, Λ, P) con Ω el espacio muestral, Λ una σ -álgebra y P la función de probabilidad asociada al fenómeno.

En estos útimos años, esta ecuación se ha adaptado para modelar diversos problemas de la ciencia. En particular, para decribir el transporte de contaminantes químicos o biológicos en mantos acuíferos [4], transporte de trazadores en medios porosos [36], formación a gran escala de estructuras del universo [35], etc. Por ello, el estudio de existencia y unicidad de soluciones para (1.1.2), así como el análisis de las propiedades cualitativas de su solución está teniendo una gran auge en la actualidad. Dada la complejidad extra que conlleva la introducción de aleatoriedad en la ecuación diferencial, conocer su solución analítica es muy complicado salvo para ciertos flujos f y bajo condiciones muy particulares. Debido a esto, se debe recurrir a los métodos numéricos para resolver la ecuación ADR estocástica y basarse en los conocimientos previos que se tienen del caso determinista tanto en lo analítico como en lo numérico.

1.2. Antecedentes

Aquí hacemos una revisión de algunos de los trabajos cercanos al nuestro y de los que partimos para el desarrollo de esta tesis.

Recientemente han habido muchos trabajos que estudian el efecto estocástico en leyes de conservación (ecuaciones de advección-reacción) [3, 6, 7, 21]. En [6] una ley de conservación es perturbada con un ruido multiplicativo de Lévy y se establecen condiciones sobre los coeficientes de la ecuación, para establecer existencia y unicidad de solución débil. En [7] se estudia una ecuación de advección-reacción estocástica multidimensional y se estudia el error para el método de viscosidad estocástico y ciertas propiedades de la solución entrópica del problema.

Se hace notar que ninguno de los trabajos aquí mencionados tienen en consi-

deración la inclusión del término difusivo en la ecuación estocástica estudiada, nosotros la incluimos para ver como afecta dicho término a la ecuación.

En particular, aquí tomamos como base el trabajo de Holden y Risebro [21], en donde los autores prueban existencia, unicidad y estabilidad de solución débil de un problema de Cauchy para la ecuación de advección-reacción con término fuente estocástico si f es una función suave con un número finito de puntos de inflexión, h_1 y h_2 son funciones Lipschitz, h_2 es una función de soporte compacto y u_0 es una función determinista acotada. Además, en este trabajo proponen un método splitting de operadores, el cual toma las soluciones de la ecuación advectiva:

$$u_t + f(u)_x = 0$$

y de la ecuación diferencial estocástica que se deriva del término fuente:

$$u_t = h_1(u) + h_2(u)dW_t$$

para construir la aproximación de la solución a la ecuación (1.1.2).

Se demuestra que el método splitting converge a una solución débil del problema continuo estocástico. El trabajo de Holden y Risebro ha sido punto de partida para otros trabajos más recientes como [2, 3], que trabajan un método de volúmenes finitos tipo splitting y prueban convergencia del método numérico a la solución débil entrópica. Por lo general, en estos trabajos proponen un método numérico adecuado para la parte advectiva que aproxime bien las discontinuidades y en la parte estocástica se utiliza el método de Euler-Maruyama (EM). El método EM es uno de los métodos más populares para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas debido a su bajo costo computacional y su aceptable precisión [20]. Es llamado así por Gisiro Maruyama y por ser una generalización del método de Euler para el caso determinista.

1.3. Objetivo

El objetivo principal de este trabajo es la construcción de un nuevo método numérico basado en la técnica splitting de operadores, previamente mencionada, para la ecuación de advección-difusión con reacción estocástica definida en (1.1.2). Para ello, se trabaja estos dos subproblemas:

- Aproximación numérica mediante el método limitador de flujo Switch para la ecuación de advección-difusión: $u_t + f(u)_x K(u)_{xx} = 0.$
- Aproximación numérica por el método de Euler-Maruyama de la ecuación diferencial estocástica determinada por el término de reacción: $u_t = h_1(u) + h_2(u)dW_t$.

Con el interés de estudiar la eficiencia del método numérico propuesto, se estudia: (i) su convergencia numérica para ciertos problemas, (ii) su aproximación bajo flujo advectivo convexo y no convexo, (iii) condiciones iniciales discontinuas y suaves, (iv) simulaciones de problemas aplicados en epidemiología y medios porosos.

1.4. Metodología

La presente tesis tiene la siguiente estructura:

Capítulo 2. Se derivan las ecuaciones deterministas de advección y adveccióndifusión a partir de las leyes de conservación. Se mencionan métodos analíticos para encontrar diferentes tipos de soluciones (clásicas y débiles) y se presentan las condiciones en las que estas soluciones existen y son únicas. Se establecen las condiciones para la solución de entropía.

Capítulo 3. Se construyen métodos numéricos en diferencias finitas del tipo conservativo, para aproximar las soluciones a las ecuaciones descritas en el capítulo 2 y se dan condiciones bajo las cuales un método es apropiado para obtener una buena aproximación: consistente, variación total acotada, convergencia. Se describe el método limitador de flujo Switch para la ecuación de advección-difusión.

Capítulo 4. Se deriva la ecuación de advección-difusión con término de reacción estocástico. Se describe la técnica splitting de operadores y se desarrolla el método "splitting-flux limiter" Switch para aproximar a la ecuación diferencial estocástica.

Se presenta el método de Euler- Maruyama y condiciones para su convergencia. Se estudia numéricamente el orden de convergencia y su eficiencia. Se muestran simulaciones para cierto problemas de epidemiología y medios porosos.

Capítulo 5. Conclusiones.

El trabajo se complementa con un apéndice sobre los conceptos de probabilidad necesarios para este trabajo. Por último se presenta la bibliografía usada para la realización de esta tesis.

2. ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES DE INTERÉS

En este capítulo presentamos las ecuaciones diferenciales parciales que serán base de nuestro trabajo: la ecuación de advección y la ecuación de advección-difusión. Aquí se derivan estas ecuaciones considerando las leyes de conservación de la física. Se dan las condiciones necesarias para la existencia y unicidad de soluciones clásicas para la ecuación de advección-difusión. Y se revisan los conceptos de solución débil y de entropía en ambos casos cuando no existe solución clásica. También se resuelven algunos problemas particulares que son de interés para este trabajo.

2.1. Ecuación de advección

Supongamos que tenemos un material que fluye por un conducto. Denotemos por u(x,t) la densidad del material en la posición x al tiempo t. Suponiendo que el intervalo de interés es [a, b], la masa del material en este intervalo es

$$\int_{a}^{b} u(x,t) dx.$$

Si f(x,t) denota el flujo (la velocidad a la cual el material pasa por el punto x) y si convenimos que este flujo va de izquierda a derecha. La ecuación

$$\frac{d}{dt} \int_{a}^{b} u(x,t) dx = f(a,t) - f(b,t), \qquad (2.1.1)$$

nos dice que el cambio de masa en [a, b] mientras el tiempo transcurre está dado por f(a, t) (el flujo que entra) menos f(b, t) (el flujo que sale). La ecuación (2.1.1) nos modela la **ley de conservación** de la masa. Usualmente se supone que f es una

función que depende de u:

$$\frac{d}{dt} \int_{a}^{b} u(x,t)dx = f(u(a,t)) - f(u(b,t)).$$
(2.1.2)

La forma integral para la ley de conservación se obtiene integrando (2.1.2) de t_1 a t_2 :

$$\int_{a}^{b} u(x,t_2)dx = \int_{a}^{b} u(x,t_1)dx + \int_{t_1}^{t_2} f(u(a,t))dt - \int_{t_1}^{t_2} f(u(b,t))dt.$$
(2.1.3)

Suponiendo que u(x,t) y f(x,t) son C^1 , usando el teorema fundamental del cálculo transformamos la expresión anterior en

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_a^b [u_t(x,t) + f(u(x,t))_x] dx dt = 0.$$
(2.1.4)

La ecuación anterior se satisface para cualquier intervalo [a, b] y sobre cualquier tiempo, de donde

$$u_t(x,t) + f(u(x,t))_x = 0. (2.1.5)$$

Esta ecuación se conoce como la **ecuación de advección** o ley de conservación de la variable u que puede ser: densidad, energía, temperatura, etc. Dado que nuestro interés reside en la resolución de la ecuación de advección, en la siguiente sección presentamos un método analítico clásico para las leyes de conservación.

2.1.1. Método de las curvas características

Para tener un problema bien planteado se propone el siguiente problema de Cauchy para la ecuación (2.1.5):

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad x \in [a, b], \ t \in [0, T]$$

 $u(x, 0) = u_0(x).$ (2.1.6)

Usaremos el método de las ecuaciones características [8], el cual consiste en encontrar las soluciones de (2.1.6) sobre una curva {(x(t), t), t > 0} que pase por el punto ($x_0, 0$) al tiempo 0. Definiendo una nueva variable z(t) = u(x(t), t) reescribimos la condición inicial como $z(0) = u_0(x_0)$. Usando la regla de la cadena se tiene

$$\frac{d}{dt}z(t) = u_x \frac{dx}{dt} + u_t = 0.$$
(2.1.7)

De la ecuación anterior vemos que si x = x(t) satisface

$$\frac{dx}{dt} = f'(u(x,t)),
x(0) = x_0,$$
(2.1.8)

entonces tendremos la solución sobre todos los puntos (x(t), t). Aunque pareciera que en principio resolver esta ecuación diferencial depende de u, observemos que

$$\frac{d}{dt}z(t) = \frac{d}{dt}u(x(t), t) = u_x \frac{dx}{dt} + u_t = 0.$$
(2.1.9)

Esto nos dice que sobre esta curva característica la solución es invariante bajo el tiempo. En particular,

$$f'(u(x(t),t)) = f'(u_0(x_0)).$$

Integrando sobre el tiempo la ecuación (2.1.8), se obtiene la ecuación explícita de las curvas características x = x(t) como sigue

$$x(t) = x_0 + f'(u_0(x_0))t.$$
(2.1.10)

Por lo tanto la solución del problema (2.1.6) sobre cualquier punto (x, t) es

$$u(x,t) = u_0 \left(x - f'(u_0(x_0))t \right).$$
(2.1.11)

Con esto demostramos la existencia de solución para el problema de Cauchy (2.1.6). Sin embargo, una pregunta natural que surge del ejemplo anterior es: ¿Para cada punto (x,t) existe una y sólo una recta que pase por dicho punto? La respuesta puede ser que no, el motivo es que la pendiente de las rectas que pasan por el punto $(x_0, 0)$ es $f'(u_0(x_0))$; si la pendiente de dos rectas características es diferente para dos puntos iniciales, estas rectas podrían intersecarse, pudiendo tener un problema de unicidad de solución o también pudiendo haber regiones del plano x, t donde no pase alguna curva característica. Estos casos se ilustran en el siguiente ejemplo .

Ejemplo 2.1.1. Consideremos la ecuación de Burgers $u_t + uu_x = 0$ y las dos condiciones iniciales:

$$u_1(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0, \\ 0 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

y

\int	0	si $x < 0$,
$u_2(x) = \left\{ \begin{array}{c} \\ \end{array} \right.$	1	si $x > 0$.

En la siguiente figura se muestran algunas rectas características con ambas condiciones iniciales, que representan la región donde podemos encontrar la solución.



Fig. 2.1.1: En la gráfica de la izquierda se ilustran curvas características al problema de Burgers con condición inicial $u_1(x)$. En la gráfica de la derecha vemos las curvas características correspondientes a la condición inicial $u_2(x)$.

Vemos que en general usando el método de las características no podemos construir una solución en el sentido clásico, es decir, una función u(x,t) diferenciable que satisfaga la ecuación (2.1.6). Para lidiar con este problema, introduciremos el concepto de solución débil.

2.1.2. Solución débil y entrópica

Una forma natural para definir una solución más general para la ecuación (2.1.5)que no requiere diferenciabilidad es regresar la ley de conservación (2.1.4). Con el fin de reducir la complejidad de u, suponemos que algunas de sus derivadas pertenecen a una función prueba. En nuestro caso nuestras funciones pruebas son $\nu \in C^{\infty}(\mathbb{R} \times [0,\infty))$ con soporte compacto. Si multiplicamos por ν dentro de la integral en (2.1.4) sobre $\mathbb{R} \times [0,\infty)$ se tiene

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \nu(x,t) \left[u_t(x,t) + f(u(x,t))_x \right] dx dt = 0.$$

Integrando por partes obtenemos

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty u\nu_t + f(u)\nu_x \, dx \, dt + \int_{-\infty}^\infty u_0(x)\nu(x,0) \, dx = 0.$$
 (2.1.12)

Definición 2.1.1. Decimos que u es una solución débil de (2.1.6) si satisface (2.1.12) para toda $\nu \in C^{\infty}(\mathbb{R} \times [0, \infty))$ con soporte compacto.

Nótese que bajo esta definición, no es necesario ni siquiera que u sea continua, sólo necesitamos que las integrales tengan sentido. Además es fácil ver que cualquier solución clásica es solución débil. En este sentido, se puede pensar a las soluciones débiles como una extensión de soluciones clásicas.

En el caso de soluciones discontinuas consideramos una solución débil de la ecuación (2.1.5):

$$\int \int_{\Omega} u\nu_t + f(u)\nu_x \, dxdt = 0, \qquad (2.1.13)$$

para todo ν función suave de soporte compacto en un dominio acotado Ω . Ahora, considerando que la solución u tiene una discontinuidad a lo largo de una curva suave $\alpha(t)$ en la región espacio-tiempo Ω , denotamos por Ω_1 y Ω_2 las subregiones de Ω a la derecha y a la izquierda de la curva α respectivamente. Reescribimos (2.1.13) como sigue:

$$\int \int_{\Omega_2} u\nu_t + f(u)\nu_x \, dx dt = -\int \int_{\Omega_1} u\nu_t + f(u)\nu_x \, dx dt.$$

Usando la identidad de Green en la ecuación anterior, se tiene que

$$\int_{\alpha} -u^{-}\nu \, dx - f(u^{-})\nu \, dt = \int_{\alpha} -u^{+}\nu \, dx - f(u^{+})\nu \, dt.$$
 (2.1.14)

donde $u^- := \lim_{x \to \alpha(t)^-} u(x,t) \ge u^+ := \lim_{x \to \alpha(t)^+} u(x,t)$. Reescribiendo esta igualdad

queda

$$\int_{\alpha} \nu \Big(- [u^+ - u^-] \, dx + [f(u^+) - f(u^-)] \, dt \Big) = 0.$$

Dado que la función ν es arbitraria, entonces

$$(u^{+} - u^{-})\frac{dx}{dt} = f(u^{+}) - f(u^{-})$$

Denotamos como

$$s = \frac{f(u^+) - f(u^-)}{u^+ - u^-} \tag{2.1.15}$$

a la velocidad de salto de la discontinuidad $\alpha(t)$ o también conocida como la **condi**ción de Rankine-Hugoniot.

