



FACULTADE DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

Resolución numérica de ecuacións de Fokker-Planck nunha dimensión espacial

Javier López Pedrares

2019/2020

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

GRAO DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

Resolución numérica de ecuacións de Fokker-Planck nunha dimensión espacial

Javier López Pedrares

Xullo 2020

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Traballo proposto

Área de Coñecemento: Matemática Aplicada
Título: Resolución numérica de ecuacións de Fokker-Planck nunha dimensión espacial
Breve descrición do contido
Resolveranse algúns modelos de transporte de partículas cargadas, como electróns ou ións pesados. Os métodos numéricos estarán baseados en métodos de diferenzas finitas.
Titor: Óscar López Pouso

Índice xeral

Resumo	VII
Introdución	IX
1. Esquema numérico	1
2. Interpretación física	9
3. Implementación do esquema	13
4. Resultados numéricos	21
Anexos	31
Anexo I: Fórmulas de derivación numérica	33
Anexo II: Códigos Matlab	37
Bibliografía	43

Resumo

O traballo comeza introducindo un coñecido problema no mundo da física, o cal formulamos matematicamente. Posteriormente continuamos describindo un esquema numérico que permite obter unha solución para o problema baseado nas diferenzas finitas.

Ademais dunha formulación matemática apórtase unha visión e unha explicación física do problema. Finalmente, describimos o algoritmo iterativo que resolve o problema e implementámolo en Matlab para obter resultados numéricos.

Abstract

The article starts introducing a well-known physics problem, that we go to formulate mathematically. Then, we continue describing a numeric scheme that allows obtain a solution of our problem based on finite differences.

In addition to a mathematical formulation we show a little sight and a physical explanation of the problem. At the end, we finish with the iterative algorithm's description that solves the problem and we implement it on Matlab to obtain numerical results.

Introdución

A idea última deste traballo será achar unha función que resolva un problema coñecido. Trátase así de describir un esquema numérico baseado nas diferenzas finitas para resolver o problema e finalmente comprobar a eficacia do esquema obtido con diferentes tests.

O problema radica entón en atopar unha función

$$\psi : (\mu, z) \in Q = [-1, 1] \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}] \rightarrow \psi(\mu, z) \in \mathbb{R},$$

onde $Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}} \in \mathbb{R}$, $Z_{\text{ini}} < Z_{\text{fin}}$ e que ψ sexa solución do problema de difusión definido pola seguinte ecuación en derivadas parciais:

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \alpha \psi - \sigma \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right] = W \text{ para } (\mu, z) \in Q \quad (1)$$

con condicións inicial e final (chamadas condicións de fluxo entrante no noso problema):

$$\psi(\mu, Z_{\text{ini}}) = f(\mu) \text{ para } \mu \in (0, 1], \quad (2)$$

$$\psi(\mu, Z_{\text{fin}}) = g(\mu) \text{ para } \mu \in [-1, 0). \quad (3)$$

Nas ecuacións anteriores consideramos que α , σ , W , f e g son funcións coñecidas nos seus correspondentes dominios. Ademais engadimos as hipóteses $\alpha \geq 0$ e $\sigma > 0$.

O conxunto de ditas ecuacións dende o punto de vista da física chámase problema unidimensional de Fokker-Planck.

Trataremos de atopar solucións ψ que sexan continuas no rectángulo compacto Q . O termo da difusión aporta regularidade, pero se dito termo desaparece, ou sexa cando $\sigma = 0$, podemos atopar discontinuidades na solución ψ .

Para conseguir a continuidade desexada sobre ψ son necesarias as seguintes condicións:

$$f \in \mathcal{C}((0, 1]), \quad g \in \mathcal{C}([-1, 0)), \quad (4)$$

$$\lim_{\mu \rightarrow 0^+} f(\mu), \quad \lim_{\mu \rightarrow 0^-} g(\mu) \text{ deben existir en } \mathbb{R}. \quad (5)$$

Equivalentemente, ditas condicións consisten en esixir a continuidade no compacto $[0, 1]$ para a función f e a continuidade no compacto $[-1, 0]$ para a función g .

Prestando atención ao dito anteriormente observamos a ausencia de condicións de contorno no noso problema, algo que pode soar estraño no ámbito de problemas con ecuacións en derivadas parciais. Esta falta débese a que en ámbolos dous extremos temos que o termo da difusividade interna, $D(\mu) = 1 - \mu^2$, se volve nulo. Se impoñemos condicións de contorno o que obteríamos sería un problema sobredeterminado, pois co problema descrito nas ecuacións (1), (2) e (3) obtemos xa os valores da solución ψ para $\mu = \pm 1$.

Agora trataremos empregando a derivación numérica obter un esquema numérico para resolver este tipo de ecuacións.

Capítulo 1

Esquema numérico

Este tipo de ecuacións, se as reinterpretamos, podemos observar que posúen moitas similitudes coa ecuación da calor unidimensional. Así poderemos apoiarnos en esquemas que se empregan para a resolución de dito problema para atopar solución ao noso problema de Fokker-Planck.

O noso problema partía do rectángulo compacto $Q = [-1, 1] \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$. Vamos dividir este rectángulo para traballar máis comodamente. Sexan $Q_+ = (0, 1] \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$, o segmento $Q_0 = \{0\} \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$ e $Q_- = [-1, 0) \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$. Ademais para simplificar as nosas contas vamos reescribir o termo da difusividade interna do seguinte xeito $D(\mu) = 1 - \mu^2$. Chamamos a $D(\mu)$ difusividade interna e a σ difusividade externa.

Temos así un problema definido en ambas partes do rectángulo, no lado esquerdo definido por $g(\mu)$ e no lado dereito por $f(\mu)$. Pero os problemas non son independentes, pois temos que buscar unha solución definida en todo o rectángulo Q .

En cada parte do rectángulo temos dous tipos de problemas distintos. En Q_- temos un problema de valor final (PVF) e pola contra en Q_+ é un problema de valor inicial (PVI). Isto é obvio pois sae de impoñer as ecuacións (2) e (3) para que o problema quede ben definido. O valor da solución en ámbolos dous lados proporcionará axuda para obter a solución no segmento Q_0 . Así centrarémonos en desenvolver un algoritmo iterativo que resolva o problema a cada lado por ascenso e descenso, respectivamente, e despois poñamos actualizar os datos no segmento Q_0 para poder achegarnos a unha solución global iterativamente.

Na figura 1.1 móstrase un bosquejo do dominio de traballo coa súa correspondente partición.

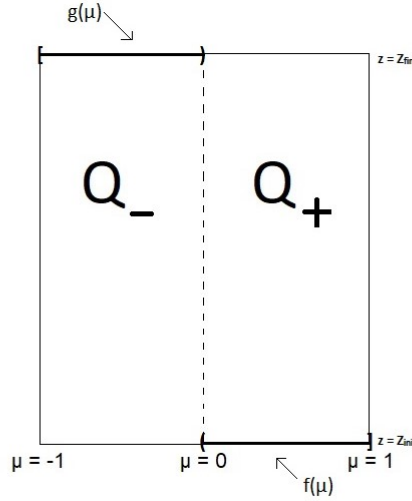


Figura 1.1: As liñas máis grosas da fronteira de Q denotan o conxunto de puntos no cal a solución ψ ven dada polas funcións f e g .

Procedamos logo cos primeiros pasos e coa notación que empregaremos para obter o esquema numérico.

En primeiro lugar temos que discretizar o noso dominio Q , logo sexan:

$$-1 = \mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_{I-1} < \mu_I = 1 \quad (1.1)$$

e

$$Z_{ini} = z_1 < z_2 < \dots < z_{N-1} < z_N = Z_{fin}. \quad (1.2)$$

Estes nodos anteriormente descritos son os que conformarán a nosa malla de traballo e na cal vamos aproximar a solución buscada ψ . Imos a supoñer que estes nodos están equiespaciados, temos así:

$$\mu_i = -1 + (i-1)h \text{ para } i \in \{1, \dots, I\}, \text{ con } h = \frac{1 - (-1)}{I-1} = \frac{2}{I-1} = \Delta\mu \quad (1.3)$$

e analogamente

$$z_n = Z_{ini} + (n-1)k \text{ para } n \in \{1, \dots, N\}, \text{ con } k = \frac{Z_{fin} - Z_{ini}}{N-1} = \Delta z. \quad (1.4)$$

Para que estas definicións teñan sentido é necesario que $I, N > 1$. Acabamos de construír así para $I, N \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$ dúas mallas uniformes.

Na figura 1.2 móstrase o mallado construído anteriormente.

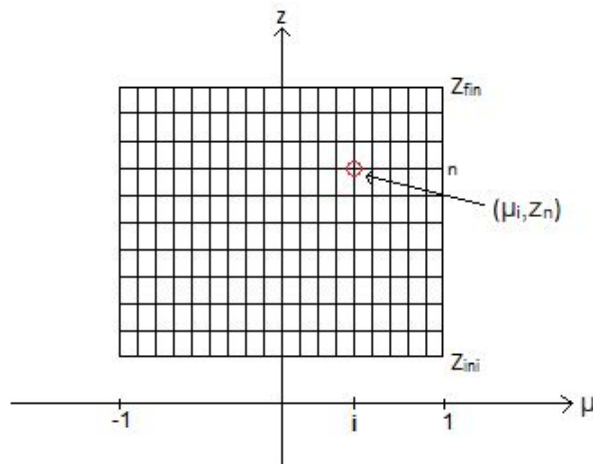


Figura 1.2: Os puntos da malla son aqueles nos que vamos obter as aproximacións da función ψ .

Ademais deste mallado que acabamos de crear teremos que empregar unha notación que nos faga máis simple a expresión e derivación do noso esquema.

Consideremos así a seguinte notación:

- Dada unha función \mathcal{F} de parámetro μ , $\overline{\mathcal{F}}_i = \mathcal{F}(\mu_i)$ e $\overline{\mathcal{F}}_{i\pm\frac{1}{2}} = \mathcal{F}(\mu_i \pm \frac{h}{2})$.
- Para unha función \mathcal{G} de parámetros (μ, z) , $\overline{\mathcal{G}}_i^n = \mathcal{G}(\mu_i, z_n)$.
- Chamaremos ψ_i^n á aproximación de ψ no punto da malla (μ_i, z_n) , ou sexa $\psi_i^n \approx \psi(\mu_i, z_n) =: \overline{\psi}_i^n$.
- Cando avancemos unicamente medio paso escribiremos $z_{n+\frac{1}{2}} = z_n + \frac{k}{2}$.