Otro punto importante a resaltar es que a pesar de que este nuevo concepto de solución incluye discontinuidades, puede haber varias funciones u que satisfagan (2.1.12), por lo que la unicidad de solución está comprometida con esta formulación. Es por ello, que otra condición deberá ser impuesta si buscamos la unicidad.

Se busca añadir una condición adicional para elegir una única solución que sea estable bajo perturbaciones (en la condición inicial o por pequeñas cantidades de viscosidad), esta es conocida como **condición de entropía** [30, cap 3.8]:

Definición 2.1.2. Una discontinuidad con velocidad de choque s definida por (2.1.15) satisface la condición de entropía si

$$\frac{f(u) - f(u^{-})}{u - u^{-}} > s > \frac{f(u) - f(u^{+})}{u - u^{+}},$$
(2.1.16)

para todo u entre $u^- y u^+$.

En la próxima sección planteamos un problema de Cauchy particular para la ecuación de advección en el que se puede obtener la solución para ciertos casos.

2.1.3. Problema de Riemann

La ley de conservación (2.1.5) junto con una condición inicial definida por una función constante a pedazos es conocido como el problema de Riemann, para más detalles ver [30]. Para la ecuación de Burgers el problema de Riemann es

$$u_t + uu_x = 0,$$

$$u_0(x) = \begin{cases} u^- & \text{si } x < 0, \\ u^+ & \text{si } x > 0. \end{cases}$$
(2.1.17)

En esta sección estudiaremos su solución dependiendo de los valores de u^- y u^+ .

Caso $u^- > u^+$. En este caso, tenemos una única solución débil

$$u(x,t) = \begin{cases} u^{-} & \text{si } \frac{x}{t} < s, \\ u^{+} & \text{si } \frac{x}{t} > s. \end{cases}$$
(2.1.18)

donde $s = \frac{u^- + u^+}{2}$ calculada a partir de la condición (2.1.15) es la velocidad a la cual se mueve la discontinuidad. Las rectas características son $x(t) = x_0 + u^- t$ si $x_0 < 0$ y $x(t) = x_0 + u^+ t$ si $x_0 > 0$. No es difícil verificar que esta solución satisface la condición de entropía (2.1.16).

Caso $u^- < u^+$. En este caso hay infinitas soluciones débiles, en el ejemplo (2.1.1) encontramos una solución débil con $u^- = 0$ y $u^+ = 1$. Sin embargo, esta solución no cumple con la condición de entropía (2.1.16). Otra solución débil es la **onda de rarefacción**:

$$u(x,t) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0\\ \frac{x}{t} & \text{si } 0 < x < t\\ 1 & \text{si } x > t \end{cases}$$
(2.1.19)

Esta solución es estable a perturbaciones y es la solución que satisface la condición de entropía. En la Fig. 2.1.2 se ilustra como avanza con el tiempo una onda de rarefacción.



Fig. 2.1.2: En la gráfica de la izquierda se muestra la condición inicial. En la gráfica de la derecha se muestra la solución para la ecuación (2.1.17) a tiempo t = 1.

2.2. Ecuación de advección-difusión

En muchos problemas de aplicación no sólo es importante considerar cómo se mueve con cierta velocidad la propiedad u (densidad, energía, temperatura, ...), también resulta significativo considerar en el modelo como se difunde. En esta sección extendemos el modelo de advección derivado en la Sección 2.1 de este capítulo al incluir el efecto de difusión intrínseco en la materia.

Como vimos el transporte unidimensional de una función escalar u en un volumen de control Ω viene descrito por la **ley de conservación de la masa**

$$u_t + h(u)_x = 0, \qquad (x,t) \in \Omega$$
 (2.2.1)

donde h es la función flujo. Si queremos incluir la difusión que está dada por la misma materia, mediante la **ley de Fourier-Fick** redefinimos la función flujo como sigue:

$$h(u) = vu - Du_x, \tag{2.2.2}$$

donde v es la velocidad del fluido y D es el coeficiente de difusión del material. Podemos escribir la igualdad anterior de manera más general de la forma

$$h(u) = f(u) - k(u)u_x, (2.2.3)$$

donde k(u) es la función flujo difusivo que depende de la solución u. Sustituyendo

(2.2.3) en (2.2.1) se obtiene la ecuación de advección -difusión generalizada:

$$u_t + f(u)_x = (k(u)u_x)_x.$$
(2.2.4)

Además si existe una función K tal que

$$K_u = k,$$

donde el subíndice u indica la derivada de K, entonces (2.2.4) se reescribe

$$u_t + f(u)_x = K(u)_{xx}$$

Esta forma generalizada de la ecuación de advección-difusión no es meramente una extensión matemática, sino que busca modelar comportamientos de la difusión no lineales que están presentes en diversos fenómenos de la naturaleza, como es el caso del transporte de fluidos en medios porosos (donde $K(u) = u^m, m > 1$) o materiales que se difunden de manera no lineal.

Con esta generalización, la dinámica del problema advectivo-difusivo es más compleja, ya que podemos tener regiones de advección dominante o difusión degenerada, es decir, que la difusión se anule en al menos un valor de u. Cuando k(u) es no degenerado, esto es, k(u) > 0, y las funciones u_0 , f(u) y k(u) son suficientemente suaves se sabe que (2.2.4) admite una única solución clásica [11]. En el caso de advección dominante o si el término de difusión es degenerado, entonces se deben buscar soluciones débiles [11].

A continuación trabajamos la solución del problema de Cauchy

$$u_t + f(u)_x = (k(u)u_x)_x, \quad \Omega \times (0,T), \quad k(u) \ge 0,$$

$$u(x,0) = u_0(x)$$

(2.2.5)

en el caso cuando existe una única solución suave y en el caso degenerado donde se buscan soluciones débiles.

2.2.1. Solución clásica

Se tiene solución única clásica $(u \in C^1)$ si la condición inicial es suave y asumiendo suficiente regularidad de las funciones $f(u) \neq k(u)$, ver [11]. En este caso, para casos particulares es posible obtener la solución analítica del problema (2.2.5).

A continuación (ya que resulta de interés para este trabajo) damos la solución del problema de advección-difusión para la ecuación de Burgers viscosa:

$$u_t + uu_x = \epsilon u_{xx}, \quad \epsilon > 0;$$

$$u(x,0) = u_0(x). \tag{2.2.6}$$

Usamos la transformación de Cole-Hopf [29], la cual mediante un cambio de variable nos permite transformar (2.2.6) en la ecuación de calor o difusión. Dicha transformación es:

$$u = -2\epsilon \frac{r_x}{r}.\tag{2.2.7}$$

Al calcular en la igualdad anterior tenemos que

$$u_t = \frac{2\epsilon(r_t r_x - r r_{xt})}{r^2}, \quad u u_x = \frac{4\epsilon^2 r_x (r r_{xx} - r_x^2)}{r^3}$$
(2.2.8)

у

$$\epsilon u_{xx} = -\frac{2\epsilon^2 (2r^3 - 3rr_x r_{xx} + r^2 r_{xxx})}{r^3}.$$
 (2.2.9)

Se puede verificar que si r satisface la ecuación $r_t - \epsilon r_{xx} = 0$, entonces las expresiones anteriores satisfacen la ecuación de Burgers viscosa. Así pues, resolver la ecuación de Burgers se reduce a resolver la ecuación de calor usando la relación (2.2.7). Para tener la transformación completa, falta relacionar las condiciones iniciales de la ecuación (2.2.6). Podemos escribir (2.2.7) como

$$u = -2\epsilon (\log r)_x$$

Así, si ponemos

$$r(x,t) = \exp\left(-\int_0^x \frac{u(y,t)}{2\epsilon} dy\right),$$

se satisface (2.2.7). En particular,

$$r_0(x) = r(x,0) = \exp\left(-\int_0^x \frac{u_0(y)}{2\epsilon} dy\right).$$

Por otro lado, la solución al problema de Cauchy para la ecuación de calor:

$$r_t - \epsilon r_{xx} = 0,$$

$$r_0(x) = \exp\left(-\int_0^x \frac{u_0(y)}{2\epsilon} dy\right)$$

 \mathbf{es}

$$r(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\epsilon t}} \int_{-\infty}^{\infty} r_0(s) \exp\left(-\frac{(x-s)^2}{4\epsilon t}\right) ds, \qquad (2.2.10)$$

y se puede llegar a ella de diferentes formas, veáse por ejemplo [12, cap 3.2]. Finalmente, usando (2.2.7) y (2.2.10), concluimos que la solución a (2.2.6) es

$$u(x,t) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x-s}{t} r_0(s) \exp\left(-\frac{(x-s)^2}{4\epsilon t}\right) ds}{\int_{-\infty}^{\infty} r_0(s) \exp\left(-\frac{(x-s)^2}{4\epsilon t}\right) ds}.$$
(2.2.11)

2.2.2. Solución débil y entrópica

Aquí extendemos los conceptos de solución débil y entrópica que se vieron para el problema advectivo (2.1.6). Sea la ecuación de advección-difusión:

$$u_t + f(u)_x = (k(u)u_x)_x, \qquad (x,t) \in \mathbb{R} \times [0,T]$$
 (2.2.12)

con condición inicial $u(x,0) = u_0(x)$ suave. Multiplicando e integrando la ecuación (2.2.12) por una función de soporte compacto $\nu \in C_0^1(\mathbb{R} \times [0,T])$ como sigue:

$$\int_{0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}} \nu u_{t} + \nu f(u)_{x} - \nu (k(u)u_{x})_{x} dx dt = 0.$$
 (2.2.13)

Intercambiando la integral en el primer término e integrando por partes en la ecuación anterior se tiene

$$\int_{\mathbb{R}} \left[\nu u \Big|_{t=0}^{t=\infty} - \int_{0}^{\infty} \nu_{t} u dt \right] dx$$
$$+ \int_{0}^{\infty} \left[\nu (f(u) - k(u)u_{x}) \Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \nu_{x} (f(u) - k(u)u_{x}) dx \right] dt = 0.$$

Dado que ν es de soporte compacto, ν se anula en los valores $x = \infty$ y $x = -\infty$. Así, la ecuación anterior se escribe

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} \left[\nu_t u + \nu_x (f(u) - k(u)u_x) \right] dx dt = -\int_0^\infty \nu(x, 0) u(x, 0) dx.$$
 (2.2.14)

Sea el problema de Cauchy para la ecuación (2.2.12) con condición inicial suave, se dice que $u(x,t) \in L^1(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ es una **solución débil** para el mismo, si la igualdad anterior (2.2.14) es cierta para cada $\nu \in \mathbb{C}^1_0(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$.

Observación 1. El concepto de solución débil también se puede generalizar al caso en que el cual la condición inicial está definida por partes, entonces se le pide que sea de variación acotada [27].

De manera análoga al caso advectivo, se deriva la condición de salto que debe cumplir un choque de la ecuación (2.2.12). De este modo, la velocidad de la curva de choque, s, por lo general está determinada por los saltos en ambas funciones f(u) y $K(u)_x$. La velocidad del salto se define como [40]:

$$s = \frac{f(u^+) - f(u^-) - \left(\lim_{x \to x_0^+} K(u)_x - \lim_{x \to x_0^-} K(u)_x\right)}{u^+ - u^-}$$
(2.2.15)

Y de igual forma la condición de entropía requiere que se cumpla la desigualdad

$$\frac{f(u^+) - f(c) - \lim_{x \to x_0^+} K(u)_x}{u^+ - c} \le s \le \frac{f(u^-) - f(c) - \lim_{x \to x_0^-} K(u)_x}{u^+ - c}$$
(2.2.16)

para todo $c \in (u^-, u^+)$.

La unicidad y estabilidad de soluciones entrópicas para el caso degenerado del problema (2.2.5) fue probado en [27].

3. MÉTODOS NUMÉRICOS

Por lo general resulta imposible en la mayoría de los casos obtener la solución analítica de ecuaciones de advección y advección-difusión no lineales, por lo que se recurre a la resolución numérica de estas ecuaciones. En este capítulo presentamos los métodos básicos en diferencias finitas para la resolución de estas ecuaciones en una dimensión.

Sea el problema de Cauchy

$$u_t + h(u)_x = 0, \quad x \in [a, b], \ t \in [0, T]$$

 $u(x, 0) = u_0(x)$ (3.0.1)

donde h(u) = f(u) en el caso advectivo y $h(u) = f(u) - k(u)u_x$ en el caso de advección-difusión. Tomamos una partición uniforme del dominio espacio-tiempo eligiendo $h = \Delta x$ y $k = \Delta t$ los tamaños de paso de la partición. Definimos la malla discreta de puntos (x_j, t_n) con $x_j = jh$ para j = 0, 1, ... y $t_n = nk$ para n = 0, 1, 2, ...Definimos los nodos intermedios de la malla como $x_{j+1/2} = x_j + h/2 = (j + 1/2)h$. Denotamos a los valores de la solución real en la malla por $u_j^n = u(x_j, t_n)$ y a la solución aproximada por algún método en diferencias finitas por $U_j^n = u(x_j, t_n)$.

El método en diferencias finitas está basado en la sustitución de las derivadas por una aproximación obtenida de la expansión de Taylor de la solución u(x,t) en la variable de diferenciación. A continuación damos algunos de las aproximaciones más usuales para cada variable:

- Aproximación de la primera derivada.
 - (i) Diferencias finitas adelantadas:

$$U_x(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j+1}^n - U_j^n}{h}; \quad U_t(x_j, t_n) \approx \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{k}.$$

(ii) Diferencias finitas atrasadas:

$$U_x(x_j, t_n) \approx \frac{U^n - U_{j-1}^n}{h}$$

(iii) Diferencias finitas centradas:

$$U_x(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2h}$$

• Aproximación de la segunda derivada.

$$U_{xx}(x_j, t_n) \approx \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2}.$$

El orden de exactitud de las aproximaciones viene determinado de acuerdo al orden del error de truncamiento de la serie de Taylor. En los casos anteriores, las aproximaciones a la primera derivada (i) y (ii) son de primer orden de exactitud y (iii) de segundo orden de exactitud; la aproximación a la segunda derivada es de segundo orden de exactitud.

3.1. Ecuación de advección

Resolver analíticamente la ecuación de advección no lineal

$$u_t + f(u)_x = 0 (3.1.1)$$

conlleva dificultades adicionales que las que se presentan en el caso lineal. El caso numérico no es la excepción, algunos de los problemas que surgen son que el método numérico puede converger a una solución débil no deseable (que no satisface la condición de entropía) o que el método puede converger a una función que no es solución débil de la ecuación original. El hecho de que se converja a una solución débil equivocada no es tan sorprendete, ya que no hay una única solución débil. Que se converja a una función que no es solución débil es más complicado, pero ocurre ya que es posible derivar leyes conservativas que son equivalentes para funciones suaves que tienen diferentes soluciones débiles. Por ejemplo, las ecuaciones

$$u_t + \left(\frac{1}{2}u^2\right)_x = 0 \tag{3.1.2}$$

у

$$u_t + \left(\frac{2}{3}u^3\right)_x = 0\tag{3.1.3}$$

tienen las mismas soluciones suaves, pero diferentes soluciones débiles.

3.1.1. Métodos conservativos

Para evitar que la sucesión de aproximaciones de un cierto método numérico que aproxima a la solución de la ecuación (3.1.1) converja a una función que no es solución débil se debe escribir el método en su forma conservativa [30]. A continuación presentamos este concepto y damos algunos de los métodos numéricos estándar en su forma conservativa.

Definición 3.1.1. Un método numérico es **conservativo** si se puede escribir en la forma

$$U_{j}^{n+1} = U_{j}^{n} - \frac{k}{h} \left(F(U_{j-p}^{n}, U_{j-p+1}^{n}, ..., U_{j+q}^{n}) - F(U_{j-p-1}^{n}, U_{j-p}^{n}, ..., U_{j+q-1}^{n}) \right)$$
(3.1.4)

para alguna función F.

En particular, durante este trabajo la función F sólo dependerá de dos argumentos de modo que (3.1.4) tiene la forma

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} (F(U_j^n, U_{j+1}^n) - F(U_{j-1}^n, U_j^n)).$$
(3.1.5)

Para esclarecer por qué este tipo de métodos convergen a una solución débil definimos a U_j^{n+1} como la aproximación de u_j^{n+1} en la celda $(x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times (t_{n-1/2}, t_{n+1/2})$ como sigue:

$$U_j^{n+1} \approx \frac{1}{h} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t_{n+1}) dx$$

Sabemos que una solución débil satisface la forma integral (2.1.3), por lo que

$$\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t_{n+1}) dx = \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(x, t_n) dx - \left[\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{j-1/2}, t)) dt \right].$$

Dividiendo por h,

$$\bar{u}_{j}^{n+1} = \bar{u}_{j}^{n} - \frac{1}{h} \left[\int_{t_{n}}^{t_{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt - \int_{t_{n}}^{t_{n+1}} f(u(x_{j-1/2}, t)) dt \right].$$
(3.1.6)

Comparando (3.1.6) con (3.1.5), vemos que F debe definirse como

$$F(U_j^n, U_{j-1}^n) = \frac{1}{k} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(x_{j+1/2}, t)) dt.$$
(3.1.7)

De esta forma el método numérico cumple la forma integral.

A continuación presentamos algunos métodos conservativos estándar para la ecuación de advección no lineal. (3.1.1):

• Método Upwind:

$$F(U_j^n, U_{j+1}^n) = f(U_j^n) \text{ si } f' \ge 0, \quad F(U_j^n, U_{j+1}^n) = f(U_{j+1}^n) \text{ si } f' < 0.$$
(3.1.8)

Método Lax-Wendroff:

$$F(U_j^n, U_{j+1}^n) = \frac{k}{2h} \left[f'(U_j^n + U_{j+1}^n) (f(U_{j+1}^n) - f(U_j^n)) \right] + \frac{1}{2} (f(U_{j+1}^n) - f(U_j^n)).$$
(3.1.9)

Método Lax-Friedrichs:

$$F(U_j^n, U_{j+1}^n) = \frac{h}{2k}(U_j^n - U_{j+1}^n) + \frac{1}{2}(f(U_j^n) + f(U_{j+1}^n)).$$
(3.1.10)

De acuerdo a las aproximaciones usadas (adelantadas, atrasadas, centradas) para las derivadas parciales se tiene que: el método Upwind es de primer orden de exactitud en espacio y tiempo y los métodos de Lax-Wendroff y Lax-Friedrichs son de segundo orden en espacio y primer orden en el tiempo.

Veamos un ejemplo donde comparamos la solución numérica obtenido por el método Upwind en su forma conservativa (3.1.8) y en su forma no conservativa.

Ejemplo 3.1.1. Para un problema de Riemann con un flujo Burgers $f(u) = u^2/2$ el método Upwind no conservativo se escribe como sigue:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} U_j^n (U_j^n - U_{j-1}^n);$$
(3.1.11)

teniendo en cuenta que $f_u = u y$ considerando como condición inicial

$$u_0(x) = \begin{cases} 1.2 & x < 0, \\ 0.4 & x > 0. \end{cases}$$

Las aproximaciones numéricas por el método Upwind no conservativo (3.1.11) y el no conservativo (3.1.8) al tiempo $t = 1 \operatorname{con} h/k = 0.5 y h = 0.0025$ se ilustran en la Fig. 3.1.1. Vemos que el método conservativo aproxima bien a la solución original, mientras que el no conservativo cambia el tiempo de choque, desplazando la solución.



Fig. 3.1.1: En la gráfica de la izquierda se muestra la solución numérica por el método Upwind no conservativo en t = 1 y en la gráfica de la derecha por el Upwind en la forma conservativa.

Además de que el método sea conservativo, hay otras propiedades cualitativas de igual importancia para que la sucesión de aproximaciones converja a una solución débil del problema, estas se definen a continuación.

3.1.2. Métodos limitadores de flujo o "flux-limiter"

Iniciando con un poco de historia, uno de los métodos limitador de flujo más antiguos es el método "flux-corrected transport" de Boris y Book [26]. Métodos híbridos que se formulan como combinación de dos métodos básicos (Upwind, Lax-Wendroff, etc.) fueron desarrollados por Harten y Zwas [19]. Más recientemente, una gran variedad de métodos similares han sido propuestos, algunos de ellos se derivan en los trabajos [18, 34].

Se sabe que los métodos clásicos de orden uno, como el método Upwind, aproximan mejor a la solución del problema (3.1.1) en zonas discontinuas. Por otro lado, los métodos clásicos de segundo orden, como el método Lax-Wendroff, presentan falsas oscilaciones cerca de una discontinuidad. Estas oscilaciones son indeseables ya que muchas veces se propagan y suelen desestabilizar la solución. Sin embargo, en zonas suaves de la solución, los métodos de orden dos tienen una mejor aproximación que los de orden uno. La idea principal en la que se basan los métodos "flux-limiter" es resolver por un flujo numérico de orden uno cerca de las discontinuidades y mantener el flujo numérico de orden dos en regiones continuas de la solución, por lo que su formulación resulta en una combinación pesada de ambos, dicho peso debe ser una función que dependa de la misma solución y su fin es decidir a que método cargarle el peso en función de la suavidad local.

En este sentido, empezamos eligiendo un flujo de orden mayor $F_H(U; j)$ (por ejemplo, el flujo de Lax-Wendroff) que funcione bien en regiones suaves, y un flujo de orden menor $F_L(U; j)$ (por ejemplo, el flujo Upwind) que funcione bien cerca de las discontinuidades. Intentamos mezclar estos dos flujos en uno solo de forma que el flujo F se reduzca a F_H en regiones suaves y a F_L cerca de discontinuidades. La ecuación que define a un limitador de flujo es:

$$F(U;j) = (1 - \Psi(U;j)) F_L(U;j) + \Psi(U;j) F_H(U;j)$$
(3.1.12)

donde $\Psi(U; j)$ es el limitador. Si las aproximaciones U son suaves cerca de U_j entonces $\Psi(U; j)$ se debe aproximar a uno mientras que alrededor de una discontinuidad queremos que $\Psi(U; j)$ se aproxime a cero. Para más detalle, veáse por ejemplo [30].

3.1.3. Convergencia

En esta sección damos los conceptos de consistencia y de variación total acotada necesarios para que una aproximación numérica en forma conservativa converja a una solución débil del problema de advección (3.0.1).

Definición 3.1.2. Un método numérico conservativo de la forma (3.1.5) es **consis**tente si:

1. El flujo numérico F se reduce al flujo original f para el caso constante, es decir, si $u(x,t) = \overline{u}$ entonces por (3.1.7) esperamos que

$$F(\bar{u},\bar{u}) = f(\bar{u}) \quad \forall \bar{u} \in \mathbb{R}.$$
(3.1.13)

 También requerimos algo de suavidad, como los dos argumentos de F se aproximan a un valor en común ū, el valor de F se aproxima a f(ū) suavemente. Para la consistencia es suficiente que F sea Lipchitz en cada variable. Decimos que F es localmente Lipchitz si existe una constante K ≥ 0 tal que

$$|F(x,y) - f(\bar{u})| \le K \max(|x - \bar{u}|, |y - \bar{u}|)$$
(3.1.14)

para todo x, y con $|x - \bar{u}| y |y - \bar{u}|$ suficientemente pequeño. Y F es Lipchitz si es localmente Lipchitz en cada punto.

Si el flujo F depende de más de dos argumentos decimos que el método es consistente si $F(\bar{u}, \bar{u}, \dots, \bar{u}) = f(\bar{u})$ y la condición de Lipchitz requiere la existencia de una constante K tal que

$$|F(U_{j-p},\ldots,U_{j+q}) - f(\bar{u})| \le K \max_{-p \le i \le q} (|U_{j+1} - \bar{u}|).$$
(3.1.15)

Notación 3.1.1. Escribimos $F(U^n; j) = F(U_{j-p}, \ldots, U_{j+q})$ para un flujo que toma p + q + 1 valores "centrados" en j.

Definición 3.1.3. Sea

$$U^n(x) = \sum_j I_j(x) U_j^n$$

donde $I_j(x)$ es la función indicadora en la celda $(x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times (t_{n-1/2}, t_{n+1/2})$. Definimos la **variación total** de una función U^n como

$$V(U^{n}) = \sup_{k} \sum_{k=1}^{N} |U^{n}(x_{j}) - U^{n}(x_{j-1})|$$
(3.1.16)

donde el supremo se toma sobre todas las subdivisiones de la recta $-\infty = x_0 < x_1 < \cdots < x_N = \infty$. Obsérvese que para que la variación total sea finita, U^n se debe aproximar a valores constantes cuando $x \to \pm \infty$. Decimos que es de **variación** total decreciente o **TVD** si se cumple

$$V(U^{n+1}) \le V(U^n)$$
 $n = 1, 2, ...$

Ahora, definimos la función constante a pedazos $U_h(x,t)$ en $\mathbb{R} \times [0,+\infty)$ por

$$U_h(x,0) = U^0(x) \qquad \forall x \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2})$$
(3.1.17)

у

$$U_h(x,t) = U^n(x) \qquad \forall (x,t) \in [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}) \times [t_n, t_{n+1}).$$
(3.1.18)

Definición 3.1.4. Decimos que un esquema numérico conservativo es de variación total acotada si existe un R > 0 tal que

$$V(U_h(.,t)) \le R \qquad \forall t \in [0,+\infty), h > 0.$$
 (3.1.19)

Otra propiedad importante que puede cumplir un método numérico es la monotonía: Un método se dice ser **monótono** si cumple que

$$U_j^n \ge U_{j+1}^n \Rightarrow U_j^{n+1} \ge U_{j+1}^{n+1} \qquad \forall j$$

Es claro que si un método numérico cumple ser TVD entonces es de variación total acotada, ya que siempre estará acotada por el supremo de su condición inicial; y si un método es monótono es TVD.

Teorema 3.1.1. [**Teorema de Lax-Wendroff**] Dado h > 0, sea U_h la aproximación numérica (3.1.18) del problema de advección (3.0.1) calculada con un método conservativo y consistente. Sea $U_h(x, 0)$ definida en (3.1.17). Supongamos que existe una función $u \in (L^{\infty}(\mathbb{R} \times [0, +\infty)) \cap BV(\mathbb{R} \times [0, +\infty)))$ tal que

$$\int_0^\infty \int_a^b |U_h(x,t) - u(x,t)| dx dt \to 0 \quad cuando \quad h \to 0 \tag{3.1.20}$$

y que $U_h(\cdot, t)$ es de variación total acotada. Entonces u(x, t) es una solución débil del problema de Cauchy para la ecuación (3.0.1).

Para ver la demostración del Teorema 3.1.1, consúltese [30].

El teorema de Lax- Wendroff nos dice que si convergemos a una función u(x,t)mientras la malla es refinada por una secuencia $k_l, h_l \rightarrow 0$ para l = 1, 2, ..., entonces esta función será en efecto una solución débil de la ecuación de advección no lineal. Hay que notar que este teorema no nos garantiza que tendremos convergencia, nos dice que si llegamos a converger a una función, esta será solución débil. Sin embargo, este sigue siendo un teorema muy útil que nos da confianza en las soluciones calculadas. En la práctica, no se considera una sucesión de aproximaciones, sino una aproximación con la malla fija. Si la solución se ve razonable y parece que resuelve bien los problemas de discontinuidad, podemos creer que es una buena aproximación a alguna solución débil.