Considerando a ecuación (1) podemos despxear do seguinte xeito:

$$\mu_i \frac{\partial \psi}{\partial z}(\mu_i, z_m) = \overline{W}_i^m - \overline{\alpha}_i^m \overline{\psi}_i^m + \overline{\sigma}_i^m \frac{\partial}{\partial \mu} \left[D(\mu) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right]_{(\mu, z) = (\mu_i, z_m)}. \quad (1.5)$$

Agora ben podemos apoiarnos no esquema de Crank-Nicolson e temos as seguintes aproximacións de orde $\mathcal{O}(k^2)$:

$$\mu_i \frac{\overline{\psi}_i^{n+1} - \overline{\psi}_i^n}{k} \stackrel{\mathcal{O}(k^2)}{\approx} \mu_i \frac{\partial \psi}{\partial z}(\mu_i, z_{n+\frac{1}{2}}) \stackrel{\mathcal{O}(k^2)}{\approx} \frac{\mu_i}{2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}(\mu_i, z_n) + \frac{\partial \psi}{\partial z}(\mu_i, z_{n+1}) \right). \quad (1.6)$$

Así acabamos de discretizar unha primeira parte do noso problema, agora precisamos discretizar o termo da difusividade. Dependendo do punto da malla onde nos atopemos este termo pode ser nulo (cando $\mu = \pm 1$); entón consideramos os seguintes casos:

- (1) Se nos atopamos en $i = 1$, ou sexa $\mu_1 = -1$ temos que $D(\mu_1) = 1 - \mu_1^2 = 1 - (-1)^2 = 1 - 1 = 0$, i.e., $\bar{D}_1 = 0$. Neste caso podemos realizar a seguinte discretización:

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left[D(\mu) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right]_{(\mu,z)=(\mu_1,z_m)} \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{4\bar{D}_2 \frac{\partial \psi}{\partial \mu}(\mu_2, z_m) - \bar{D}_3 \frac{\partial \psi}{\partial \mu}(\mu_3, z_m)}{2h} \quad (1.7)$$

e cando nos atopamos con $r \in \{2, 3\}$, empregamos a fórmula estándar centrada en dous puntos para discretizar as derivadas de primeira orde que aparecen na ecuación anterior:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \mu}(\mu_r, z_m) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{\bar{\psi}_{r+1}^m - \bar{\psi}_{r-1}^m}{2h}. \quad (1.8)$$

- (2) Aquí analizamos os nodos interiores da malla, ou sexa, $i \in \{2, \dots, I-1\}$. Aquí basta empregar a fórmula estándar de segunda orde centrada:

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left[D(\mu) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right]_{(\mu,z)=(\mu_i,z_m)} \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{\bar{D}_{i-\frac{1}{2}} \bar{\psi}_{i-1}^m - \left(\bar{D}_{i-\frac{1}{2}} + \bar{D}_{i+\frac{1}{2}} \right) \bar{\psi}_i^m + \bar{D}_{i+\frac{1}{2}} \bar{\psi}_{i+1}^m}{h^2}. \quad (1.9)$$

- (3) Queda estudar a discretización no nodo final, ou sexa en $\mu_I = 1$. Atopamos de novo unha difusión nula, logo procedemos analogamente que no primeiro caso:

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left[D(\mu) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right]_{(\mu,z)=(\mu_I,z_m)} \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{\bar{D}_{I-2} \frac{\partial \psi}{\partial \mu}(\mu_{I-2}, z_m) - 4\bar{D}_{I-1} \frac{\partial \psi}{\partial \mu}(\mu_{I-1}, z_m)}{2h} \quad (1.10)$$

e de novo para $r \in \{I-2, I-1\}$ procédese igual que en (1.8).

Agora que xa temos discretizadas as derivadas do noso problema, podemos proceder a describir o esquema numérico completo que nos leva a atopar a solución ψ .

Teremos que prestar especial atención ao número de ecuacións resultantes, pois dependendo da paridade de I atoparemos que o número de ecuacións non coincide co de incógnitas. En vista ás formulas de discretización sinaladas antes precisamos esixir alomenos que $I \geq 4$ e $N > 2$. Procedamos así a describir o esquema numérico de novo separando en casos como fixemos para discretizar:

- Para $(i, n) \in \{1\} \times \{1, \dots, N-1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\mu_1}{k} + \frac{\bar{\alpha}_1^n}{2} + \frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_1^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_2^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_3^n + \\
& \quad + \left(\frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_4^n + \left(\frac{\mu_1}{k} + \frac{\bar{\alpha}_1^{n+1}}{2} + \frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_1^{n+1} + \\
& \quad + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_2^{n+1} + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_3^{n+1} + \\
& \quad + \left(\frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_4^{n+1} = \frac{\bar{W}_1^n + \bar{W}_1^{n+1}}{2}.
\end{aligned} \tag{1.11}$$

- Para $(i, n) \in \{2, \dots, I-1\} \times \{1, \dots, N-1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^n \bar{D}_{i-\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i-1}^n + \\
& \quad + \left(-\frac{\mu_i}{k} + \frac{\bar{\alpha}_i^n}{2} + \frac{\bar{\sigma}_i^n (\bar{D}_{i-\frac{1}{2}} + \bar{D}_{i+\frac{1}{2}})}{2h^2} \right) \psi_i^n + \\
& \quad + \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^n \bar{D}_{i+\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i+1}^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^{n+1} \bar{D}_{i-\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i-1}^{n+1} + \\
& \quad + \left(\frac{\mu_i}{k} + \frac{\bar{\alpha}_i^{n+1}}{2} + \frac{\bar{\sigma}_i^{n+1} (\bar{D}_{i-\frac{1}{2}} + \bar{D}_{i+\frac{1}{2}})}{2h^2} \right) \psi_i^{n+1} + \\
& \quad + \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^{n+1} \bar{D}_{i+\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i+1}^{n+1} = \frac{\bar{W}_i^n + \bar{W}_i^{n+1}}{2}.
\end{aligned} \tag{1.12}$$

- Para $(i, n) \in \{I\} \times \{1, \dots, N-1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-3}^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_{I-2}^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-1}^n + \\
& \quad + \left(-\frac{\mu_I}{k} + \frac{\bar{\alpha}_I^n}{2} + \frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_I^n + \left(\frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-3}^{n+1} + \\
& \quad + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_{I-2}^{n+1} + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-1}^{n+1} + \\
& \quad + \left(\frac{\mu_I}{k} + \frac{\bar{\alpha}_I^{n+1}}{2} + \frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_I^{n+1} = \frac{\bar{W}_I^n + \bar{W}_I^{n+1}}{2}.
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Temos así completamente descrito o esquema numérico que nos permite resolver o problema definido polas ecuacións (1), (2) e (3). Pero atopámonos cun problema pois nun determinado caso o número de ecuacións non coincide co de incógnitas.

Para estudar dita problemática basta considerar un I impar. O número de incógnitas que temos é $I \times N$, pero pola contra o esquema que acabamos de describir unicamente posúe $I \times (N - 1)$ ecuacións. Agora ben temos que comprobar se as ecuacións (condicións de fluxo entrante) (2) e (3) proporcionan ecuacións suficientes para solventar este desaxuste. Así pois dependerá da paridade de I o número de ecuacións proporcionadas. Cando I é par proporcionan I ecuacións, pero cando é I impar unicamente proporcionan $I - 1$ ecuacións. Así temos que cando I é impar falta unha ecuación e non podemos resolver o esquema proposto anteriormente.

Se I é par resolvemos o problema empregando o esquema tal como foi descrito. A continuación describimos como completar o esquema para I impar.

Sexa I impar, logo é obvio que $\mu_{\frac{I+1}{2}} = 0$ simplemente por construción. En primeira instancia podemos pensar en empregar unha das condicións numéricas inicial ou final:

$$\psi_{\frac{I+1}{2}}^1 = f(0) \text{ ou } \psi_{\frac{I+1}{2}}^N = g(0), \quad (1.14)$$

pero en realidade a interese radica en impoñer as dúas condicións debido a que estamos interesados en obter solucións continuas.

Entón o que facemos é eliminar as $N - 1$ ecuacións correspondentes a $i = \frac{I+1}{2}$ para impoñer as condicións numéricas anteriores e así considerar un novo conxunto de $N - 2$ ecuacións para $\mu = 0$ e os nodos do intervalo $(Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}})$. Entón para $\mu = 0$ a ecuación (1) reescríbese como:

$$\alpha(0, z)\psi(0, z) - \sigma(0, z)\frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2}(0, z) = W(0, z) \text{ para } z \in [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]. \quad (1.15)$$

Vexamos que efectivamente se verifica o anterior. Para substituír en $\mu = 0$ precisamos antes derivar o termo que leva a difusión empregando a regra de derivación do produto e posteriormente evaluar en $\mu = 0$. Derivemos entón:

$$\frac{\partial}{\partial\mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial\psi}{\partial\mu} \right] = -2\mu \frac{\partial\psi}{\partial\mu} + (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial\mu} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\mu} \right) = -2\mu \frac{\partial\psi}{\partial\mu} + (1 - \mu^2) \frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2}. \quad (1.16)$$

Agora se substituímos para $\mu = 0$ temos:

$$\frac{\partial}{\partial\mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial\psi}{\partial\mu} \right]_{(\mu, z)=(0, z)} = -2 \cdot 0 \frac{\partial\psi}{\partial\mu}(0, z) + (1 - 0^2) \frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2}(0, z) = \frac{\partial^2\psi}{\partial\mu^2}(0, z), \quad (1.17)$$

que efectivamente é o que empregamos en (1.15).

Se pensamos no intervalo aberto $(Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}})$ a ecuación (1.15) suxire:

$$\alpha_{i^*}^n \psi_{i^*}^n - \sigma_{i^*}^n \frac{\psi_{i^*-1}^n - 2\psi_{i^*}^n + \psi_{i^*+1}^n}{h^2} = \overline{W}_{i^*}^n \text{ para } n \in \{2, \dots, N - 1\}, \quad (1.18)$$

sendo $i^* = \frac{I+1}{2}$. O anterior pode reescribirse do seguinte xeito:

$$\left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right)\psi_{i^*-1}^n + \left(\bar{\alpha}_{i^*}^n + \frac{2\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right)\psi_{i^*}^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right)\psi_{i^*+1}^n = \bar{W}_{i^*}^n \quad (1.19)$$

para $n \in \{2, \dots, N-1\}$.

Entón o esquema final para o caso I impar consiste no descrito restándolle as $N-1$ ecuacións correspondentes a $i = \frac{I+1}{2}$, engandindo as condicións de contorno numéricas (1.14) e as $N-2$ ecuacións (1.19) que acabamos de obter.

Como comentaremos máis adiante implementaremos o esquema para o caso I impar pois obtéñense mellores resultados.

Capítulo 2

Interpretación física

A ecuación de Fokker-Planck (EFP) ten unha interesante interpretación física. Imos mostrar a relación do noso problema coa ecuación do transporte de Boltzmann (ETB).

A importancia do problema de Fokker-Planck radica pois en que a solución deste, ψ , é unha aproximación da solución do problema de Boltzmann en certas condicións. O interesante é estudar ditas condicións. Así pois a EFP é unha aproximación da de Boltzmann cando falamos do transporte de partículas que sofren pequenas desviacións na súa traxectoria ao impactar con outras partículas e pequenas perdas de carga. Neste caso falamos de dispersión ou “scattering”. Exemplos comúns de partículas que sofren ditos comportamentos son partículas cargadas como ións pesados ou electróns da codia do átomo que posúen carga negativa.

Ámbalas dúas ecuacións anteriores describen a densidade de fluxo angular de partículas, ψ . Ademais establecen o equilibrio entre as perdas e as ganancias de ψ ao longo das direccións de propagación. Dito doutro xeito estudan o gradiente de ψ ao longo de cada dirección do espazo tridimensional \mathbb{R}^3 .

Consideremos $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un dominio espacial e tomemos ω como dirección de propagación. Se escribimos ω en coordenadas esféricas temos:

$$\omega = \omega(\varphi, \theta) = (\text{sen } \varphi \cos \theta, \text{sen } \varphi \text{ sen } \theta, \cos \varphi) \in \mathbb{S}^2,$$

sendo \mathbb{S}^2 a esfera unitaria do espazo con $\varphi \in [0, \pi]$ o ángulo polar e $\theta \in [0, 2\pi)$ o ángulo acimutal.

Se o fluxo depende da posición $x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ unicamente a través de $x_3 = z$, temos que $\omega \cdot \nabla \psi = \omega_3 \frac{\partial \psi}{\partial z}$. Se na ecuación (1) consideramos $\mu = \omega_3$ obtemos exactamente o anterior, sendo ω a dirección de propagación. No noso caso estamos traballando sobre a ecuación unidimensional, entón o noso dominio será da forma $\Omega = \mathbb{R}^2 \times (Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}})$, o

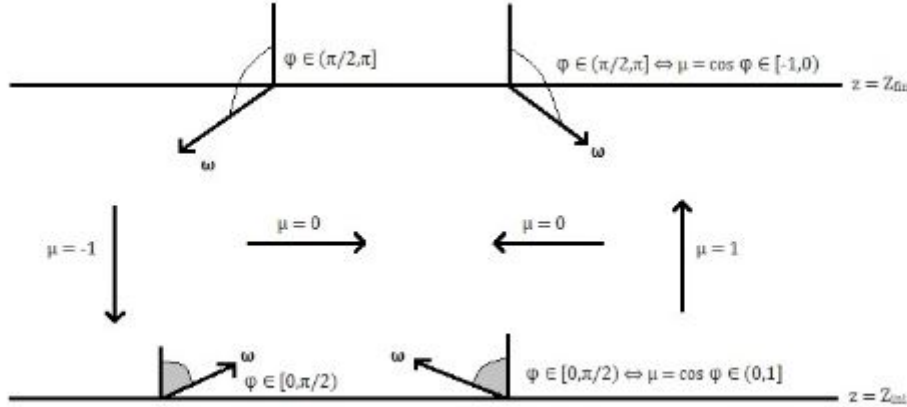


Figura 2.1: Sección do “slab” unidimensional.

cal adoita chamarse “slab” unidimensional. Unha pequena ilustración do anterior é a figura 2.1.

Agora ben, partimos de tres variables espaciais e imos reducilas a unicamente unha. Isto pódese facer grazas a que o fluxo, ψ , non varía nin con x_1 nin con x_2 e ademais o dominio anterior son copias do dominio unidimensional (Z_{ini}, Z_{fin}).

Se continuamos co descrito temos $\omega_3 = \mu = \cos \varphi$, con isto observamos trivialmente a razón de porque o parámetro μ varía entre 1 e -1 pois μ é o coseno dun ángulo.

Ao pensar na EFP unidimensional deixamos de depender do ángulo acimutal, entón unicamente temos o ángulo polar ou equivalentemente μ e así o operador

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \cdot}{\partial \mu} \right] \quad (2.1)$$

coñecido comunmente como o operador continuo de dispersión, o cal non é máis que o laplaciano sobre a esfera.

Podemos dicir así que a ecuación (1) é a EFP monoenergética supoñendo que a enerxía é constante no dominio unidimensional con simetría de xeometría plana e as ecuacións (2) e (3) imponen a densidade de fluxo de partículas que entra no dominio. Por isto último ditas ecuacións teñen o nome de condicións de fluxo entrante.

Como mencionamos ao final da Introducción o noso problema ten unha característica peculiar dentro das ecuacións en derivadas parciais: a ausencia de condicións de contorno para $|\mu| = 1$, ou sexa o operador (2.1) non proporciona ditas condicións. Isto débese a que o equilibrio dado pola EFP é suficiente para obter o fluxo angular unha vez coñecemos o fluxo a través da fronteira física. Entón impondo unhas condicións de contorno o que

faríamos sería sobredeterminar o problema.

Finalmente poñamos un significado físico a cada un dos termos que aparecen na ecuación (1):

- Por $\psi(\mu, z)$ denotamos á densidade de fluxo angular de partículas en (μ, z) . Dito doutro xeito é o número de partículas que se moven desde z ao longo da dirección $\omega(\mu)$ por unidade de área normal a $\omega(\mu)$, por unidade de ángulo sólido¹, por unidade de enerxía e por unidade de tempo.
- Cando falamos de movernos dende z na dirección de $\omega(\mu)$ referímonos claramente a movernos en (x_1, x_2, z) para calquera $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ fixos e ao longo da dirección

$$\omega(\mu) = \left(\sqrt{1 - \mu^2} \cos \theta, \sqrt{1 - \mu^2} \sin \theta, \mu \right)$$

para calquera ángulo $\theta \in [0, 2\pi)$ fixo.

- O primeiro termo da ecuación, $\mu \frac{\partial \psi}{\partial z}$, é a derivada direccional de $\psi(\mu, z)$ ao longo da dirección $\omega(\mu)$.
- Denotamos por α ao coeficiente de absorción, así pois $\alpha\psi$ describe as perdas por absorción.
- O termo $\sigma \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right]$ é o termo de difusión na variable angular.
- A función de dúas variables W representa unha fonte interna de partículas onde teña signo positivo, e un sumidoiro interno onde o signo sexa negativo.

¹Por ángulo sólido entendemos un ángulo espacial que abarca un obxecto cando é visto dende un punto.

Capítulo 3

Implementación do esquema

Como mencionamos no Capítulo 1 obtivemos dous esquemas distintos segundo a paridade de I . Tras a realización de diversos experimentos numéricos chegouse á conclusión de que era máis recomendable a implantación do esquema para I impar.

Tras os diversos experimentos realizados observouse que para o caso I impar non aparecían inestabilidades arredor de $\mu = 0$. Porén, no caso I par cando nos achegamos a Q_0 poden aparecer solucións que son inestables, presentando así oscilacións espurias.

En termos de implementación do esquema poderíamos considerar dous tipos de esquema:

- Método directo: un esquema no que resolvemos a ecuación en todo o dominio, Q . Consideramos unha gran matriz cadrada de dimensión $I \times N$ e tentamos en resolver o sistema linear completo asociado ao problema.
- Método iterativo: algoritmo no que se resolve o problema partindo dunha semente inicial en Q_0 , resolvemos por ascenso e descenso, respectivamente en Q_+ e Q_- , os problemas de valor inicial e final definidos polas funcións f e g . Realizamos este proceso ata que os valores obtidos en dúas iteracións sucesivas para a solución en Q_0 disten unha cantidade real positiva épsilon moi pequena. Ou tamén se non se acada converxencia dado un número de iteracións máximas.

Neste traballo centrarémonos na implementación do algoritmo iterativo para o caso I impar.

Consideremos entón de novo os conxuntos do dominio Q descritos ao comezo do Capítulo 1. Sexan entón $Q_+ = (0, 1] \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$, o segmento $Q_0 = \{0\} \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$ e $Q_- = [-1, 0) \times [Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}}]$ (ver figura 3.1).

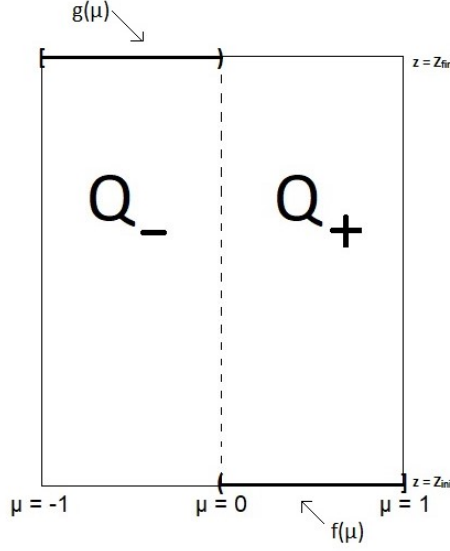


Figura 3.1: $Q = Q_- \cup Q_0 \cup Q_+$. As liñas discontinuas representan ao segmento Q_0 , ademais indícase onde a solución está definida polas condicións de fluxo entrante.

En primeiro lugar denotemos por $i^* = \frac{I+1}{2}$, ou sexa o i para o cal se ten $\mu_i = 0$. Ademais despois de discretizar o problema mediante fórmulas de derivación numérica para o caso I impar obtiveramos o seguinte esquema baseado nas diferenzas finitas, o cal vimos que posúe orde 2 con respecto ás variables μ, z grazas ás fórmulas empregadas.

A continuación amosamos o esquema obtido separado para os diferentes putos do mallado do dominio:

- Para $(i, n) \in \{1\} \times \{1, \dots, N-1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\mu_1}{k} + \frac{\bar{\alpha}_1^n}{2} + \frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_1^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_2^n + \\
& \quad + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_3^n + \left(\frac{\bar{\sigma}_1^n \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_4^n + \\
& \quad \left(\frac{\mu_1}{k} + \frac{\bar{\alpha}_1^{n+1}}{2} + \frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_1^{n+1} + \\
& \quad + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_2^{n+1} + \left(-\frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_2}{2h^2} \right) \psi_3^{n+1} + \\
& \quad + \left(\frac{\bar{\sigma}_1^{n+1} \bar{D}_3}{8h^2} \right) \psi_4^{n+1} = \frac{\bar{W}_1^n + \bar{W}_1^{n+1}}{2}.
\end{aligned} \tag{3.1}$$

- Para $(i, n) \in (\{2, \dots, i^* - 1\} \cup \{i^* + 1, \dots, I - 1\}) \times \{1, \dots, N - 1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^n \bar{D}_{i-\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i-1}^n + \\
& + \left(-\frac{\mu_i}{k} + \frac{\bar{\alpha}_i^n}{2} + \frac{\bar{\sigma}_i^n (\bar{D}_{i-\frac{1}{2}} + \bar{D}_{i+\frac{1}{2}})}{2h^2} \right) \psi_i^n + \\
& + \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^n \bar{D}_{i+\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i+1}^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^{n+1} \bar{D}_{i-\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i-1}^{n+1} + \\
& + \left(\frac{\mu_i}{k} + \frac{\bar{\alpha}_i^{n+1}}{2} + \frac{\bar{\sigma}_i^{n+1} (\bar{D}_{i-\frac{1}{2}} + \bar{D}_{i+\frac{1}{2}})}{2h^2} \right) \psi_i^{n+1} + \\
& + \left(-\frac{\bar{\sigma}_i^{n+1} \bar{D}_{i+\frac{1}{2}}}{2h^2} \right) \psi_{i+1}^{n+1} = \frac{\bar{W}_i^n + \bar{W}_i^{n+1}}{2}.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

- Para $(i, n) \in \{i^*\} \times \{2, \dots, N - 1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2} \right) \psi_{i^*-1}^n + \left(\bar{\alpha}_{i^*}^n + \frac{2\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2} \right) \psi_{i^*}^n + \\
& + \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2} \right) \psi_{i^*+1}^n = \bar{W}_{i^*}^n.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