3.2. Ecuación de advección-difusión

En esta sección vamos a extender los métodos propuestos en la sección anterior para un problema de Cauchy de advección-difusión generalizado:

$$u_t + f(u)_x = (k(u)u_x)_x, \quad \Omega \times (0,T), \quad k(u) \ge 0,$$

$$u(x,0) = u_0(x)$$
(3.2.1)

donde $u_0(x)$, f(u) y k(u) son las funciones: condición inicial, el flujo advectivo y el flujo difusivo respectivamente.

Dado que podemos tener soluciones discontinuas si consideramos k(u) degeneradas, o funciones discontinuas en la condición inicial, o en los coeficientes del problema (3.2.1), entonces los métodos numéricos deben converger a soluciones débiles de nuestro problema. A continuación extendemos la formulación conservativa para aproximaciones numéricas de la ecuación de advección-difusión generalizada, la cual es válida para el caso de soluciones continuas, ya que una solución continua también es solución débil.

3.2.1. Métodos conservativos

Para derivar la formulación conservativa numérica del problema (3.2.1) primero reescribimos la ecuación diferencial de advección-difusión en forma conservativa:

$$u_t + f(u)_x = K(u)_{xx}, \qquad K(u) = \int_0^u k(s)ds.$$
 (3.2.2)

Definimos los operadores de las diferencias finitas atrasadas y adelantadas de una función W como sigue:

$$D_B W_j = \frac{1}{h} (W_j - W_{j-1}); \qquad D_F W_j = \frac{1}{h} (W_{j+1} - W_j).$$

Un método numérico que aproxima la solución de (3.2.1) se dice formulado en forma conservativa si viene definido como sigue:

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \frac{1}{\Delta t} D_B \Big(F(U_j^n, U_{j+1}^n) - D_F K(U_j^n) \Big).$$
(3.2.3)

Obsérvese que el método (3.2.3) es conservativo, ya que desarrollando el segundo término del lado derecho tenemos que

$$D_B \Big(F(U_j^n, U_{j+1}^n) - D_F K(U_j^n) \Big) = \frac{1}{h} \Big((F(U_j^n, U_{j+1}^n) - D_F K(U_j^n)) \\ - (F(U_{j-1}^n, U_j^n) - D_F (K(U_{j-1}^n)) \Big) \\ = \frac{1}{h} \Big(G(U_j^n, U_{j+1}^n) - G(U_{j-1}^n, U_j^n) \Big)$$
(3.2.4)

donde $G(U_j^n, U_j^{n+1}) = F(U_j^n, U_j^{n+1}) - D_F K(U_j^n)$, de manera que se puede seguir los mismos cálculos que en el caso advectivo para $G(U_j^n, U_j^{n+1})$ como función flujo promedio en una celda como en (3.1.7). **Ejemplo** 3.2.1. En la Figura 3.2.1 se muestra la solución numérica obtenida por un método en forma conservativa y un método en forma no conservativa para el problema (3.2.1) con flujo advectivo $f(u) = \frac{1}{4}u^2$ y flujo difusivo k(u) = 0 si $u \in [0, 0.5], 10u - 5$ si $u \in (0.5, 0.6)$ y 1 si $u \in [0.6, 1]$. Este ejemplo y la gráfica están sacados del trabajo [11]. Podemos observar como la velocidad del choque es aproximada diferente por métodos conservativos y no conservativos, al igual que ocurría en el caso advectivo.



Fig. 3.2.1: Solución obtenida por un esquema conservativo en línea continua, solución obtenida por un esquema no conservativo en línea discontinua y condición inicial con línea punteada. Se grafican varios tiempos $T_1 = 0.625$, $T_2 = 0.25$ y $T_3 = 1$.

Observación 2. El estudio de la convergencia de métodos numéricos conservativos a una solución débil del problema (3.2.1) actualmente es un problema en estudio. En los últimos años se han obtenidos resultados para métodos conservativos tipo Upwind o monótonos [11, 25]. Una condición necesaria para estos métodos es

$$\max |f_u| \frac{\Delta t}{h} + 2 \max |k(u)| \frac{\Delta t}{h^2} < 1,$$

la cual es conocida como la condición CFL (Courant-Friedrichs-Lewy).

3.2.2. Método limitador de flujo Switch

En esta sección, presentamos el método limitador de flujo Switch desarrollado en [23] y que va a ser una parte fundamental del método que proponemos en el siguiente capítulo. Para el problema (3.2.1) se propone el siguiente esquema conservativo:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{k}{h} (G_{j+1/2} - G_{j-1/2}), \qquad (3.2.5)$$

para el que definimos el flujo numérico, $G_{j+1/2} = G(U_j, U_{j+1})$, por el siguiente limitador de flujo:

$$G_{j+1/2} = \frac{1}{2} \varphi_{j+1/2}^{n} F_{j+1/2}^{UP} + \frac{1}{2} \left(2 - \varphi_{j+1/2}^{n} \right) \left[F_{j+1/2}^{RI} + a_{j+1/2}^{n} \left(\phi_{j}^{n+1/2} - \frac{1}{2} \right) \right] \\ \left(\Delta_{j+1} U^{n} - \frac{k}{h} \left[(\lambda_{j}^{+} f(U_{j+1}^{n}) - \lambda_{j}^{-} f(U_{j+1}^{n})) - (\lambda_{j}^{+} f(U_{j}^{n}) - \lambda_{j}^{-} f(U_{j}^{n})) \right] \right] \\ - D_{F} K(U_{j}^{n}).$$

$$(3.2.6)$$

donde $a_{j+1/2}^n = f'(U_{j+1/2}^n)$ es la velocidad advectiva numérica, $F_{j+1/2}^{RI} = f(U_{j+1/2}^{n+1/2})$ es el flujo Richtmyer y $F_{j+1/2}^{UP} = \lambda_j^+ f(U_j^n) - \lambda_j^- f(U_{j+1}^n)$ es el flujo Upwind con

$$U_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{U_j^n + U_{j+1}^n}{2} - \frac{k}{2h} \left(f(U_{j+1}^n) - f(U_j^n) \right)$$

у

$$U_j^{n+1/2} = U_j^n - \frac{k}{2h} \left(\lambda_j^+ (f(U_j^n) - f(U_{j-1}^n) - \lambda_j^- (f(U_{j+1}^n) - f(U_j^n)) \right)$$

denotando $\Delta_{j+1}U^n = U_{j+1}^n - U_j^n$ y los coeficientes signo por $\lambda_j^+ = \max\{f_u(U_j^n)/|f_u(U_j^n)|, 0\}$ y $\lambda_j^- = \min\{f_u(U_j^n)/|f_u(U_j^n)|, 0\}$. Las funciones $\phi_j^{n+1/2}$ y $\varphi_{j+1/2}^n$ se definen como sigue:

1. Función limitadora: $\phi(\theta_j^{n+1/2})$

$$\phi_j^{n+1/2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan\left(|\theta_j^{n+1/2}| - 1\right).$$

2. Función peso: $\varphi_{j+1/2}^n(\theta_j^n)$

$$\varphi_{j+1/2}^{n} = \begin{cases} 0 & \text{si } |\theta_{j}^{n} - 1| < \epsilon \text{ and } (U_{j+1}^{n} - U_{j}^{n}), (U_{j}^{n} - U_{j-1}^{n}) > 0, \\ 2 & \text{otra forma,} \end{cases}$$
(3.2.7)
donde

$$\theta_j^n = \begin{cases} (U_j^n - U_{j-1}^n) / (U_{j+1}^n - U_j^n) & \text{si } a_j^n \ge 0, \\ (U_{j+2}^n - U_{j+1}^n) / (U_{j+1}^n - U_j^n) & \text{si } a_j^n < 0, \end{cases}$$
(3.2.8)

siendo ϵ un número positivo, que se toma $\epsilon \in (0, 1/4)$.

Consistencia, estabilidad y convergencia

En [23], se demuestra los siguientes resultados sobre consistencia y convergencia del método (3.2.5), (3.2.6).

Proposición 3.2.1. El método numérico Switch viscoso (3.2.5)-(3.2.6) es consistente con la ley de conservación ya que G(u, u) = g(u) y cumple la condición Lipchitz

$$\left| G(U_{j}^{n}, U_{j+1}^{n}) - g(u) \right| \le L \max\left(|U_{j}^{n} - u|, |U_{j+1}^{n} - u| \right)$$
(3.2.9)

 $para g(u) = (f(u) - K(u)_x).$

Teorema 3.2.1. El esquema Switch viscoso (3.2.5)-(3.2.6) es TVD-estable si

$$\frac{1}{1-|\sigma|} \le Re$$

 $con |\sigma| \leq 1$ en el caso de flujos convexos y con $1/2 < |\sigma| \leq 1$ en el caso de flujos no convexos, denotando por $\sigma = \max_{j,n} |a_j^n \frac{k}{h}|$ y $Re = \max_{j,n} |a_j^n \frac{k}{\epsilon h^2}|$ el número local de Reynolds.

Con estos resultados, se puede asegurar convergencia del método Switch viscoso a una solución débil para la ley de conservación (3.2.1) siempre y cuando se cumplan las condiciones de la proposición 3.2.1 y el teorema 3.2.1. Esto se sigue del Teorema de Lax-Wendroff.

En el trabajo [23] se muestra la eficiencia del método para varios problemas estándar con flujos convexos y no convexos, y se realiza una comparación con algunos de los métodos limitadores de flujo más conocidos. A continuación, mostramos un ejemplo para la ecuación de Burgers viscosa. Ejemplo 3.2.2. Sean los problemas de Riemann:

$$u_t + \left(\frac{u^2}{2}\right)_x + 0.005 \, u_{xx} = 0, \tag{3.2.10}$$
$$u_0^1(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0, \\ 0 & \text{si } x > 0; \end{cases} \qquad u_0^2(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \\ 1 & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

La ecuación anterior con la condición inicial u_0^1 tiene como solución una onda de rarefacción y con u_0^2 tiene como solución un choque que se transporta a lo largo de tiempo con velocidad u. Para simular ambas soluciones usamos el método (3.2.5)-(3.2.6) con h = 0.01, k = h/4; ambos problemas al tiempo t = 0.25 verificando las condiciones de convergencia:

$$|\sigma| = \frac{1}{4} \le 1, \qquad Re > \frac{1}{1 - 1/4} = \frac{3}{4}$$



Fig. 3.2.2: Soluciones para la ecuación (3.2.10) al tiempo t = 0.25 con condición inicial $u_0^1(x) \ge u_0^2(x)$, respectivamente.

Con el fin de probar el método Switch con un problema degenerado, calculamos la solución del problema planteado en la Figura 3.2.1 usando el método limitador de flujo Switch en su forma conservativa (3.2.5)-(3.2.6). Si comparamos la Figura 3.2.1 con la Figura 3.2.3 observamos resultados similares.



Fig. 3.2.3: Soluciones obtenidas por el método limitador de flujo Switch para los tiempos T = 0.0625, T = 0.25 y T = 1.

4. APROXIMACIÓN DE LA ECUACIÓN DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN CON REACCIÓN ESTOCÁSTICA

En este capítulo se deriva la ecuación de advección-difusión con reacción estocástica con la que trabajaremos a partir de la ecuación determinista. Resulta de gran importancia tener un conocimiento previo de la ecuación continua no estocástica como el que se ha descrito en los capítulos anteriores. Además se desarrolla el método splitting flux-limiter Switch y se estudia numéricamente su convergencia y su eficiencia.

4.1. Ecuación de advección-difusión con reacción estocástica

Sea la ecuación de advección-difusión-reacción determinista unidimensional:

$$u_t + f(u)_x - K(u)_{xx} = h(\alpha_1, ..., \alpha_m, u), \quad (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T]$$
(4.1.1)

en términos de un conjunto de parámetros $\alpha_1, \dots, \alpha_m$, con $\alpha_j \in \mathbb{R}$ para cada $j = 1, \dots, m$ y considerando siempre funciones esaclares $f, K \neq h$. Como ya vimos esta ecuación modela la dinámica de un fenómeno de conservación. Los parámetros α 's pueden representar: la razón de crecimiento de una población, la tasa de muerte, velocidad en la que una enfermedad se esparce, etc. Realizando un estudio cualitativo y cuantitativo del sistema podemos obtener resultados sobre el fenómeno. Sin embargo, muchas veces los modelos deterministas no nos permiten tener un estudio realista del fenómeno, ya que en muchos casos existe cierta variabilidad entre los elementos del fenómeno, por ejemplo: el desarrollo de cierta enfermedad entre los individuos de una población puede variar dependiendo de la edad, genética, estilo de vida de cada individuo; el crecimiento o decrecimiento de una población puede estar

condicionada a la escasez o abundancia de alimento o a enfermedades mortales; el índice de la bolsa de valores son algunos ejemplos, los cuales afectarían al término de reacción.

Una forma de introducir esta aleatoriedad producida por el medioambiente es usando la **técnica de perturbación de parámetros** ver [16, 17], la cual nos permite transformar un modelo determinista en uno estocástico mediante el cambio de ciertos parámetros por otros que presenten ruido. Se considera que la tasa de crecimiento de una población, α , en un intervalo [t, t + dt) donde dt es un cambio infinitesimal de la variable t y redefinimos este coeficiente como

$$\alpha \nleftrightarrow \alpha + \sigma dW_t \tag{4.1.2}$$

donde $dW_t = W_{t+dt}$ es un incremento del movimiento Browniano (ver Apéndice A) y σ representa la variación ambiental incorporada en el sistema y lo que se asume es que la variación ambiental es un ruido blanco y que el crecimiento de la población se distribuye como una $N(\alpha dt, \sigma^2 dt)$. Entonces, introduciendo el nuevo parámetro (4.1.2) en la ecuación (4.1.1) se tiene

$$u_t + f(u)_x - K(u)_{xx} = h_1(\alpha, u) + h_2(\sigma, u, t) dW_t.$$

En la ecuación anterior suponemos independencia en los parámetros α y σ , por lo que nuestro objeto de estudio es la siguiente ecuación de advección-difusión con término de reacción estocástica:

$$u_t + f(u)_x - K(u)_{xx} = h_1(u) + h_2(u) \, dW_t, \tag{4.1.3}$$

donde se considera que f es una función suave, h_1 y h_2 son funciones Lipchitz y h_2 con soporte compacto. A continuación aproximaremos el problema de Cauchy asociado a (4.1.3) con condición inicial $u_0(x)$ determinista y de variación acotada.