- Para $(i, n) \in \{I\} \times \{1, \dots, N - 1\}$,

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-3}^n + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_{I-2}^n + \\
& + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-1}^n + \left(-\frac{\mu_I}{k} + \frac{\bar{\alpha}_I^n}{2} + \frac{\bar{\sigma}_I^n \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_I^n + \\
& + \left(\frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-3}^{n+1} + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_{I-2}^{n+1} + \\
& + \left(-\frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-2}}{8h^2} \right) \psi_{I-1}^{n+1} + \\
& + \left(\frac{\mu_I}{k} + \frac{\bar{\alpha}_I^{n+1}}{2} + \frac{\bar{\sigma}_I^{n+1} \bar{D}_{I-1}}{2h^2} \right) \psi_I^{n+1} = \frac{\bar{W}_I^n + \bar{W}_I^{n+1}}{2}.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

- Para $(i, n) \in \{i^*, \dots, I\} \times \{1\}$,

$$\psi_i^1 = \bar{f}_i. \tag{3.5}$$

- Para $(i, n) \in \{1, \dots, i^*\} \times \{N\}$,

$$\psi_i^N = \bar{g}_i. \tag{3.6}$$

Procedamos entón a describir as etapas do método iterativo:

ETAPA 0. Elección da semente:

Como é lóxico precisamos uns valores de arranque para o noso algoritmo iterativo no segmento $Q_0 = \{0\} \times (Z_{\text{ini}}, Z_{\text{fin}})$:

$$(\psi_{i^*}^n)^{[0]} \text{ para } n \in \{2, \dots, N-1\}. \quad (3.7)$$

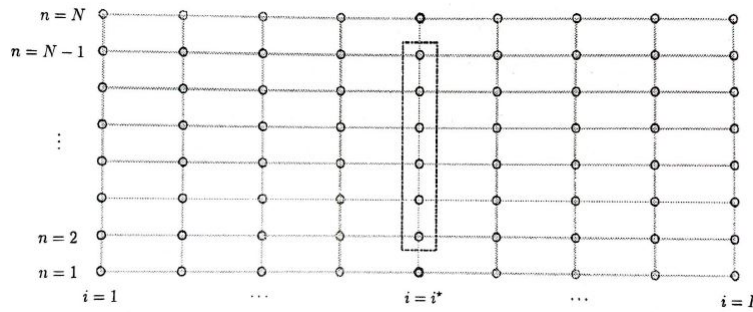


Figura 3.2: Os puntos recadrados son aqueles nos cales proporcionamos os valores de arranque.

Os puntos anteriores reciben o nome de semente do esquema iterativo e na figura 3.2 sinalamos os puntos nos cales asignamos dita semente.

Como é obvio podemos realizar eleccións moi dispares da semente, como por exemplo considerar $(\psi_{i^*}^n)^{[0]} = 0$ para $n \in \{2, \dots, N-1\}$. Existen moitas maneiras de escoller dita semente e segundo consideremos unha ou outra elección acadaremos a converxencia do algoritmo en máis ou menos iteracións, pois tras múltiples estudos sábese que dito esquema converxe globalmente¹. Así poderíamos escoller calquera semente que sabemos que nun número finito de iteracións acadaríamos a converxencia do método.

Vexamos entón unha idea lóxica de como escoller a semente partindo de que coñecemos o valor da solución para os pares $(Z_{\text{ini}}, f(0))$ e $(Z_{\text{fin}}, g(0))$. Unha idea simple

¹Cando nos referimos a unha converxencia global do esquema queremos referirnos a que tras a realización de experimentos numéricos o esquema leva a unha solución nun número finito de iteracións sempre e cando non se introduzan parámetros que repercutan na inestabilidade do propio esquema. Un destes parámetros é o parámetro de relaxación ω do cal falamos na ETAPA 3.

será entón considerar a liña que une estes pares de puntos:

$$(\psi_{i^*}^n)^{[0]} = f(0) + [g(0) - f(0)] \frac{n-1}{N-1} \text{ para } n \in \{2, \dots, N-1\}. \quad (3.8)$$

A semente dada pola ecuación (3.8), tras os experimentos numéricos, é a que mellores resultados proporciona. Porén non se ten unha expresión da semente para a optimalidade do esquema.

ETAPA 1. Cálculo dos valores en Q_+ na iteración $q+1$:

Neste paso o que faremos é calcular os valores da solución en Q_+ na iteración $q+1$, supoñendo coñecidos os valores na iteración q .

Sexa entón un número $q \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ fixado, de xeito que os valores

$$(\psi_{i^*}^n)^{[q]} \text{ para } n \in \{2, \dots, N-1\} \quad (3.9)$$

son coñecidos, obteremos entón todos os valores da solución en Q_+ na iteración $q+1$, é dicir os valores,

$$(\psi_i^n)^{[q+1]} \text{ para } (i, n) \in \{i^* + 1, \dots, I\} \times \{1, \dots, N\}. \quad (3.10)$$

Ditos valores obtémolos como resultado de resolver as ecuacións (3.2, para $i \in \{i^* + 1, \dots, I-1\}$), (3.4) e (3.5), empregando os valores de contorno proporcionados pola ecuación (3.9).

Como ben podemos observar tentamos resolver un problema de valor inicial en Q_+ por ascenso, de xeito que en cada paso obtemos novos valores comezando cos valores que coñecemos para $z = Z_{\text{ini}}$ propocionados pola ecuación (3.5).

ETAPA 2. Cálculo dos valores en Q_- na iteración $q+1$:

Analogamente á etapa anterior calcularemos os valores da solución en Q_- na mesma iteración $q+1$, é dicir os valores,

$$(\psi_i^n)^{[q+1]} \text{ para } (i, n) \in \{1, \dots, i^* - 1\} \times \{1, \dots, N\}. \quad (3.11)$$

Ditos valores obtémolos como resultado de resolver as ecuacións (3.1), (3.2, para $i \in \{2, \dots, i^* - 1\}$) e (3.6), empregando os valores de contorno proporcionados pola mesma ecuación (3.9).

Como ben podemos observar neste caso tentamos resolver un problema de valor final en Q_- por descenso, de xeito que en cada paso obtemos novos valores comezando cos valores que coñecemos para $z = Z_{\text{fn}}$ propocionados pola ecuación (3.6).

ETAPA 3. Actualización (cálculo dos valores en Q_0 na iteración $q + 1$):

De novo chegada esta etapa existen diversos modos de actualizar os valores en Q_0 , de xeito que dependendo de como se actualicen ditos valores o método converxerá á solución en maior ou menor número de iteracións.

Un exemplo para actualizar os valores nos puntos do mallado en Q_0 podería ser empregar a ecuación (3.3). Entón os valores

$$(\psi_{i^*}^n)^{[q+1]} \text{ para } n \in \{2, \dots, N-1\}, \quad (3.12)$$

poderían actualizarse do seguinte xeito:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right) (\psi_{i^*-1}^n)^{[q+1]} + \left(\bar{\alpha}_{i^*}^n + \frac{2\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right) (\psi_{i^*}^n)^{[q+1]} + \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right) (\psi_{i^*+1}^n)^{[q+1]} = \\ = \bar{W}_{i^*}^n. \end{aligned} \quad (3.13)$$

A opción anterior é completamente válida para actualizar ditos valores, porén se queremos mellorar a converxencia debemos relaxar a actualización. A continuación describimos este proceso de relaxación:

Para comezar calculamos os valores

$$\left(\tilde{\psi}_{i^*}^n\right)^{[q+1]} \text{ para } n \in \{2, \dots, N-1\}, \quad (3.14)$$

empregando a ecuación:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right) (\psi_{i^*-1}^n)^{[q+1]} + \left(\bar{\alpha}_{i^*}^n + \frac{2\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right) (\psi_{i^*}^n)^{[q+1]} + \left(-\frac{\bar{\sigma}_{i^*}^n}{h^2}\right) (\psi_{i^*+1}^n)^{[q+1]} = \\ = \bar{W}_{i^*}^n, \end{aligned} \quad (3.15)$$

e posteriormente, os valores actualizados finais obtéñense do seguinte xeito:

$$(\psi_{i^*}^n)^{[q+1]} = \omega \left(\tilde{\psi}_{i^*}^n\right)^{[q+1]} + (1 - \omega) (\psi_{i^*}^n)^{[q]} \text{ para } n \in \{2, \dots, N-1\}, \quad (3.16)$$

sendo $\omega \in \mathbb{R}$ un parámetro de relaxación dado. Se escollemos $\omega = 1$ como é obvio non estamos realizando dito proceso de relaxación. Tomar $\omega = 0$ non é posible, pois non estaríamos realizando o proceso de actualización.

A introdución deste parámetro de relaxación non só inflúe na velocidade de converxencia do esquema, senón que alterar ω moi bruscamente pode producir diverxencia no esquema. Así aparecen grandes oscilacións e erros moi elevados. Esta alteración do parámetro de relaxación mostrarémola no nosos test numéricos.

ETAPA 4. Comprobación da converxencia:

Chegada esta etapa temos que decidir se seguir iterando ou quedarnos co valor que acabamos de obter para a solución na iteración $q + 1$. Para isto definimos un residuo e unha tolerancia de xeito que iteramos ata atopar un residuo máis pequeno que a tolerancia.

Sexan así os seguintes vectores $u^{[q]}, u^{[q+1]} \in \mathbb{R}^{N-2}$, definidos do seguinte xeito:

$$u_j^{[q]} = \left(\psi_{i^*}^{j+1} \right)^{[q]} \quad (3.17)$$

e

$$u_j^{[q+1]} = \left(\psi_{i^*}^{j+1} \right)^{[q+1]}, \quad (3.18)$$

para $j \in \{1, \dots, N - 2\}$.

Ao seguinte cociente denominarémolo residuo:

$$\frac{\|u^{[q+1]} - u^{[q]}\|}{1 + \|u^{[q+1]}\|}. \quad (3.19)$$

Entón diremos que o algoritmo converge con ε -tolerancia cando para unha cantidade real $\varepsilon > 0$ se verifica a seguinte desigualdade:

$$\frac{\|u^{[q+1]} - u^{[q]}\|}{1 + \|u^{[q+1]}\|} \leq \varepsilon, \quad (3.20)$$

onde entendemos que $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana en \mathbb{R}^{N-2} , aínda que podemos considerar outras normas en \mathbb{R}^{N-2} como poden ser a norma 1, $\|\cdot\|_1$, ou a norma infinito, $\|\cdot\|_\infty$.

Así pois se non se satisfai a ecuación (3.20) realizamos unha nova iteración, ou sexa tomamos $q = q + 1$ e voltamos á ETAPA 1. Porén, se se satisfai a ecuación (3.20) o algoritmo remata e os últimos valores que acabamos de obter serán a solución ao problema de Fokker-Planck. Dito doutro xeito a solución numérica do problema será:

$$\psi_i^n = \left(\psi_i^n \right)^{[q+1]}, \quad (3.21)$$

para $(i, n) \in \{1, \dots, I\} \times \{1, \dots, N\}$.

Capítulo 4

Resultados numéricos

Nesta sección mostraremos unha serie de resultados numéricos obtidos a partir do algoritmo iterativo que implementamos en Matlab.

Para todos os experimentos consideraremos $Z_{\text{ini}} = 0$, $Z_{\text{fin}} = 1$, $itmax = 2000$ (número de iteracións máximas) e tomaremos a seguinte tolerancia, $\varepsilon = 10^{-8}$.

Ademais, agás que así se indique, en todos os tests realizados emprégase como semente para inicializar o algoritmo a dada pola ecuación (3.8).

En canto notación, por $E_{\text{abs}}(Q)$ entendemos o seguinte:

$$E_{\text{abs}}(Q) = \max_Q |\psi_{\text{malla}} - \psi|,$$

sendo ψ_{malla} a solución aproximada e o máximo tómase sobre o conxunto de todos os nodos da malla.

As fórmulas que foron empregadas para a obtención do esquema numérico son exactas cando a solución exacta é polinómica de grao menor ou igual que 1 na variable μ e de grao menor ou igual que 2 para a variable z .

- **TEST 1.**

Supoñamos que a solución exacta é coñecida, entón sexa:

$$\psi(\mu, z) = \mu^2 z^2.$$

Logo realizando uns simples cálculos obtemos as funcións f , g e W substituindo nas

ecuacións (1)-(3):

$$\begin{aligned} f(\mu) &= \psi(\mu, Z_{\text{ini}}) = \psi(\mu, 0) = 0, \\ g(\mu) &= \psi(\mu, Z_{\text{fin}}) = \psi(\mu, 1) = \mu^2, \\ W(\mu, z) &= \mu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \alpha \psi - \sigma \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right] = \\ &= 2\mu z^3 + \alpha(\mu, z)\mu^2 z^2 - \sigma(\mu, z)z^2(2 - 6\mu^2), \end{aligned}$$

considerando:

$$\alpha(\mu, z) = |\text{sen}(12\mu z)|$$

e

$$\sigma(\mu, z) = 1 + \text{sen}(12\mu z) \cos(12\mu z).$$

Como podemos observar no cadro 4.1 aparece a terminoloxía (μ, z) , con isto referímonos ao punto da malla (μ_i, z_n) no que se atopa o erro máximo en valor absoluto. Tomaremos dita notación para os posteriores test e cadros.

Ademais tamén se intenta reflexar a orde de converxencia do esquema para iso realízase o seguinte:

Sexa $E(h, k)$ o erro máximo cometido na aproximación para unha malla de tamaño h - k e sexa c unha constante, logo se a orde é p tanto para h coma para k debe verificarse asintoticamente ($h, k \rightarrow 0$) a seguinte igualdade:

$$E(ch, ck) = c^p E(h, k).$$

Tomando logaritmos podemos despexar a orde, tense así:

$$p = \frac{\ln \left(\frac{E(ch, ck)}{E(h, k)} \right)}{\ln c}.$$

(I, N)	$E_{\text{abs}}(Q)$	(μ, z)	Iteracións	Orde
(11, 10)	1.26187×10^{-2}	(-1, 0.888...)	32	
(33, 10)	7.54505×10^{-4}	(-1, 0.888...)	88	2.2421760954
(101, 10)	7.82894×10^{-5}	(0.8, 1)	183	1.988398736
(321, 10)	8.08662×10^{-6}	(0.85625, 1)	256	1.951768725
(1001, 10)	4.98727×10^{-7}	(0.914, 1)	1	2.444991618
(1001, 901)	8.50361×10^{-7}	(0.814, 1)	504	

Cadro 4.1: Resultados numéricos para o test 1 considerando $\omega = 2$.

Por exemplo se consideramos $\frac{h}{2}$ e $\frac{k}{2}$, temos a seguinte constante $c = \frac{1}{2}$.

Para este exemplo observamos que ψ é polinómica de grao 2 na variable z . Pero non é polinómica de grao menor ou igual que 1 na variable μ , entón para obter mellores resultados o que facemos é refinar a malla en dita variable, ou sexa en h . Dito comportamento reflíctese tamén no cadro 4.1.

- **TEST 2.**

Supoñamos de novo que coñecemos a solución exacta ao problema, sexa así:

$$\psi(\mu, z) = \mu z^3.$$

Realizando os cálculos pertinentes obtemos:

$$\begin{aligned} f(\mu) &= \psi(\mu, Z_{\text{ini}}) = \psi(\mu, 0) = 0, \\ g(\mu) &= \psi(\mu, Z_{\text{fin}}) = \psi(\mu, 1) = \mu, \\ W(\mu, z) &= \mu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \alpha \psi - \sigma \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right] = \\ &= 3\mu^2 z^2 + \mu z^3 (\alpha(\mu, z) - 2\sigma(\mu, z)). \end{aligned}$$

Como podemos observar nos cadros 4.2 e 4.3 aparece o termo non converxencia, con isto referímonos a que non se acada a converxencia do método chegado o número de iteracións máximas. Porén, o algoritmo está a comportarse de maneira converxente pois o residuo calculado tras a iteración final achégase á tolerancia.

Por exemplo para o cadro 4.2 o último residuo calculado, onde aparece a non converxencia, é $res = 1.18673 \times 10^{-7}$, que como observamos achégase á tolerancia épsilon.

(I, N)	$E_{\text{abs}}(Q)$	(μ, z)	Iteracións	Orde
(11, 10)	2.81389×10^{-3}	(-1,0)	33	
(11, 29)	2.98535×10^{-4}	(-1,0)	405	1.976630514
(11, 91)	2.90146×10^{-5}	(-1,0)	Non converxencia	1.996469446
(11, 281)	3.00019×10^{-6}	(-1,0)	195	1.999263129
(11, 901)	2.89858×10^{-7}	(-1,0)	15	2.001566823
(1001, 901)	2.21538×10^{-7}	(-1,0)	102	

Cadro 4.2: Resultados numéricos para o test 2 considerando $\omega = 2$ e tomando de novo $\alpha(\mu, z) = |\text{sen}(12\mu z)|$ e $\sigma(\mu, z) = 1 + \text{sen}(12\mu z) \cos(12\mu z)$.

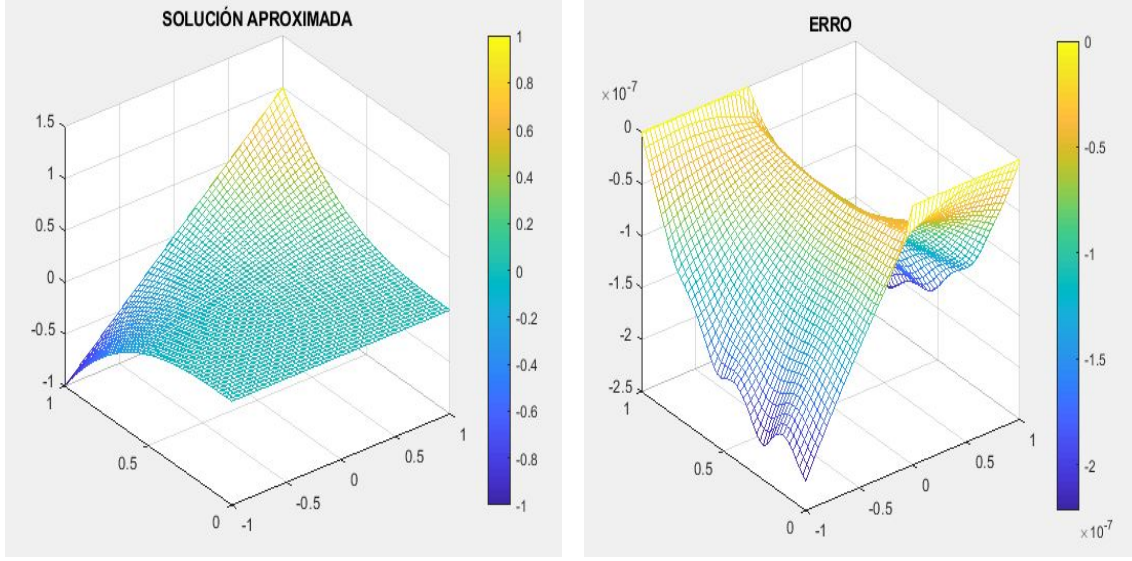


Figura 4.1: Solución aproximada obtida e erro cometido para o test 2 no caso $(I, N) = (1001, 901)$.

Neste segundo test observamos que a solución exacta ψ é polinómica de grao 1 na variable μ , porén non é de grao menor ou igual que 2 na variable z , logo aquí é de interese refinar a malla en z , ou sexa en k , como facemos no cadro 4.2.

- **TEST 3.**

Supoñamos que a solución exacta é coñecida, entón sexa:

$$\psi(\mu, z) = \ln(2 + \mu^2 + z^3).$$

Logo realizando uns sinxelos cálculos obtemos:

$$\begin{aligned} f(\mu) &= \psi(\mu, Z_{\text{ini}}) = \psi(\mu, 0) = \ln(2 + \mu^2), \\ g(\mu) &= \psi(\mu, Z_{\text{fin}}) = \psi(\mu, 1) = \ln(3 + \mu^2), \\ W(\mu, z) &= \mu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \alpha \psi - \sigma \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right] = \frac{3\mu z^2}{2 + \mu^2 + z^3} + \alpha(\mu, z) \ln(2 + \mu^2 + z^3) - \\ &\quad - \sigma(\mu, z) \left[-\frac{4\mu^2}{2 + \mu^2 + z^3} - 2(1 - \mu^2) \frac{\mu^2 - z^3 - 2}{(2 + \mu^2 + z^3)^2} \right]. \end{aligned}$$

De novo no cadro 4.3 aparece a non converxencia debido a que non se satisfai o test de parada chegado o número máximo de iteracións. Neste caso o último residuo calculado é $res = 7.17688 \times 10^{-7}$

(I, N)	$E_{\text{abs}}(Q)$	(μ, z)	Iteracións
(11, 10)	7.05208×10^{-3}	(-1,0)	42
(33, 29)	5.77633×10^{-4}	(-0.0625, 0.1787514)	136
(101, 91)	5.83623×10^{-5}	(-0.04, 0.1666...)	405
(321, 281)	4.73001×10^{-6}	(-0.09375, 0.1214286)	1191
(1001, 901)	2.33608×10^{-4}	(0, 222...)	Non converxencia

Cadro 4.3: Resultados numéricos para o test 3 considerando $\omega = 2$, $\alpha(\mu, z) = |\text{sen}(12\mu z)|$ e $\sigma(\mu, z) = 1 + \text{sen}(12\mu z) \cos(12\mu z)$.

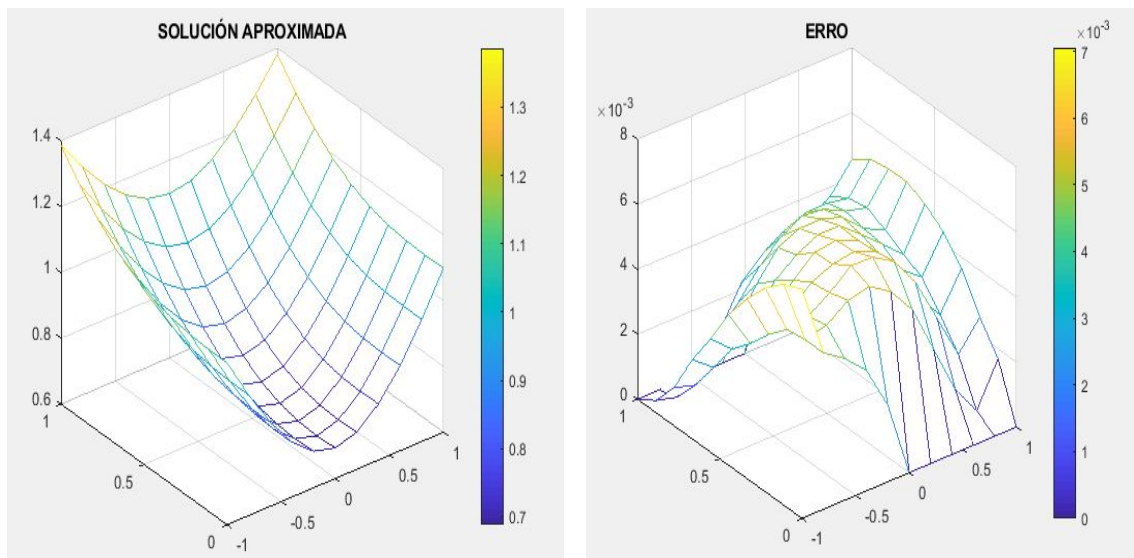


Figura 4.2: Solución aproximada obtida e erro cometido para o test 3 no caso $(I, N) = (11, 10)$.