A lo largo de este capítulo se trabaja en un espacio de probabilidad completo $(\Omega, \Lambda, P) \ge \{u(t)\}_{0 \le t \le T}$ un proceso estocástico con una filtración $\{\Lambda_t\}_{0 \le t \le T}$ que satisface las condiciones usuales tal que u(t) es $\{\Lambda_t\}$ -medible para cada t, para más detalles de estos conceptos consultar Apéndice A.

4.2. Método splitting

La técnica splitting de operadores fue introducida por Godunov en dinámica de gases [15] y fue extendida por varios autores como un método para analizar problemas multidimensionales. En nuestro caso, que trabajamos una ecuación unidimensional la usaremos para separar en dos subproblemas la ecuación (4.1.3).

Consideremos la ecuación parcial

$$u_t = A(u(x,t)) + B(u(x,t)),$$
(4.2.1)
$$u(x,0) = u_0(x),$$

donde A y B son operadores (no necesariamente lineales). En el método splitting aplicado a una ecuación buscamos poder resolver la ecuación diferencial parcial (4.2.1) resolviendo las ecuaciones $u_t = A(u(x,t))$ y $u_t = B(u(x,t))$, ver [37].

Si desarrollamos la serie de Taylor para (4.2.1), obtenemos

$$u(x,t) = u(x,0) + tu_t(x,0) + \frac{t^2}{2!}u_{tt}(x,0) + \cdots$$

= $u(x,0) + t[A(u(x,0)) + B(u(x,0))] + \frac{t^2}{2!}[A(u(x,0)) + B(u(x,0))]_t + \cdots$
= $u(x,0) + t[A(u(x,0)) + B(u(x,0))]$
+ $\frac{t^2}{2!}[A'(u(x,0)) + B'(u(x,0))][A(u(x,0)) + B(u(x,0))] + \cdots$.

Si denotamos a $\Psi_{t,A+B}$ como el flujo de la ecuación (4.2.1), tenemos en general

$$u(x,t) = \Psi_{t,A+B}u_0 = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \left(A(u)\frac{\partial}{\partial u} + B(u)\frac{\partial}{\partial u} \right)^k u \Big|_{u_0}.$$
 (4.2.2)

Vamos a descomponer (4.2.1) en los dos subproblemas

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A(u), \tag{4.2.3}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = B(u). \tag{4.2.4}$$

Denotemos por $\Psi_{t,A}, \Psi_{t,B}$ a los flujos de (4.2.3) y (4.2.4), respectivamente. Busca-

mos aproximar por series de Taylor a la solución del flujo completo $\Psi_{t,A+B}$ mediante los flujos $\Psi_{t,A}$ y $\Psi_{t,B}$ para t suficientemente pequeño (que es donde la serie de Taylor aproxima la solución). El método más simple dentro de los splitting es aproximar la solución de (4.2.1) por

$$L_{t} = (\Psi_{t,A} \circ \Psi_{t,B})u_{0} \quad o \quad L_{t} = (\Psi_{t,B} \circ \Psi_{t,A})u_{0}, \tag{4.2.5}$$

los cuales se conocen como los métodos splitting **Lie-Trotter**. Decimos que un método Ψ_t es **de orden p**, si

$$\Psi_t = \Psi_{t,A+B} + O(t^{p+1}).$$

Por ejemplo, calculemos el orden del método Lie-Trotter. Por (4.2.2),

$$\Psi_{t,A} = u_0 + tA(u_0) + \frac{t^2}{2}A'(u_0)A(u_0) + \cdots,$$

$$\Psi_{t,B} = u_0 + tB(u_0) + \frac{t^2}{2}B'(u_0)B(u_0) + \cdots.$$

Entonces,

$$\Psi_{t,B}(\Psi_{t,A}(u_0)) = [u_0 + tA(u_0) + O(t^2)] + tB\left(u_0 + tA(u_0) + O(t^2)\right) + O(t^2)$$

= $u_0 + t\left[A(u_0) + B(u_0)\right] + O(t^2).$

 Como

$$\Psi_{t,A+B} = u_0 + t \left[A(u_0) + B(u_0) \right] + O(t^2),$$

se sigue que

$$\Psi_{t,B}(\Psi_{t,A}(u_0)) - \Psi_{t,A+B} = O(t^2)$$

por lo que el método Lie-Trotter es de orden uno. Los métodos de la forma

$$\Psi_{\frac{t}{2},A} \circ \Psi_{t,B} \circ \Psi_{\frac{t}{2},A} \quad \text{ó} \quad \Psi_{\frac{t}{2},B} \circ \Psi_{t,A} \circ \Psi_{\frac{t}{2},B} \tag{4.2.6}$$

son llamados métodos splitting Strang. De manera similar al método de Lie-Trotter

se puede demostrar que

$$\Psi_{\frac{t}{2},A} \circ \Psi_{t,B} \circ \Psi_{\frac{t}{2},A} - \Psi_{t,A+B} = O(t^3),$$

siendo estos métodos de orden dos.

Para usar el splitting en un método numérico, simplemente reemplazamos los operadores $\Psi_{t,A}$ y $\Psi_{t,B}$ por métodos numéricos H_k^A y H_k^B sobre algún tamaño de paso k. En el caso del método de Lie-Trotter y Strang, nos dan métodos de la forma

$$\begin{split} U^{n+1} &= H^B_k H^A_k U^n & \text{Lie-Trotter,} \\ U^{n+1} &= H^A_{k/2} H^B_k H^A_{k/2} U^n & \text{Strang,} \end{split}$$

donde U^n es el vector cuyas entradas son el valor de las aproximaciones al tiempo n.

4.2.1. Método splitting flux-limiter

Aplicamos el método splitting Lie-Trotter a la ecuación (4.1.3). Definimos $u(x,t) = R(t)u_0(x)$ como la solución de la ecuación

$$u_t = h_1(u) + h_2(u)dW_t (4.2.7)$$

en un tiempo t. Más aún, sea u(x,t) = S(t,s)u(x,s) la solución de

$$u_t + f(u)_x - K(u)_{xx} = 0, (4.2.8)$$

a un tiempo t > s, donde u(x, s) es la condición inicial al tiempo s. Ahora, sea $\Delta t > 0$ y $t = n\Delta t$, entonces nuestra aproximación de la solución a la ecuación (4.1.3) al tiempo t queda definida por

$$u(x,t) = \prod_{k=1}^{n} [R(\Delta t)S(k\Delta t, (k-1)\Delta t)]u_0(x).$$
(4.2.9)

4. Aproximación de la ecuación de advección-difusión con reacción estocástica 38

De forma similar construimos el método splitting Strang, tomando en el operador S tamaños de paso $\Delta t/2$:

$$u(x,t) = \prod_{k=1}^{n} \left[S\left(k\frac{\Delta t}{2}t, (k-1)\frac{\Delta t}{2}\right) R(\Delta t) S\left(k\frac{\Delta t}{2}, (k-1)\frac{\Delta t}{2}\right) \right] u_0(x). \quad (4.2.10)$$

Observación 3. Los resultados sobre convergencia en los métodos splitting con parte estocástica son relativamente recientes. En [21] trabajan la ecuación (4.1.3) sin el término de difusión y $h_1(u) = 0$:

$$u_t + f(u)_x = h_2(u)dW_t,$$

$$u_0(x) = u(x, 0).$$
(4.2.11)

En este trabajo se demuestra que el método splitting converge a una única solución débil $u(x,t,\omega)$ que satisface

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{0}^{\infty} [u\nu_t + f(u)\nu_x] dx dt + \int_{-\infty}^{\infty} u_0(x)\nu(x,0) dx = -\int_{-\infty}^{\infty} \nu(x,t)h_2(u) dW_t dx$$

para todas las funciones prueba ν en C_0^1 . Donde la integral estocástica se interpreta en el sentido Ito; f, h_2 son funciones Lipchitz, h_2 con soporte compacto y $u_0(x)$ acotado. De manera análoga, se generaliza este resultado para la ecuación

$$u_t + f(u)_x = h_1(u) + h_2(u)dW_t,$$

bajo las mismas condiciones para los coeficientes f, h_1 y u_0 con h_1 función Lipschitz.

Ahora lo que resta es proponer los métodos numéricos que se usarán en cada problema:

- Para resolver la ecuación (4.2.8) proponemos el método numérico conservativo limitador de flujo Switch (3.2.5)-(3.2.6) presentado en el capítulo anterior.
- Para resolver la ecuación (4.2.7) proponemos el método de Euler-Maruyama que describimos en la sección siguiente.

4.3. Método de Euler-Maruyama

El método Euler-Maruyama (EM) es un método númerico que aproxima a una solución de la ecuación diferencial estocástica

$$du(t) = h_1(u(t), t)dt + h_2(u(t), t)dW_t, \quad u(0) = u_0 \quad 0 \le t \le T,$$
(4.3.1)

escrita en su forma integral como

$$u(t) = u_0 + \int_0^t h_1(u(s), s) ds + \int_0^t h_2(u(s), s) dW(s), \quad 0 \le t \le T.$$
(4.3.2)

Aquí h_1 es la parte determinista y h_2 es la función que se conoce como "drift", que son funciones escalares que satisfacen el teorema de existencia y unicidad (Apéndice A). La primera integral es del tipo Riemann y la segunda integral es Itô, la cual viene definida con respecto del movimiento Browniano. La solución u(t) es una variable aleatoria para cada t, para consultar detalles de estos conceptos ver Apéndice A.

Para aproximar el proceso estocástico $\{u(t)\}_{t\geq 0}$ definido por la ecuación (4.3.2) por un método numérico en el intervalo [0,T] discretizamos el intervalo poniendo $\Delta t = T/L$ para algún número positivo L tal que $\tau_n = n\Delta t$. Denotaremos a la aproximación numérica de $u(\tau_n)$ por u_n . El método de Euler-Maruyama toma la forma

$$u(\tau_n) = u(\tau_{n-1}) + \int_{\tau_{n-1}}^{\tau_n} h_1(u(s))ds + \int_{\tau_{n-1}}^{\tau_n} h_2(u(s))dW(s),$$

es decir,

 $u_n = u_{n-1} + h_1(u_{n-1})\Delta t + h_2(u_{n-1})(W(t_n) - W(t_{n-1})).$ (4.3.3)

Notemos que si $g \equiv 0$ y u_0 es constante, la ecuación anterior se reduce al método de Euler determinista. Por conveniencia, elegiremos el tamaño de paso Δt como un múltiplo del tamaño de paso dt del movimiento Browniano. Esto garantiza que el conjunto de puntos $\{t_n\}$ de la discretización del movimiento Browniano contiene al conjunto de puntos $\{\tau_n\}$ donde se calcula la solución. Ejemplo 4.3.1. Consideremos la ecuación diferencial lineal estocástica

$$du(t) = \lambda u(t)dt + \sigma u(t)dW_t, \quad u(0) = u_0 \quad 0 \le t \le 1.$$
(4.3.4)

Se conoce su solución analítica [32] que se escribe como

$$u(t) = u(0)exp\left(\left(\lambda - \frac{1}{2}\mu^2\right) + \mu W(t)\right).$$
(4.3.5)

Aplicamos el método de EM a la ecuación (4.3.4) para comparar la solución analítica con la solución numérica. Tomamos $\Delta t = dt = \frac{1}{300}$, $\lambda = 4$ y $\sigma = 2$. Se calcularon dos trayectorias, esto es, dos procesos estocásticos generados por el movimiento Browniano, estos se muestran en la Figura 4.3.1.



Fig. 4.3.1: Aproximaciones del método EM para la ecuación (4.3.4).

Convergencia fuerte y débil

Sean la solución analítica u_n de la ecuación (4.3.1) y su aproximación numérica $u(\tau_n)$ obtenida por el método Euler-Maruyama, las cuales son variables aleatorias. La convergencia fuerte y débil del método Euler-Maruyama nos da criterios de cómo medir la diferencia entre ambas variables. Denotemos por $\mathbb{E}(X)$ el valor esperado de una variable aleatoria X(t).

Definición 4.3.1. [20] Un método se dice que tiene orden de convergencia fuerte igual a κ si existe una constante C tal que

$$\mathbb{E}|u_n - u(\tau)| \le C\Delta t^{\kappa} \tag{4.3.6}$$

para cualquier $\tau = n\Delta t \in [0,T]$ y Δt suficientemente pequeño. Si h_1 y h_2 satisfacen condiciones apropiadas se puede demostrar que el método EM tiene orden de convergencia fuerte $\kappa = 1/2$.

El orden de convergencia fuerte mide la velocidad a la cual "la media del error" decae cuando Δt se aproxima a cero. Otra condición de convergencia menos fuerte es aquella que mide el "error de las medias". Esto nos propicia el concepto de convergencia débil.

Definición 4.3.2. [20] Decimos que un método tiene **orden de convergencia débil** igual a κ si existe una constante C tal que para todas las funciones p en alguna clase

$$|\mathbb{E}p(u_n) - \mathbb{E}p(u(\tau))| \le C\Delta t^{\kappa} \tag{4.3.7}$$

para cualquier $\tau = n\Delta t \in [0, T]$ y Δt suficientemente pequeño. Normalmente, se pide a las funciones p en la última desigualdad satisfagan suavidad y tengan crecimiento polinomial. Cuando p es la función identidad y si h_1 y h_2 son funciones apropiadas se puede mostrar que el método de Euler-Maruyama tiene orden de convergencia débil $\kappa = 1$.