- **TEST 4.** Problema de Kim-Tranquilli:

Na referencia [1] Kim e Tranquilli describen empregando a ecuación de Fokker-Planck o movemento de propagación da luz no interior dun tecido biolóxico. Presentamos na figura 4.3 imaxes que nos permiten comparar os seus resultados.

Para este problema consideramos de novo $\omega = 2$ e as seguintes funcións: $\alpha(\mu, z) = 0,02$, $\sigma(\mu, z) = 0,01$, $f(\mu) = 1$, $g(\mu) = 2$ e $W(\mu, z) = 0$.

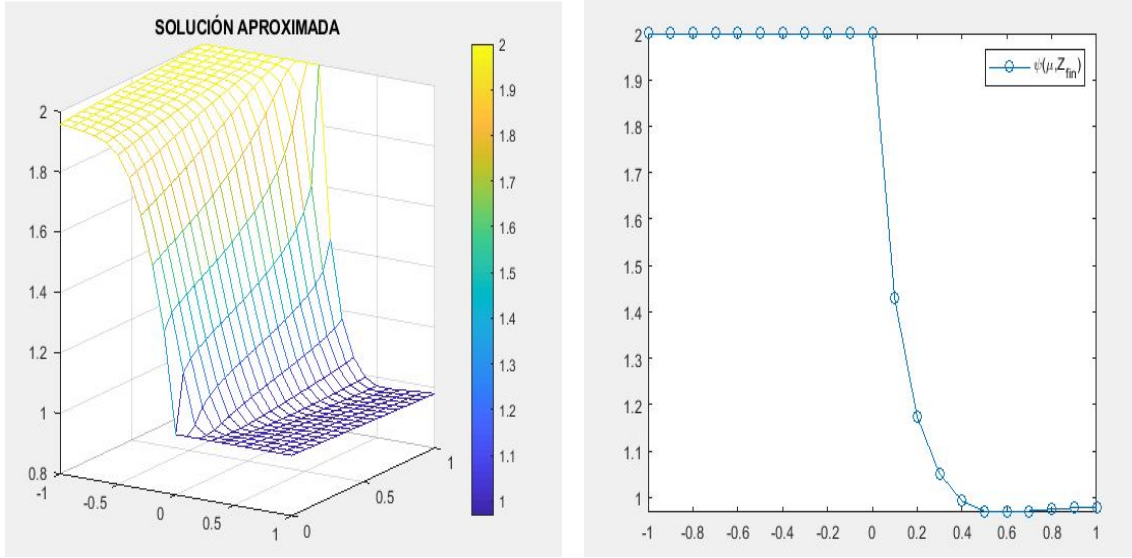


Figura 4.3: Solución aproximada obtenida e solución aproximada en $z = Z_{\text{fin}} = 1$ para o test de Kim-Tranquilli no caso $(I, N) = (21, 20)$.

- **TEST 5.**

Agora vamos comprobar a eficacia do algoritmo cambiando o parámetro de relaxación ω para observar como afecta dito parámetro ao número de iteracións necesarias para acadar a converxencia.

Consideramos de novo a función do TEST 3:

$$\psi(\mu, z) = \ln(2 + \mu^2 + z^3).$$

Consideramos entón tamén as seguintes funcións:

$$\begin{aligned} f(\mu) &= \ln(2 + \mu^2), \\ g(\mu) &= \ln(3 + \mu^2), \\ W(\mu, z) &= \frac{3\mu z^2}{2 + \mu^2 + z^3} + |\text{sen}(12\mu z)| \ln(2 + \mu^2 + z^3) - \\ & - (1 + \text{sen}(12\mu z) \cos(12\mu z)) \left[-\frac{4\mu^2}{2 + \mu^2 + z^3} - 2(1 - \mu^2) \frac{\mu^2 - z^3 - 2}{(2 + \mu^2 + z^3)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

No cadro 4.4 aparece repetidas veces o termo inestable. Este termo o que nos indica é que o esquema numérico “explota” no sentido de que se volve inestable. Na figuras 4.4

	Iteracións con (I, N) = (11, 10)	$E_{\text{abs}}^{(11,10)}(Q)$	Iteracións con (I, N) = (33, 29)	$E_{\text{abs}}^{(33,29)}(Q)$
$\omega = 1$	87	5.05206×10^{-3}	264	5.77510×10^{-4}
$\omega = 1,5$	57	5.05207×10^{-3}	180	5.77600×10^{-4}
$\omega = 2$	42	5.05208×10^{-3}	136	5.77633×10^{-4}
$\omega = 2,5$	113	5.05210×10^{-3}	109	5.77652×10^{-4}
$\omega = 3$	Diverxencia		91	5.77668×10^{-4}
$\omega = 3,5$	Diverxencia		78	5.77681×10^{-4}
$\omega = 4$	Diverxencia		Diverxencia	

Cadro 4.4: Resultados numéricos para o test 5.

e 4.5 representamos un exemplo desta inestabilidade ocasionada ao ir aumentando o parámetro de relaxación ω .

Ademais desta reflexión e deste último test tamén é interesante comprobar o que ocorre cos resultados numéricos cando modificamos a semente. Así pois tras múltiples experimentos numéricos a elección feita neste artigo é a que mellores resultados de converxencia proporciona. Consideraremos logo un novo test no que se mostra unha elección de semente distinta.

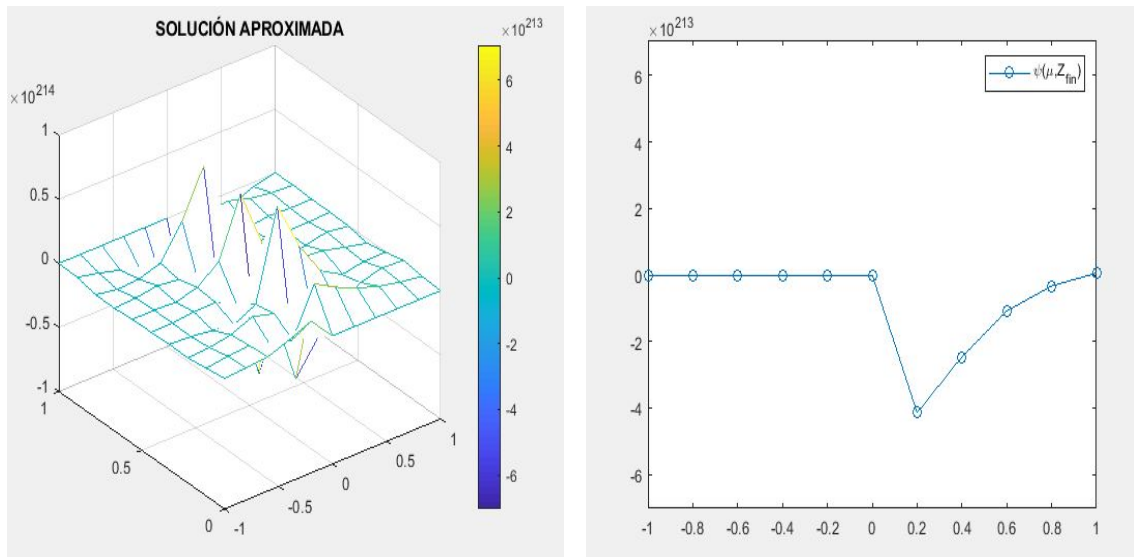


Figura 4.4: Solución aproximada obtida e solución aproximada en $z = Z_{\text{fin}} = 1$ para o test 5 no caso $(I, N) = (11, 10)$ e $\omega = 3$.

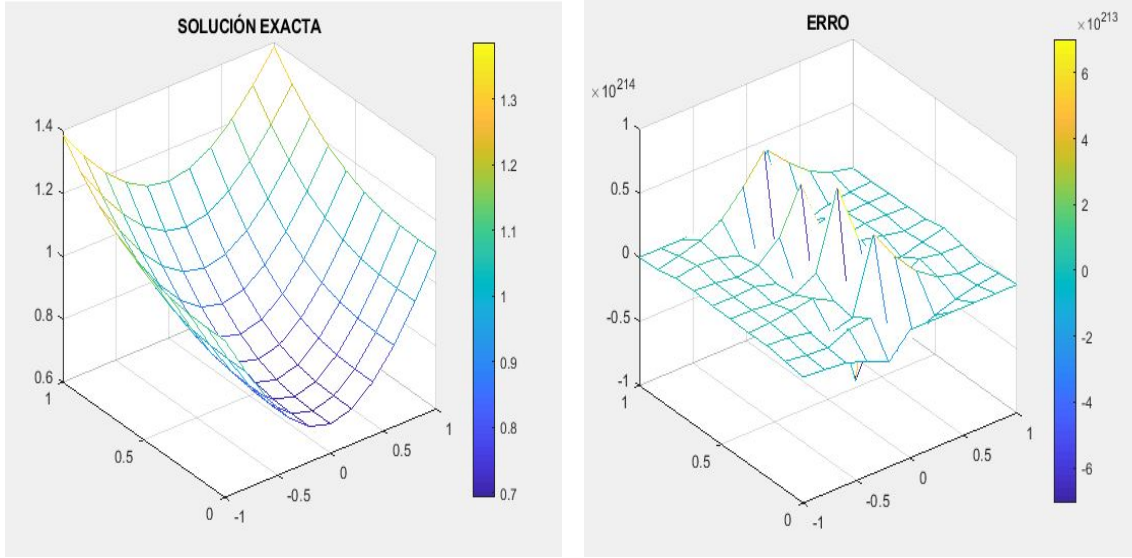


Figura 4.5: Solución exacta e erro cometido aproximando para o test 5 no caso $(I, N) = (11, 10)$ e $\omega = 3$.

- **TEST 6.**

Neste último test vamos mostrar o que ocorre cando escollemos unha semente distinta á proporcionada pola ecuación (3.8).

Consideremos entón a seguinte semente:

$$(\psi_{i^*}^n)^{[0]} = \frac{\arctan(\pi)}{1 + \pi^2} \text{ para } n \in \{2, \dots, N - 1\}, \quad (4.2)$$

onde $i^* = \frac{I+1}{2}$ e de novo tomamos a función ψ do TEST 3:

$$\psi(\mu, z) = \ln(2 + \mu^2 + z^3).$$

De novo considéranse as funcións f , g e W dadas polas ecuacións (4.1).

(I, N)	$E_{\text{abs}}(Q)$	(μ, z)	Iteracións
(11, 10)	7.05208×10^{-3}	(-1,0)	42
(33, 29)	5.77633×10^{-4}	(-0.0625, 0.1787514)	155
(101, 91)	5.83623×10^{-5}	(-0.04, 0.1666...)	520
(321, 281)	4.73001×10^{-6}	(-0.09375, 0.1214286)	1697

Cadro 4.5: Resultados numéricos para o test 6 considerando $\omega = 2$ e a nova semente.

Como podemos ver no cadro 4.5 ao cambiar a semente e escoller a dada pola ecuación (4.2) observamos como o número de iteracións necesarias para acadar a converxencia aumentou. Con istos resultados mostramos así que a semente dada pola ecuación (3.8) proporciona mellores resultados.

Sexan finalmente as seguintes sementes:

$$(\psi_{i^*}^n)^{[0]} = \frac{\pi}{1 + \arctan(e^\pi)} \text{ para } n \in \{2, \dots, N - 1\}, \quad (4.3)$$

$$(\psi_{i^*}^n)^{[0]} = 10^6 \text{ para } n \in \{2, \dots, N - 1\} \quad (4.4)$$

e

$$(\psi_{i^*}^n)^{[0]} = -5 \times 10^6 \text{ para } n \in \{2, \dots, N - 1\}. \quad (4.5)$$

Como podemos observar no cadro 4.6 o algoritmo segue levándonos á solución a pesares de considerar unha semente moi lonxe da óptima como poden ser as dadas pola ecuación (4.4) ou pola (4.5). Así pois observamos o comportamento de aumento de iteracións para acadar a solución a medida que consideramos sementes máis dispares.

Acabamos de ver así que non é necesario tomar unha semente próxima aos valores da solución exacta no segmento Q_0 para que o algoritmo converxa, feito que é compatible coa converxencia global.

(I, N)	Iteracións (3.8)	Iteracións (4.3)	Iteracións (4.4)	Iteracións (4.5)
(11, 10)	42	51	88	92
(33, 29)	136	184	316	331
(101, 91)	405	600	1030	1081
(321, 281)	1191	1945	3339	3503

Cadro 4.6: Resultados numéricos para o test 6 considerando $\omega = 2$ e as distintas sementes. Ademais para este test consideramos $itmax = 4000$.

Anexos

Anexo I: Fórmulas de derivación numérica

Neste anexo a letra grega μ deixa de facer referencia á variable angular do noso problema e pasa a referirse ao grao de derivación.

É conveniente aclarar cales son e como xorden as fórmulas de derivación numérica que utilizamos para obter o esquema numérico para resolver a ecuación de Fokker-Planck. Todas as fórmulas empregadas para a obtención de dito esquema son fórmulas de tipo interpolatorio polonómico.

Procedamos a definir así as fórmulas de tipo interpolatorio polinómico, i. p.:

Se se coñecen $f(x_1), \dots, f(x_N)$, tense entón a seguinte fórmula de aproximación numérica:

$$f^{(\mu)}(\alpha) \approx \sum_{i=1}^N A_i f(x_i),$$

para $N \geq \mu + 1$ e onde A_1, \dots, A_N son a solución (única) do sistema linear:

$$\sum_{i=1}^N A_i x_i^k = \frac{d^\mu}{dx^\mu} [x^k](\alpha), \quad k = 0, \dots, N - 1.$$

A_i denota os pesos ou coeficientes e $f(x_i)$ son os nodos.

O proceso anterior equivale a efectuar a seguinte aproximación:

$$f^{(\mu)}(\alpha) \approx p^{(\mu)}(\alpha),$$

onde p é o polinomio de interpolación de Lagrange de f asociado aos nodos x_1, \dots, x_N .

Para os monomios $x^0, x^1, x^2, x^3, \dots, x^{N-2}, x^{N-1}$ temos a igualdade na fórmula.

Pode probarse que unha fórmula de derivación numérica de N puntos é de tipo interpolatorio polinómico se, e só se, é exacta en \mathbb{P}_{N-1} (espazo de polinomios de grao menor igual que $N - 1$).

Ademais se a fórmula é exacta en \mathbb{P}_N dise que a fórmula é superexacta.

Exemplo .1. Obter a fórmula de derivación numérica de tipo interpolatorio polinómico asociada a:

$$f''(\alpha) \approx A_1 f(\alpha) + A_2 f(\alpha + h) + A_3 f(\alpha + 2h) + A_4 f(\alpha + 3h)$$

Como podemos observar neste exemplo, se respectamos a notación anterior temos que $\mu = 2$ e $N = 4$, entón plantexamos o sistema linear asociado:

$$\left. \begin{aligned} A_1 + A_2 + A_3 + A_4 &= \frac{d^2}{dx^2} [x^0] (\alpha) = 0 \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 + A_4 x_4 &= \frac{d^2}{dx^2} [x^1] (\alpha) = 0 \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + A_3 x_3^2 + A_4 x_4^2 &= \frac{d^2}{dx^2} [x^2] (\alpha) = 2 \\ A_1 x_1^3 + A_2 x_2^3 + A_3 x_3^3 + A_4 x_4^3 &= \frac{d^2}{dx^2} [x^3] (\alpha) = 6\alpha \end{aligned} \right\}$$

Equivalentemente podemos escribir:

$$\left. \begin{aligned} A_1 + A_2 + A_3 + A_4 &= 0 \\ A_1 \alpha + A_2 (\alpha + h) + A_3 (\alpha + 2h) + A_4 (\alpha + 3h) &= 0 \\ A_1 \alpha^2 + A_2 (\alpha + h)^2 + A_3 (\alpha + 2h)^2 + A_4 (\alpha + 3h)^2 &= 2 \\ A_1 \alpha^3 + A_2 (\alpha + h)^3 + A_3 (\alpha + 2h)^3 + A_4 (\alpha + 3h)^3 &= 6\alpha \end{aligned} \right\}$$

Ademais a efectos de contas podemos supoñer $\alpha = 0$, entón o sistema finalmente reescíbese do seguinte xeito:

$$\left. \begin{aligned} A_1 + A_2 + A_3 + A_4 &= 0 \\ A_2 h + 2A_3 h + 3A_4 h &= 0 \\ A_2 h^2 + 4A_3 h^2 + 9A_4 h^2 &= 2 \\ A_2 h^3 + 8A_3 h^3 + 27A_4 h^3 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Resolvendo dito sistema obtemos a seguinte solución:

$$A_1 = \frac{2}{h^2}; \quad A_2 = -\frac{5}{h^2}; \quad A_3 = \frac{4}{h^2}; \quad A_4 = -\frac{1}{h^2}$$

Polo tanto a fórmula buscada é:

$$f''(\alpha) \approx \frac{2f(\alpha) - 5f(\alpha + h) + 4f(\alpha + 2h) - f(\alpha + 3h)}{h^2}.$$

Observación .2. Para fórmulas centradas, ou sexa para aquelas nas que se verifica $\alpha - x_i = x_{N+1-i} - \alpha \forall i \in \{1, \dots, N\}$, verificase que $A_i = (-1)^\mu A_{N+1-i}$ para $i = 1, \dots, N$.

Isto esixe necesariamente que o coeficiente central $A_{\frac{N+1}{2}}$ sexa nulo cando ambos valores, μ e N , son impares. Ademais cando μ é par eliminamos por redundancia as ecuacións que proveñen de impoñer a exactitude en x^k con k impar, porén cando μ é impar suprimimos as ecuacións procedentes de x^k con k par.

A continuación móstrase unha lista de fórmulas de derivación numérica de uso común, algunhas delas son as empregadas na obtención do noso esquema numérico:

$$(1) f'(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h)}{\approx} \frac{f(\alpha+h)-f(\alpha)}{h}.$$

$$(2) f'(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h)}{\approx} \frac{f(\alpha)-f(\alpha-h)}{h}.$$

(3) Fórmula estándar de segunda orde para a primeira derivada de dous puntos:

$$f'(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{f(\alpha+h)-f(\alpha-h)}{2h}.$$

Dita fórmula ademais é centrada e superexacta.

$$(4) f'(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{-3f(\alpha)+4f(\alpha+h)-f(\alpha+2h)}{2h}.$$

$$(5) f'(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{f(\alpha-2h)-4f(\alpha-h)+3f(\alpha)}{2h}.$$

(6) Fórmula estándar de segunda orde para a segunda derivada de tres puntos:

$$f''(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{f(\alpha-h)-2f(\alpha)+f(\alpha+h)}{h^2}.$$

De novo esta fórmula é centrada e superexacta. Vexamos como se obtén a partir de empregar a fórmula (3) con paso $\frac{h}{2}$:

$$f''(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{f'(\alpha + \frac{h}{2}) - f'(\alpha - \frac{h}{2})}{h} \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{\frac{f(\alpha+h)-f(\alpha)}{h} - \frac{f(\alpha)-f(\alpha-h)}{h}}{h}.$$

$$(7) f''(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{2f(\alpha)-5f(\alpha+h)+4f(\alpha+2h)-f(\alpha+3h)}{h^2}.$$

$$(8) f''(\alpha) \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{-f(\alpha-h)+4f(\alpha-2h)-5f(\alpha-h)+2f(\alpha)}{h^2}.$$

Ademais das fórmulas anteriores, convén sinalar a fórmula que nos permite discretizar o termo $\frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} \right]$ para os nodos interiores, ou sexa para $i \in \{2, \dots, I-1\}$.

(6 bis) Vexamos unha aproximación de orde 2 baseándonos na fórmula (3) anterior:

$$\begin{aligned} (c(x)f'(x))' &\stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{c(\alpha + \frac{h}{2})f'(\alpha + \frac{h}{2}) - c(\alpha - \frac{h}{2})f'(\alpha - \frac{h}{2})}{h} \stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \\ &\stackrel{\mathcal{O}(h^2)}{\approx} \frac{c(\alpha + \frac{h}{2})\frac{f(\alpha+h)-f(\alpha)}{h} - c(\alpha - \frac{h}{2})\frac{f(\alpha)-f(\alpha-h)}{h}}{h} = \\ &= \frac{c(\alpha - \frac{h}{2})f(\alpha - h) - [c(\alpha - \frac{h}{2}) + c(\alpha + \frac{h}{2})]f(\alpha) + c(\alpha + \frac{h}{2})f(\alpha + h)}{h^2}. \end{aligned}$$

Porén as fórmulas que se empregan para discretizar o termo $\left[(1 - \mu^2) \frac{\partial \psi}{\partial \mu}\right]$ cando nos atopamos nos casos $i = 1$ e $i = I$ son, respectivamente, a fórmula (3) e a (4). Ditas fórmulas aproximan a derivada de primeira orde empregando nodos cara adiante e cara atrás, e finalmente empregamos a fórmula (3) para discretizar a derivada de primeira orde que nos aparece.

Se nos fixamos na derivación do esquema para estes dous últimos nodos non empregamos as fórmulas completas, pois tanto \bar{D}_1 coma \bar{D}_I son nulos e polo tanto o termo que acompaña a $f(\alpha)$ tamén o é.