4.4. Simulaciones numéricas

En esta sección analizaremos la eficiencia del método splitting flux-limiter Switch con el método de Euler-Maruyama para diferentes problemas parciales estocásticos. El estudio lo dividiremos en varias partes:

- Primero veremos una ecuación advectiva con término de reacción y ruido aditivo en la que se estudia: (i) el orden de convergencia para condiciones iniciales discontinuas y suaves; (ii) se aplica el método propuesto para flujos convexos y no convexos y condiciones iniciales discontinuas, de este modo comparamos el promedio de las soluciones estocásticas con la solución de la ecuación determinista.
- Luego se simulan ecuaciones en derivadas parciales con término de reacción no lineal, tanto en la parte determinista como en el término drift, que modelan

problemas de enfermedades y contaminación de fluidos en medios porosos.

En todos los casos calculamos la solución a un tiempo T. El movimiento Browniano viene dado por $W_j = W_{j-1} + dW_j$, j = 1, ..., N donde dW_j es una variable aleatoria independiente de la forma $\sqrt{k}N(0,1)$ con k = T/N el tamaño de paso temporal tomado en el método.

4.4.1. Ecuación advección-reacción con ruido aditivo

La ecuación de estudio para este caso es la ecuación de advección-reacción:

$$u_t + f(u)_x = dW_t, \quad \mathbb{R} \times (0, T];$$
 $u(x, 0) = u_0(x).$
(4.4.1)

Caso lineal

Consideramos la función advección lineal f(u) = u en la ecuación (4.4.1). Como condición inicial tomamos dos casos: uno en el cual $u_0(x)$ es una función suave y otro cuando $u_0(x)$ es una función discontinua constante a pedazos, es decir, el problema de Riemann visto en el capítulo 1.

• Caso suave:

$$u_0(x) = e^{\frac{1}{x^2 - 1}}. (4.4.2)$$

Caso discontinuo:

$$u_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \le -0.5, \\ 1 & \text{si } -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{si } 0.5 \le x. \end{cases}$$
(4.4.3)

La solución exacta está dada por $u(x, t, \omega) = u_0(x - t) + bW_t$ [5]. Tomamos b = 1y comparamos el orden de convergencia en ambos casos. Denotamos por $\{u_h\}_{h\to 0}$ a las aproximaciones de la solución exacta u. Definimos el error

$$e_h = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|u_h^i - u^i\|,$$

donde N es el número de pruebas realizadas, u_h^i es la aproximación de la i-ésima prueba y u^i es la i-ésima solución exacta.

Calculamos el error de convergencia, e_h , abreviadamente EOC. Obtuvimos que este se aproxima a 1 para el caso suave y a 0.5 para el caso discontinuo cuando $h \rightarrow 0$. En la tabla (I) también podemos observar que cuando $h \rightarrow 0$ el error promedio de las pruebas estocásticas con las de la solución analítica va disminuyendo en ambos casos.

Caso Suave			Caso Discontinuo		
h	e_h	EOC	h	e_h	EOC
0.0200	$7.106e^{-3}$	0.956	0.0200	$9.427e^{-2}$	0.571
0.0100	$4.837e^{-3}$	0.956	0.0100	$8.941e^{-2}$	0.563
0.0050	$2.843e^{-3}$	0.977	0.0050	$6.326e^{-2}$	0.541
0.0025	$1.279e^{-3}$	0.983	0.0025	$4.021e^{-2}$	0.527

Tab. I: EOC usando 50 trayectorias calculadas con el método splitting Strang con el método limitador de flujo Switch y el método Euler-Maruyama.

Flujos convexos y no convexos

Aplicamos el método splitting flux-limiter propuesto a la ecuación (4.4.1) con flujos convexos y no convexos:

1. Sea el flujo de Burgers $f(u) = u^2/2$ (función convexa) y la condición inicial

$$u_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -1 \le x \le -0.5, \\ 1 & \text{si } -0.5 < x \le 0.5, \\ 0 & \text{si } 0.5 < x \le 1. \end{cases}$$
(4.4.4)

Comparamos en este caso la solución de la ecuación determinista asociada a (4.4.1) con el promedio de 50 trayectorias de la solución de la ecuación estocástica. En este caso usamos el splitting Lie-Trotter con tamaños de paso h = 0.01 y k = 0.005 y aproximamos la solución al tiempo t = 0.25. La solución de la ecuación determinista y el promedio de las aproximaciones de la ecuación

(4.4.1) junto a algunas caminatas aleatorias independientes se muestran en la Figura 4.4.1.



Fig. 4.4.1: A la izquierda la solución determinista asociada a la ecuación (4.4.1)-(4.4.4) con flujo tipo Burgers y el promedio de 50 trayectorias al tiempo t = 0.25. A la derecha cinco trayectorias para el mismo problema.

Aunque el promedio de trayectorias de la ecuación estocástica aparentemente convergen a la solución determinista, no es igual. Análisis más profundos sobre la ecuación de Burgers con un problema de Riemann muestran que el promedio no converge a la solución determinista cuando se incrementa el número de pruebas [21].

2. Sea el flujo no convexo $f(u) = u^3$ y condición inicial

$$u_0(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } -1 \le x \le -0.8, \\ 1 & \text{si } -0.8 < x \le -0.4, \\ -2 & \text{si } -0.4 < x \le 1. \end{cases}$$
(4.4.5)

Elegimos tamaños de paso h = 0.02 y k = 0.00125 y calculamos con el método splitting Lie-Trotter la solución al tiempo t = 0.1. En la Figura 4.4.2 se muestra la solución determinista asociada al problema (4.4.1)-(4.4.5) frente el promedio de 50 trayectorias estocásticas. También se prensentan algunas trayectorias de la solución.



Fig. 4.4.2: A la izquierda la solución determinista asociada a la ecuación (4.4.1)-(4.4.5) con flujo cúbico y el promedio de 50 trayectorias al tiempo t = 0.1. A la derecha cinco trayectorias para el mismo problema.

Obsérvese que el movimiento Browniano generado es diferente al del ejemplo de la ecuación de Burgers ya que vamos generando variables aleatorias con una distribución $\sqrt{k}N(0,1)$. Para que el problema no se desestabilizara por las condiciones del método Switch (3.2.1) se tuvo que disminuir k. Al ser k más pequeño la varianza de las distribuciones de las variables aleatorias simuladas disminuye.

4.4.2. Ecuación advección-difusión-reacción con ruido no lineal

Modelo SIS

Los modelos SIS (susceptibles-infectados-susceptibles) describen la transmisión de enfermedades infecciosas y con el estudio de su solución se busca determinar si estas se van a expandir. En años recientes, la difusión espacial y la heterogeneidad en el ambiente han sido reconocidos como factores importantes que afectan a la persistencia y la erradicación de enfermedades tales como la tuberculosis, gripa, entre otras. Tomando en cuenta estos factores, en [14] se propone el modelo

$$I_t - d_I I_{xx} = (\beta(x) - \gamma(x))I - \frac{\beta(x)}{N(x,t)}I^2, \ x \in \mathbb{R}, \ t > 0,$$
(4.4.6)

donde I(x, t) representa la densidad de individuos infecciosos localizados en el punto espacial x al tiempo t; d_I es la tasa de difusión para la población infecciosa; $\beta(x)$ y $\gamma(x)$ son las tasas por contacto de transmisión y recuperación de la enfermedad, respectivamente; $N(x,t) \equiv N$ es la densidad de la población, la cual supondremos constante.

Elegimos $\beta(x) \equiv \beta$ y $\gamma(x) \equiv \gamma$ constantes. Usamos la técnica de perturbación de parámetros (4.1.2) para perturbar el parámetro β e introducir la variabilidad mediambiental en la ecuación, obteniendo la ecuación de advección-difusión con reacción estocástica siguiente:

$$I_t - d_I I_{xx} = (\beta(x) - \gamma(x))I - \frac{\beta(x)}{N}I^2 + \sigma\left(I - \frac{I^2}{N}\right)dW_t.$$
 (4.4.7)

Consideramos la condición inicial propuesta en [14] para el caso determinista:

$$I_0(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -1 \le x \le -1/2, \\ 2x+1 & \text{si } -1/2 < x \le 0, \\ -2x+1 & \text{si } 0 < x \le 1/2, \\ 0 & \text{si } 1/2 < x \le 1. \end{cases}$$
(4.4.8)



Fig. 4.4.3: Condición inicial $I_0(x)$.

Fijamos los coeficientes N = 2, $d_I = 0.005$ y $\sigma = 2$. Aproximamos con el método splitting Lie-Trotter para los parámetros $\beta = 2$ y $\gamma = 1$ (Figura 4.4.4), y $\beta = 1$ y $\gamma = 2$ (Figura 4.4.5). En ambos casos con tamaños de paso h = 0.01 y k = 0.005.

Los resultados muestran que para el caso en el que $\beta > \gamma$ la proporción de infectados es mayor que cuando $\gamma > \beta$. Esto era de esperarse, siendo β la tasa de transmisión de la enfermedad por contacto y γ la tasa de recuperación. Vemos a la derecha de la Figura 4.4.4 como afecta el ruido aleatorio para diferentes trayectorias, en este caso se puede observar que para algunas trayectorias la proporción de infecciosos prácticamente desaparece, mientras que para otras todavía hay una proporción considerable de infecciosos, cualquiera que sea el caso, al ser mayor la tasa de recuperación, para todas las trayectorias mostradas la proporción de infecciosos se redujo en comparación a la condición inicial. Para el segundo caso, a la derecha de la Figura 4.4.5 se observa como el ruido estocástico hace que para algunas trayectorias la proporción de infecciosos legue incluso a aumentar en comparación a la condición inicial.



Fig. 4.4.4: Solución numérica del problema (4.4.7)-(4.4.8) con $\beta = 2$ y $\gamma = 1$. A la izquierda se muestra la solución del caso determinista frente al promedio de 50 trayectorias al tiempo t = 1. A la derecha se muestran cinco trayectorias de la ecuación estocástica.



Fig. 4.4.5: Solución numérica del problema (4.4.7)-(4.4.8) con $\beta = 1$ y $\gamma = 2$. A la izquierda se muestra la solución del caso determinista frente al promedio de 50 trayectorias al tiempo t = 1. A la derecha se muestran cinco trayectorias de la ecuación estocástica.

4. Aproximación de la ecuación de advección-difusión con reacción estocástica 48

Ahora, fijamos el punto x = 0 que es el punto espacial donde hay más infectados en base a la condición propuesta. Se muestran en la Figura 4.4.6 un par de trayectorias temporales en este punto para: $\beta > \gamma$ (gráfica izquierda) y $\beta < \gamma$ (gráfica derecha) para conocer la evolución del número de infecciosos a través del tiempo. Podemos observar que en el caso de que la tasa de transmisión es mayor que la de recuperación la enfermedad sigue presente en la población a lo largo del tiempo, aquí se hace más visible la variabilidad en la variable de infecciosos.



Fig. 4.4.6: Evolución de los infecciosos en x = 0 considerando $\beta = 2$ y $\gamma = 1$ a la izquierda y con $\beta = 1$ y $\gamma = 2$ a la derecha.

Modelo medios porosos

Un problema de gran interés para el medio ambiente es entender como los contaminates químicos o biológicos son transportados a través de sistemas acuíferos bajo la superficie. Imaginemos que el agua está fluyendo bajo la superficie del suelo que está compuesto de un material sólido. En cualquier volumen, a la fracción de espacio disponible para el agua, llamado espacio poroso o porosidad del medio, la denotaremos por ω , con $0 < \omega < 1$. En general, la porosidad varía acorde a la posición, pero aquí la supondremos constante a través de todo el medio.

Una de las ecuaciones que modelan este tipo de fenómenos es la ecuación de advección-dispersión-reacción [10]:

$$C_t + \frac{V}{\omega}C_x - DC_{xx} = \frac{1}{\omega}F.$$

Aquí, C(x,t) es la concentración medida en masa por unidad de volumen de agua del contaminante químico o biológico disuelto en el líquido; D se conoce como el coeficiente hidrodinámico de dispersión; V el volumen por unidad de agua por unidad de tiempo que fluye a través del medio. Se supone que el contaminante no tiene volumen por sí mismo y por lo tanto no afecta el volumen del líquido. F(x,t)es la velocidad a la que el contaminante es creado o destruido, medida en masa por unidad de volumen de el medio poroso por unidad de tiempo. Esta ecuación surge del balance de masa.

Cuando el contaminante es radiactivo con decaimiento λ , entonces $F = -\lambda \omega C$ y se obtiene la ecuación de advección-difusión de decaimiento [38]:

$$C_t + \frac{V}{\omega}C_x - DC_x x = -\lambda C. \tag{4.4.9}$$

Usando el método de perturbación de parámetros (4.1.2) perturbamos el parámetro

$$\lambda \rightsquigarrow \lambda + \sigma dW_t$$

y sustituimos en (4.4.9), obteniendo la ecuación diferencial estocástica:

$$C_t + \frac{V}{\omega}C_x - DC_{xx} = -\lambda C - \sigma C dW_t.$$
(4.4.10)

Consideramos la concentración inicial del contaminante

$$C_0(x) = \frac{\pi}{4} exp\left(\frac{-(x-3)^2}{4}\right), \ x \in (0,4).$$
(4.4.11)



Fig. 4.4.7: Condición inicial $C_0(x)$.

Fijamos los coeficientes $\omega = 0.5$, $d_I = 0.005$ y $\sigma = 2$. Calculamos la solución del

problema (4.4.10)-(4.4.11) eligiendo h = 0.01 y k = 0.005. Hicimos simulaciones para velocidades de decaimiento $\lambda = 1$ y $\lambda = 0.25$, las cuales se muestran en las Figuras 4.4.8 y 4.4.9 respectivamente.



Fig. 4.4.8: Solución numérica del problema (4.4.10)-(4.4.11) con $\lambda = 1$. A la izquierda se muestra la solución del caso determinista frente al promedio de 50 trayectorias al tiempo t = 0.5. A la derecha se muestran cinco trayectorias de la ecuación estocástica.



Fig. 4.4.9: Solución numérica del problema (4.4.10)-(4.4.11) con $\lambda = 0.25$. A la izquierda se muestra la solución del caso determinista frente al promedio de 50 trayectorias al tiempo t = 0.5. A la derecha se muestran cinco trayectorias de la ecuación estocástica.

Naturalmente, en la Figura 4.4.8 donde la tasa de decaimiento radiactivo del contaminante es mayor se observa que el porcentaje del contaminante en el líquido es menor comparado con el de la Figura 4.4.9.

Calculamos para un par de trayectorias en el punto x = 2 para ambos casos: $\lambda = 0.25$ y $\lambda = 1$, las cuales indican como va cambiando la concentración del contaminante

a medida que el tiempo avanza. En la Figura 4.4.10 observamos un decaimiento más pronunciado a lo largo del tiempo en las trayectorias de la solución con $\lambda = 1$.



Fig. 4.4.10: Concentración del contaminante en x = 2 para los casos $\lambda = 1/4$ y $\lambda = 1$, respectivamente.

4.4.3. Flujos degenerados

Para terminar probaremos nuestro método numérico en el caso de flujos degenerados (k(u) = 0 para algún u). Simulamos el problema con flujo degenerado del capítulo 3 añadiendo un ruido constante:

$$u_t + f(u)_x = (k(u)u_x)_x + dW_t,$$

 $u(x, 0) = u_0(x),$

donde el flujo difusivo es k(u) = 0 si $u \in [0, 0.5]$, 10u - 5 si $u \in (0.5, 0.6)$ y 1 si $u \in [0.6, 1]$, y condición inicial

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & -1 \le x \le -0.4 \\ -2.5x & -0.4 < x \le 0, \\ 0 & x > 0. \end{cases}$$

En este caso el método splitting se desestabiliza incluso refinando los tamaños de paso y para tiempos pequeños. La estabilidad del método para flujos difusivos degenerados queda como trabajo futuro. En la Figura 4.4.11 se muestran algunos resultados obtenidos para t = 0.003.



Fig. 4.4.11: Tres trayectorias usando el método Splitting Switch-Euler al tiempo t = 0.003.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrolla un nuevo método para aproximar la ecuación de advección-difusión con reacción estocástica, el cual se nombra método splitting fluxlimiter, ya que es un método basado en la técnica splitting de operadores, y la parte advectiva-difusiva se aproxima con un método de la forma limitador de flujo. Por los resultados obtenidos confrontando los casos con condiciones iniciales discontinuas y suaves se concluye para el método splitting flux-limiter Switch que:

- 1. El orden de convergencia resultó menor para condiciones iniciales discontinuas que para condiciones suaves, Lo cual es natural ya que cerca de las discontinuidad la solución no es derivable por lo que su orden es cero en esas regiones.
- 2. Cuando se compara el promedio de un conjunto de trayectorias de la ecuación estocástica obtenidas con el método numérico frente a la solución analítica los errores numéricos fueron mayores para el caso discontinuo que para el suave. Sin embargo, estos errores de orden de convergencia fueron equiparables a los obtenidos por otros métodos propuestos en artículos recientes que usan el método Engquist-Osher [28].

La aplicación de este método para flujos no convexos es más delicado, incluso para el método limitador de flujo de la parte de advección-difusión propuesto. Este tipo de flujos hace más restrictiva la elección de los tamaños de paso, por lo que se debe tener cuidado en refinar la malla para que el método no se desestabilice. Es importante mencionar que muchos métodos actuales fallan al trabajar con flujos no convexos aun refinando la malla.

Cuando se trabaja con términos difusivos degenerados el método se desestabiliza incluso refinando el tamaño de paso y para tiempos pequeños, por lo que mejorar el método para este tipo de funciones queda como trabajo futuro.

En el método se usó en la parte estocástica el método de Euler-Maruyama, que aunque su costo computacional es bajo, presenta errores bajo ciertas condiciones en las funciones tomadas en la parte estocástica, por lo que queda hacer un análisis numérico para el splitting que en la parte reactiva tenga un método con mejores propiedades de estabilidad.

Desde el punto de vista teórico falta realizar un análisis de unicidad, estabilidad y convergencia de soluciones, pero tal análisis no es sencillo dado que se está trabajando con una ecuación parcial estocástica, y que al ser tan reciente el análisis de este tipo de ecuaciones hay relativamente pocos resultados en comparación a otras ecuaciones. Apéndice

A. ELEMENTOS DE PROBABILIDAD

Espacio de probabilidad

Definiremos los conceptos básicos de probabilidad que usaremos en esta tesis [33]. En primer lugar tenemos un conjunto Ω , conocido como el **espacio muestral**, que contiene todos los resultados posibles del experimento. Todos los elementos ω del espacio muestral se conocen como **eventos elementales**.

Lo segundo que necesitamos es una clase de eventos Λ . Esta clase es un conjunto de subconjuntos de Ω que satisface las siguientes propiedades:

- 1. $\Omega \in \Lambda$.
- 2. Si $A \in \Lambda$ entonces $A^c \in \Lambda$.
- 3. Si $A_n \in \Lambda$ para $n \ge 1$ entonces $\bigcup_{n>1} A_n \in \Lambda$.

A una colección de subconjuntos de Ω que satisface estas tres condiciones se conoce como una σ -álgebra.

Lo tercero y último que necesitamos es una "probabilidad" P definida sobre la clase Λ que tome valores en [0, 1], y que satisface las siguientes propiedades:

1. Para cualquier evento $A \in \Lambda$,

$$0 = P(\emptyset) \le P(A) \le P(\Omega) = 1.$$

2. Si $A_n, n \ge 1$ es una colección de conjuntos disjuntos dos a dos, es decir, $A_i \cap A_j = \emptyset$ si $i \ne j$, entonces

$$P\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n).$$

La terna (Ω, Λ, P) se llama **espacio de probabilidad**. La función P es una (medida de) probabilidad y como está definida sobre Λ , sólo podemos determinar la probabilidad de los conjuntos que están sobre esta clase, por eso decimos que estos son los conjuntos medibles. Las propiedades de Λ garantizan que si hacemos las operaciones usuales (unión, intersección, complementos, etc.) con conjuntos medibles, obtendremos conjuntos medibles.

Variables aleatorias

Una variable aleatoria X es una función real definida sobre Ω que satisface ciertas condiciones que describiremos a continuación. Si X toma valores reales, en la práctica es de interés calcular probabilidades como $P(X \leq a)$ con $a \in \mathbb{R}$. Ahora bien, para que estas probabilidades existan, es necesario que los conjuntos cuyas probabilidades queremos calcular sean medibles, es decir, estén en la σ -álgebra de Λ . Estos conjuntos son de la forma { $\omega : X(\omega) \leq a$ }. Por lo tanto la condición que tenemos que pedirle a X para garantizar que podemos asignar una probabilidad a este tipo de conjuntos es la siguiente:

Para todo
$$a \in \mathbb{R}$$

 $\{\omega : X(\omega) \le a\} \in \Lambda.$ (A.1.1)

Si la función $X : \Omega \to \mathbb{R}$ satisface esta propiedad es llamada **variable aleatoria**. Obsérvese que X puede ser variable aletoria con respecto a una σ -álgebra pero no serlo con respecto a otra.

Se puede demostrar que si la condición (A.1.1) se satisface, entonces para cualquier intervalo I se tiene que

$$\{\omega: X(\omega) \in I\} \in \Lambda. \tag{A.1.2}$$

Recíprocamente, si (A.1.2) se satisface, entonces también se cumple (A.1.1).

Distribución de una Variable Aleatoria

Consideremos un espacio de probabilidad (Ω, Λ, P) y una variable aleatoria X sobre este espacio. Si queremos calcular la probabilidad de que la variable aleatoria X tome valores en un intervalor I, debemos considerar el conjunto $\{\omega : X(\omega) \in A\} = X^{-1}(A)$, que es la pre-imagen de A por la función X. Como (A.1.1) es equivalente a (A.1.2), este conjunto está en la colección de Λ y por tanto podemos calcular su probabilidad. Así pues, si A es un intervalo,

$$P(x \in A) = P(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in A\}) = P(X^{-1}(A)).$$
(A.1.3)

Esta relación nos permite definir una (medida de) probabilidad P_X inducida por la variable X de la siguiente manera: Para todo intervalo A,

$$P_X(A) = P(X \in A) = P(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in A\}).$$
(A.1.4)

Esta (medida de) probabilidad se conoce como la **distribución** de X.

Si en (A.1.4) consideramos intervalos de la forma $(-\infty, x]$, obtenemos una función $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ que se conoce como la **función de distribución** de X:

$$F(x) = P_X((-\infty, x]) = P(X \le x).$$
(A.1.5)

Variables Discretas y Continuas

Una variable aleatoria X es discreta si toma valores en un conjunto finito $\{x_1, \ldots, x_n\}$ o numerable $\{x_1, x_2, \ldots\}$. En el primer caso existen números positivos p_1, \ldots, p_n con $p_1 + \ldots + p_n = 1$ tales que

$$P(X = x_i) = p_i \tag{A.1.6}$$

para $1 \leq i \leq n$. En el segundo caso tenemos números positivos $p_i, i \geq 1$ con $\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$ que satisfacen (A.1.6) para $i \geq 1$.

Llamaremos a la función $p_X(x_i) = p_i$, la función de probabilidad o **densidad** de X.

Una variable aleatoria X es continua si su función de distribución F es continua. Para la mayoría de estas variables existe una función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ con $f(x) \ge 0$ para todo x y $\int_{\mathbb{R}} f(x) dx = 1$ que satisface

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)dt \qquad (A.1.7)$$

para todo $x \in \mathbb{R}$. La función f se conoce como la **función de densidad** de X. Hay algunas variables continuas que no tienen esta propiedad, pero su interés es más teórico y no las consideraremos aquí.

Valores Esperados y Momentos

Si X es una variable aleatoria continua con densidad f(x), el momento de orden n es

$$E(X^n) = \int_{-\infty}^{\infty} x^n f(x) dx \tag{A.1.8}$$

siempre que esta integral converja absolutamente.

El primer momento se conoce como la **media** o **esperanza** de X, la cual denotaremos por μ_X . El **momento central** de orden n es el momento de orden n de la variable $X - \mu_X$, si μ_X existe. El primer momento central es cero. El segundo momento central se conoce como **varianza** de X, denotado por σ^2 . Su raíz cuadrada es la **desviación estándar**.

Si X es una variable aleatoria y g una función (medible), entonces g(X) también es una variable aleatoria. Si X es continua y tiene densidad f, el valor esperado de g(X) es

$$E(g(X)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)dx.$$
 (A.1.9)

Distribución Normal o Gaussiana

Una variable aleatoria Xtiene distribución normal de parámetros μ y σ^2 si su función de densidad es

$$f(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} exp(-(x-\mu)^2/2\sigma^2).$$
 (A.1.10)

Usaremos la notación $X \sim N(\mu, \sigma^2)$. Los parámetro μ y σ^2 representan la esperanza y la varianza de la variable X. El caso $\mu = 0, \sigma^2 = 1$ se conoce como la densidad típica

o estándar. Si $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, entonces $Z = (X - \mu)/\sigma$ tiene una distribución normal típica. Así, siempre podemos reducir los cálculos al caso estándar. La densidad típica es

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp(-x^2/2).$$
 (A.1.11)

A.2. Ecuaciones Diferenciales Estocásticas

En este apéndice vamos a definir lo que es una solución para una ecuación diferencial estocástica y daremos condiciones para las cuales esta solución es única, para más detalle veáse [32]. Primero daremos algunas definiciones previas.

Definición A.2.1. Sea (Ω, Λ, P) un espacio de probabilidad.

- Si C es una familia de subconjuntos de Ω, entonces existe una σ-álgebra mínima σ(C) que contiene a C. Esta σ(C) es llamada la σ-álgebra generada por C. Si Ω = ℝ y C es la familia de todos los conjuntos abiertos de ℝ, entonces 𝔅 = σ(C) es llamada la σ-álgebra de Borel y los elementos de 𝔅 son llamados Borelianos. Si X es una variable aleatoria en el espacio de probabilidad (ℝ,𝔅, P), X es llamada función Borel-medible.
- 2. Una familia $\{X_t\}_{t\geq 0}$ de variables aleatorias es llamado un **proceso estocásti**co.
- 3. Una filtración es una familia $\{\Lambda_t\}_{t\geq 0}$ de sub- σ -álgebras de Λ (i.e., $\Lambda_t \subset \Lambda_s \subset \Lambda$ para todo $0 \leq t < s < \infty$).
- 4. Sea $\{X_t\}_{t\geq 0}$ un proceso estocástico. Si tenemos una filtración Λ_t , $\{X_t\}_{t\geq 0}$ es llamado $\{\Lambda_t\}$ -adaptado si para cada t, X_t es Λ_t -medible (i.e., X_t es variable aleatoria con la σ -álgebra Λ_t).

Movimiento Browniano

Definición A.2.2. Sea (Ω, Λ_t, P) un espacio de probabilidad con filtración $\{\Lambda_t\}$. Un movimiento Browniano estándar, o proceso de Wiener es un proceso $\{\Lambda\}$ -adaptado $\{W(t)\}$ que satisface las siguientes tres condiciones:

- 1. W(0) = 0 (con probabilidad 1).
- 2. Para $0 \le s < t < \infty$ la variable aleatoria dada por el incremento W(t) W(s)está distribuida normalmente con media cero y varianza t-s; equivalentemente, $W(t) - W(s) \sim \sqrt{t-s}N(0,1).$
- 3. Para $0 \leq s < t < \infty$, el incremento W(t) W(s) es independiente de Λ_s .

Computacionalmente, tenemos que considerar un movimiento Browniano donde W(t) esté definido en tiempos t discretos. Ponemos $\delta t = T/N$ para algún número positivo N y denotamos W_j por $W(t_j)$ con $t_j = j\delta t$. La condición 1 nos dice que $W_0 = 0$, y las condiciones 2 y 3 nos dicen que

$$W_j = W_{j-1} + dW_j, \quad j = 1, \dots, N,$$
 (A.2.1)

donde dW_j es una variable aleatoria independiente de la forma $\sqrt{\delta t}N(0,1)$.