Anexo II: Códigos Matlab

No anexo presente tratamos de amosar liñas de código Matlab que nos permitiron obter resultados numéricos para o noso problema empregando o algoritmo iterativo que deseñamos con anterioridade.

Creamos un programa principal, o cal chama a distintas funcións que permiten resolver as distintas etapas do método. A continuación móstranse distintas imaxes que reflexan dita estrutura:

```
% Método implícito iterativo para a ecuación de Fokker-Planck 1D
%|
% profile on
% profile clear
tic
clc
clear
close all
% ofi STANDS FOR "output file"
ofi = fopen('output.txt','wt');
%
data
%
fprintf(ofi,'\n\n**** COMPUTACIÓN ****');
[mu,z,U] = IMPLICITfokker(Z_ini,Z_fin,I,N,itmax,epsilon,omega,ofi);
%
displayer
%
fclose(ofi);
%
plotter
%
showmovie
%
toc
```

Figura 6: Neste programa principal chamamos á función que realiza os cálculos e as distintas funcións que empregamos para a representación dos resultados obtidos.

```

function [mu,z,U] = IMPLICITfokker(Z_ini,Z_fin,I,N,itmax,epsilon,omega,ofi)
% h é a distancia entre os nodos na variable mu (h = Delta mu):
h = 2/(I-1);
fprintf(ofi,'\n* Distancia entre os nodos na variable mu: h = 2/(I-1) = %-.15E.',
% k é a distancia entre os nodos na variable z (k = Delta z):
k = (Z_fin - Z_ini)/(N-1);
fprintf(ofi,'\n\n* Distancia entre os nodos na variable z: k=(Z_fin - Z_ini)/(N-1)
% mu é o vector de nodos na variable mu:
mu = linspace(-1,1,I);
% z é o vector de nodos na variable z:
z = linspace(Z_ini,Z_fin,N);
% U é a matriz que almacena a solución e ten orde I x N
U = zeros(I,N);
iestrela =(I+1)/2;
u0 = f(0)+(g(0)-f(0)).*(1:N)./(N-1);
U(iestrela:I,1) = f(mu(iestrela:I)); %condición para o PVI
U(1:iestrela,N) = g(mu(1:iestrela)); %condición para o PVF
w = u0(2:N-1); %semente
q = 0; %contador de iteracións
res = 1 + epsilon; %residuo
while ( q < itmax ) && ( res > epsilon )
    U(iestrela,2:N-1) = w;
    U = Qplus(iestrela,I,N,h,k,mu,z,U); %resolve en Q+
    U = Qminus(iestrela,I,N,h,k,mu,z,U); %resolve en Q-
    w = actualizar(iestrela,N,h,z,U,omega); %actualización dos valores en mu = 0
    res = norm( w - U(iestrela,2:N-1))/(1 + norm(w)); %cálculo do residuo
    q = q + 1; %nova iteración
end

```

Figura 7: Parte principal da function que realiza o método iterativo.

Como podemos ver na figura 7 o bucle do método iterativo chama a distintas funcións. Cada unha destas funcións serve para realizar as etapas do método iterativo descritas no Capítulo 3.

A function `Qplus` resolve o problema no conxunto Q_+ , dito doutro xeito resolve o problema de valor inicial dado pola función f .

Por outra banda, a function `Qminus` resolve o problema en Q_- , onde temos un problema de valor final dado pola función g .

Finalmente, chamamos á function `actualizar` que serve para actualizar os valores da solución empregando o método de relaxación descrito.

Na figura 8 observamos o bucle en n que resolve un sistema por ascenso para obter as aproximacións da solución en Q_+ . No bucle definimos unha matriz, na cal a meirande parte das entradas son nulas, e un vector segundo membro, a partires da discretización da ecuación. Finalmente, para obter as aproximacións resolvemos a ecuación matricial dada pola matriz e o vector anteriormente mencionados.

```

for n = 1:N-1
    zn = z(n);
    znpl = z(n+1); %zn plus one
    vd(1:L-1) = muk + alpha(vmu,znpl)/2 + sigma(vmu,znpl).*D3/(2*h^2);
    vd(L) = 1/k + alpha(1,znpl)./2 + sigma(1,znpl)*D(mu(I-1))/(2*h^2);
    %diagonal
    d = sparse(1:L,1:L,vd,L,L);
    vud = -sigma(vmu,znpl).*D2./(2*h^2);
    %diagonal superior
    ud = sparse(1:L-1,2:L,vud,L,L);
    vld(1:L-2) = -sigma(vmu(2:end),znpl).*D4./(2*h^2);
    vld(L-1) = -sigma(1,znpl)*D(mu(I-2))/(8*h^2);
    % diagonal inferior
    ld = sparse(2:L,1:L-1,vld,L,L);
    termol = sparse(L,L-2,-sigma(1,znpl)*D(mu(I-1))/(2*h^2),L,L);
    termo2 = sparse(L,L-3,sigma(1,znpl)*D(mu(I-2))/(8*h^2),L,L);
    % matriz do sistema linear
    A = d + ld + ud + termol + termo2;
    sm(1:L-1) = sigma(vmu,zn).*D1.*U(iestrela:I-2,n).'./(2*h^2) + ...
        (muk - alpha(vmu,zn)/2 - ...
        sigma(vmu,zn).*D3./(2*h^2)).*U(iestrela+1:I-1,n).'+ ...
        sigma(vmu,zn).*D2.*U(iestrela+2:I,n).'./(2*h^2) + ...
        (W(vmu,zn) + W(vmu,znpl))./2;
    sm(1) = sm(1) + sigma(vmu(1),znpl)*D1(1)*U(iestrela,n+1)/(2*h^2);
    sm(L) = -sigma(1,zn)*D(mu(I-2))*U(I-3,n)/(8*h^2) + ...
        sigma(1,zn)*D(mu(I-1))*U(I-2,n)/(2*h^2) + ...
        sigma(1,zn)*D(mu(I-2))*U(I-1,n)/(8*h^2) + ...
        (1/k - alpha(1,zn)/2 - sigma(1,zn)*D(mu(I-1))/(2*h^2))*U(I,n) + ...
        (W(1,zn) + W(1,znpl))/2;
    v = A\sm.';
    U(iestrela+1:I,n+1) = v.';
end

```

Figura 8: Estrato da function Qplus no cal se amosa a construción do sistema linear a resolver.

Analogamente, na function Qminus definimos unha matriz e un vector segundo membro para resolver o sistema e obter a aproximación da solución en Q_- , pero neste caso o sistema que se resolve é por descenso.

Na figura 9 observamos esta pequena diferenca, onde o sistema é resolto por descenso.

```

D2 = D(vmu + h/2);
D3 = D1 + D2;
D4 = D2(1:end-1);
%Dimensión do sistema linear
L = (I-1)/2;
vd = zeros(1,L);
sm = vd;
vud = zeros(1,L-1);
% vud = vld son iguais non precisamos definilo
%coñecemos o valor en n+1 e calculámolo en n
for n = N-1:-1:1
    znpl = z(n+1); %zn plus one
    zn = z(n);
    vd(1) = 1/k + alpha(-1,zn)/2 + sigma(-1,zn)*D(mu(2))/(2*h^2);
    vd(2:L) = - muk + alpha(vmu,zn) ./2 + sigma(vmu,zn) .*D3./(2*h^2);
    %diagonal
    d = sparse(1:L,1:L,vd,L,L);
    vud(1) = - sigma(-1,zn)*D(mu(3))/(8*h^2);
    vud(2:L-1) = -sigma(vmu(1:end-1),zn) .*D4./(2*h^2);

```

Figura 9: Estrato da function Qminus no cal se amosa o bucle que resolve o PVF definido pola función g .

Despois destes cálculos chamamos á function da figura 10 que actualiza os valores da solución para $i^* = \frac{I+1}{2}$.

```

function vec =actualizar(iestrela,N,h,z,U,omega)
zz = z(2:N-1);
vec = (sigma(0,zz).*U(iestrela-1,2:N-1) ./h^2 + ...
    sigma(0,zz).*U(iestrela+1,2:N-1) ./h^2 + ...
    W(0,zz))./(alpha(0,zz) + 2.*sigma(0,zz) ./h^2);
vec = omega.*vec + (1 - omega).*U(iestrela,2:N-1);
end

```

Figura 10: Esta función corresponde coa actualización empregando o parámetro de relaxación ω .

Tras todo este proceso obtemos unha gran matriz U que almacena a solución aproximada para o mallado creado. Aproveitaremos dita matriz para obter erros cometidos na aproximación, para así finalmente representar ditos erros e a solución obtida.

Ademais das functions de cálculo comezamos con functions para introducir os datos do problema como poden ser os termo $D(\mu)$ ou as funcións α , σ e W .

```

% Función que define W
function vW = W(mu, z)
%vW = (3.*mu.*(z.^2))./(2 + mu.^2 + z.^3) + ...
%   abs(sin(12.*mu.*z)).*log(2 + mu.^2 + z.^3) - ...
%   (1 + sin(12.*mu.*z).*cos(12.*mu.*z)).* ...
%   ((4.*mu.^2)./(2 + mu.^2 + z.^3) + (1 - mu.^2)).* ...
%   (4.*mu.^2 - 2.*(2 + mu.^2 + z.^3))./(2 + mu.^2 + z.^3).^2);
%vW = 2.*mu.^3.*z + alpha(mu, z).*mu.^2.*z.^2 - ...
%   sigma(mu, z).*z.^2.*(2-6.*mu.^2); %test1
vW = mu.*(3.*z.^2)./(2 + mu.^2 + z.^3) + ...
alpha(mu, z).*exact(mu, z) - ...
sigma(mu, z).*((-4.*mu.^2)./(2 + mu.^2 + z.^3) - ...
2.*(1 - mu.^2).*(mu.^2 - z.^3 - 2))./(2 + mu.^2 + z.^3).^2); %test3
%vW = 3.*mu.^2.*z.^2 + mu.*z.^3.*(alpha(mu, z) + 2.*sigma(mu, z)); %test2
end

```

Figura 11: Exemplos de fontes/sumidoiros que empregamos nos nosos test.

```

% Función que define a difusividade externa
function vsigma = sigma(mu, z)
vsigma = 1 + sin(12.*mu.*z).*cos(12.*mu.*z);
end

```

Figura 12: Amosamos un exemplo do termo de difusividade externa empregada nos nosos experimentos numéricos.

Bibliografía

- [1] A. D. KIM e P. TRANQUILLI. *Numerical solution of the Fokker-Planck equation with variable coefficients*, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* **109**, no. 5 (2008) 727-740.
- [2] Ó. LÓPEZ POUSO e N. JUMANIYAZOV. *Numerical experiments with the Fokker-Planck equation in 1D slab geometry*, *Journal of Computational and Theoretical Transport* **45**, no. 3 (2016) 184-201.
- [3] Ó. LÓPEZ POUSO e N. JUMANIYAZOV. *Direct versus iterative methods for forward-backward equations. Numerical comparisons on a particular transport kinetic model*, en proceso de publicación.
- [4] D. STEIN e I. B. BERNSTEIN. *Boundary value problem involving a simple Fokker-Planck equation*, *Physics of Fluids* **19** (1976) 811-814.
- [5] V. VANAJA e R. B. KELLOGG. *Iterative methods for a forward-backward heat equation*, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **27**, no. 3 (1990) 622-635.