Integrales Estocásticas

Definiremos la integral estocástica

$$\int_0^t X(s)dW(s) \tag{A.2.2}$$

con respecto a un movimiento Browniano $\{W(t)\}$ para una clase de procesos estocásticos $\{X(t)\}$. Como para casi todo $\omega \in \Omega$, la trayectoria $W(\cdot)(\omega)$ no es diferenciable en ningún lugar, la integral no puede ser definida en la forma usual. La integral (A.2.2) fue definida por K. Ito en 1949 y es conocida como la integral estocástica Ito.

Sea (Ω, Λ, P) un espacio de probabilidad con una filtración $\{\Lambda_t\}_{t\geq 0}$. Sea $\{W(t)\}_{t\geq 0}$ un movimiento Browniano adaptado a la filtración. Sea $0 \leq a < b < \infty$. Denotemos por $\mathfrak{M}^2([a, b]; \mathbb{R})$ al espacio de todos los procesos $\{\Lambda_t\}$ adaptados $\{X(t)\}_{a\leq t\leq b}$ tales que

$$E\int_{a}^{b}|X(t)|^{2}dt < \infty.$$
(A.2.3)

Para procesos estocásticos $\{X(t)\}$ vamos a definir la integral Ito $\int_a^b X(t)dW(t)$. Primero se definira esta integral para "procesos simples".

Definición A.2.3. Un proceso $g = \{g(t)\}_{a \le t \le b}$ es llamado proceso simple si existe una partición $a = t_0 < t_1 < \ldots < t_k = b$ de [a, b] y variables aleatorias acotadas X_i , $0 \le i \le k - 1$ tales que X_i es Λ_{t_i} -medible y

$$g(t) = X_0 I_{[t_0, t_1]}(t) + \sum_{i=1}^{k-1} X_i I_{(t_i, t_{i+1}]}(t), \qquad (A.2.4)$$

donde I_A es la función indicadora

$$I_A(x) = \begin{cases} 1 & si \ x \in A, \\ 0 & si \ x \notin A. \end{cases}$$

Denotamos por $\mathfrak{M}_0([A, B]; \mathbb{R})$ a la familia de tales procesos. Se puede ver que $\mathfrak{M}_0([A, B]; \mathbb{R}) \subset \mathfrak{M}_2([A, B]; \mathbb{R})$

Definición A.2.4. **[Integral Ito]** Para un proceso simple g con la forma de (A.2.4) en $\mathfrak{M}_0([a, b]; \mathbb{R})$ definimos

$$\int_{a}^{b} g(t)dW(t) = \sum_{i=0}^{k-1} X_{i}(W(t_{i+1}) - W(t_{i}))$$
(A.2.5)

y la llamamos la integral estocástica de g con respecto al movimiento browniano $\{W(t)\}$ o la **integral Ito**.

Dada una función f medible podemos tomar en la definición de integral Ito al proceso estocástico $\{f(g(t))\}$ haciendo referencia a la suma

$$\sum_{j=0}^{k-1} f(X_i)(W(t_{i+1}) - W(t_i)).$$
(A.2.6)

Para calcular computacionalmente soluciones de ecuaciones diferenciales estocásticas, este es el tipo de procesos estocásticos que necesitamos. Sin embargo, la definición de integral Ito se puede ampliar para procesos estocásticos en $\mathfrak{M}^2([a, b]; \mathbb{R})$, la idea es que se puede aproximar a cualquier proceso en $\mathfrak{M}^2([a, b]; \mathbb{R})$ mediante procesos simples. Aquí solo damos algunos resultados que dan lugar a la definición en el caso general [32].

Lema A.2.1. Para cualquier $\{X(t)\} \in \mathfrak{M}^2([a,b];\mathbb{R})$ existe una secuencia $\{g_n\}$ de procesos simples tales que

$$\lim_{n \to \infty} E \int_{a}^{b} |X(t) - g_n(t)|^2 dt = 0.$$
 (A.2.7)

Definición A.2.5. [Integral Ito (caso general)] Sea $\{X(t)\} \in \mathfrak{M}^2([a, b]; \mathbb{R})$. La integral Ito de $\{X(t)\}$ con respecto a $\{W(t)\}$ está definida por

$$\int_{a}^{b} X(t)dW(t) = \lim_{n \to \infty} \int_{a}^{b} g_n(t)dW(t)$$
(A.2.8)

donde $\{g_n\}$ es una secuencia de procesos simples tales que

$$\lim_{n \to \infty} E \int_{a}^{b} |X(t) - g_n(t)|^2 dt = 0.$$
 (A.2.9)

Ecuaciones Diferenciales Estocásticas

Sea (Ω, Λ, P) un espacio de probabilidad con filtración $\{X(t)\}_{t\geq 0}$ con $\{W(t)\}$ un movimiento Browniano para $t \geq 0$. Sea $0 \leq t_0 < T < \infty$ y x_0 una variable aleatoria Λ_{t_0} -medible tal que $\mathbb{E}|x_0|^2 < \infty$. Sean $f : \mathbb{R} \times [t_0, T] \to \mathbb{R}$ y $g : \mathbb{R} \times [t_0, T] \to \mathbb{R}$ Borel-medibles. Consideremos la ecuación diferencial estocástica Ito tipo

$$dx(t) = f(x(t), t)dt + g(x(t), t)dW(t) \quad en \quad t_0 \le t \le T$$
(A.2.10)

con valor inicial $x(t_0) = x_0$. Por (A.2.10) nos referimos a

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t f(x(s), s) ds + \int_{t_0}^t g(x(s), s) dW(s) \quad en \quad t_0 \le t \le T.$$
 (A.2.11)

Definición A.2.6. [Solución de una Ecuación Diferencial Estocástica]

Un proceso estocástico $\{X(t)\}_{t_0 \le t \le T}$ es llamado solución de la ecuación (A.2.10) si

tiene las siguientes propiedades:

- 1. $\{X(t)\}\ es\ \Lambda_t\ adaptada\ y\ continua\ (i.e.,\ que\ para\ casi\ todo\ \omega\in\mathbb{R},\ la\ función X(t)(\omega)\ es\ continua).$
- 2. $\{f(x(t),t)\} \in \mathfrak{L}^1([t_0,T];\mathbb{R}) \ y \ \{g(x(t),t)\} \in \mathfrak{L}^2([t_0,T];\mathbb{R}).$
- 3. La ecuación (A.2.11) se verifica para cada $t \in [t_0, T]$ con probabilidad 1.

Una solución $\{X(t)\}$ se dice única si cualquier otra solución $\{\overline{X}(t)\}$ es indistinguible de $\{X(t)\}$, esto es

$$P\{X(t) = \bar{X}(t) \ \forall t_0 \le t \le T\} = 1.$$
(A.2.12)

Bajo esta definición, podría no haber una única solución en el intervalo $[t_0, T]$. Las condiciones bajo las cuales garantizamos existencia y unicidad de la solución a la ecuación (A.2.10) son las siguientes [32]:

Notación A.2.1. $a \lor b := max\{a, b\}$

Teorema A.2.1. Supongamos que existen dos constantes positivas $k \ y \ \bar{k}$ tales que

1. (Condición de Lipchitz) Para todo $x, y \in \mathbb{R}$ $y \ t \in [t_0, T]$

$$|f(x,t) - f(y,t)|^{2} \vee |g(x,t) - g(y,t)|^{2} \le \bar{k}|x-y|^{2};$$
(A.2.13)

2. (Condición linear de crecimiento) Para todo $(x,t) \in \mathbb{R} \times [t_0,T]$

$$|f(x,t)|^2 \vee |g(x,t)|^2 \le k(1+|x|^2). \tag{A.2.14}$$

Entonces existe una única solución X(t) a la ecuación (A.2.10) y la solución pertenece a $\mathfrak{M}^2([t_0, T]; \mathbb{R})$.

Bibliografía

- [1] BALSARA D.S. Y SHU C.W., Monotonicity preserving WENO schemes with increasingly high-order of accuracy, J. Comput. Phys. 160, 405-452, 2000.
- [2] BAUZET C., Time-splitting approximation of the Cauchy problem for a stochastic conservation law, Mathematics and Computers in Simulation 118 (2015): 73-86.
- [3] BAUZET C., VALLET G. Y WITTBOLD P., The Cauchy problem for conservation laws with a multiplicative stochastic perturbation, J. Hyperbolic Differ. Equ., 9(4):661–709, 2012.
- [4] BEAR J., *Dynamics of fluids in porous media*, American Elsevier Publishing Company, 1972.
- [5] BENSOUSSAN A., GLOWINSKI R. Y RASCANU A., Approximation of some stochastic differential equations by the splitting up method, Appl. Math. Optim. 25 (1992), 81-106.
- [6] BISWAS I.H., KARLSEN K.H. Y MAJEE A. K., Conservation laws driven by Lévy white noise, J. Hyperbolic Differ. Equ., 12(3):581–654, 2015.
- [7] CHEN G., DING Q. Y KARLSEN K. H., On nonlinear stochastic balance laws, Arch. Ration. Mech. Anal., 204(3):707–743, 2012.
- [8] COOPER J.M., Introduction to Partial Differential Equations with MATLAB, Springer Science & Business Media, 2012.
- [9] COURANT R., FRIEDRICHS K.O. Y LEWY H., Uber die partiellen Differenzengleichungen der mathematisches Physik, Math. Ann, 100 (1928), 32-74.
- [10] DE SMEDT F., BREVIS W. Y DEBELS P., Analytical solution for solute transport resulting from instantaneous injection in streams with transient storage, Journal of Hydrology 315.1 (2005): 25-39.
- [11] EVJE S. Y KARLSEN K.H., Degenerate convection-diffusion equations and implicit monotone difference schemes, Birkhäuser Basel, 1999.
- [12] EVANS L.C., Partial Differential Equations, 2010.
- [13] FAIRES J.D. Y BURDEN R. Numerical Methods, Pacific Grove, CA, USA (1998).
- [14] GE J., KIM K.I., LIN Z. Y ZHU H., A SIS reaction-diffusion-advection model in a low-risk and high-risk domain, Journal of Differential Equations, 259(10), 5486-5509.
- [15] GODUNOV S.K., Finite difference methods for numerical computations of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics, Mat. Sb. 47 (1959), 271-295.
- [16] GRAY A., GREENHALGH D., HU, L., MAO, X. Y PAN J. A stochastic differential equation SIS epidemic model. SIAM Journal on Applied Mathematics, 71(3), 876-902, (2011).
- [17] DALAL N., GREENHALGH D. Y MAO, X., A stochastic model of AIDS and condom use, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 325(1), 36-53, 2007.
- [18] HARTEN A., High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, J. Comput. Phys., 49 (1983), 357-393.
- [19] HARTEN A. Y ZWAS G., Self-adjusting hybrid schemes for shock computatons, J.Comput. Phys., 9:568 (1972)
- [20] HIGHAM D.J., An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations, SIAM review 43.3 (2001): 525-546.

- [21] HOLDEN H. Y RISEBRO N.H., Conservation Laws with a Random Source, Appl. Marth. Optim., 36, 229-241, 1997.
- [22] HU J. Y MAO D.. A Conservative Front-Tracking Method for Scalar Conservation Laws in One Space Dimension with Nonconvex Flux, System Simulation and Scientific Computing (2012): 79-86.
- [23] JEREZ S. Y ARCIGA M., Switch Flux Limiter Method for Viscous and Nonviscous Conservation Laws, Applied Mathematics and Computation 246, 292-305.
- [24] S. JEREZ Y M. UH, A new TVD flux-limiter scheme for solving nonlinear hyperbolic equations, J. Comput. Appl. Math. 234 1395, 639-681, 1980.
- [25] KARLSEN K.H., KOLEY U. Y RISEBRO N.H., An error estimate for the finite difference approximation to degenerate convection-diffusion equations, Numerische Mathematik, 121(2), 367-395, 2012.
- [26] BORIS J.P. Y BOOK D.L., Flux corrected transport, Journal of computational physics 135.2 (1997): 172-186.
- [27] KARLSEN K.H. Y RISEBRO N.H., On the uniqueness and stability of entropy solutions of nonlinear degenerate parabolic equations with rough coefficients, Discrete Contin. Dyn. Syst. 9(5) 1081-1104, 2003.
- [28] KRÖKER I., Finite Volume Methods for Conservation Laws with Noise, Finite volumes for complex applications V (2008): 527-534.
- [29] LANDAJUELA M., Burgers Equation, BCAM Internship-summer (2011).
- [30] LEVEQUE R.L., Numerical Methods for Conservation Laws, Springer Science & Business Media, 1992.
- [31] LIU X., OSHER S. Y CHAN T., Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes, J.Comput. Phys. 115 (1), 200-212, 1994.
- [32] MAO X., Stochastic Differential Equations and Applications, Elsevier, 2007.

- [33] ORTEGA J. Y RIVERO V., Notas del curso de Modelos Estocásticos I, http://www.cimat.mx
- [34] OSHER S. Y CHAKRAVARTHY S. High resolution schemes and the entropy condition, SIAM J. Num. Anal., 21 (1984), 995-984.
- [35] SHANDARIN S.E. Y ZELDOVICH Y.B., The large-scale structure of the universe: Turbulence, intermittency, structures in a self-gravitating medium, Rev. Mod. Phys. 61 (1989), 185-220.
- [36] SERRANO S.E., Semianalytical methods in stochastic groundwater transport, Applied mathematical modelling 16.4 (1992): 181-191.
- [37] SEYDAOGLU M., ERDOGĂN U. Y ÖZIS T., Numerical Solution of the Burgers' Equation with High Order Splitting Methods, Journal of Computational and Applied Mathematics 291 (2016): 410-421.
- [38] TARTAKOVSKY D.M. Y SVETLANA B., *PDF equations for advective-reactive transport in heterogeneous porous media with uncertain properties*, Journal of contaminant hydrology 120 (2011): 129-140.
- [39] TORO E.F., Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. A Practical Introduction, Third Edition, Springel 2009.
- [40] WU Z.Q. Y YIN J.X., Some properties of functions in BVx and their applications to the uniqueness of solutions for degenerate quasilinear parabolic equations, Northeast. Math. J.,5(4), 395-422,1989.