



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO

MODELO COMPUTACIONAL PARA LA RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE LA ECUACIÓN DE
ADVECCIÓN-DIFUSIÓN SOBRE UNA ESFERA

TESIS DE GRADO
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS DE LA TIERRA

PRESENTA:
Msc. ROBERTO CARLOS CRUZ RODRÍGUEZ

Dr. YURI N. SKIBA
INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO, UNAM

Dr. DAVID PARRA GUEVARA
INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO, UNAM

Dr. TOMÁS MORALES ACOLTZI
INSTITUTO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA Y CAMBIO CLIMÁTICO, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO, DICIEMBRE DEL 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Al Dr. Yuri N. Skiba, por su tiempo, dedicación y excelente tutoría.

A los miembros de mi comité tutor Dr. David Parra Guevara y Dr. Tomás Morales Acoltzi, por su apoyo en estos cuatro años.

A la Coordinación General del Programa de Maestría en Ciencias de la Tierra de la UNAM, por la oportunidad de realizar mi estudios de posgrado, así como su apoyo y asesoría.

Al Consejo Nacional de Ciencias y Tecnología (CONACyT) por la beca otorgada, lo que hizo posible la realización de mis estudios (CVU/Becario 857693/631324)

Contenido

Resumen	ix
Abstract	xi
Introducción	xiii
1 El problema de advección-difusión	1
1.1 La ecuación de advección-difusión	1
1.1.1 Término advectivo: $\mathbf{U} \cdot \nabla \phi$	1
1.1.2 Término difusivo: $\text{div}(\mu \nabla \phi)$	4
1.1.3 Fuentes y decaimiento exponencial: $f(\mathbf{x}, t)$ y $\sigma(\mathbf{x}, t)\phi$	5
1.2 La ecuación de advección-difusión sobre la esfera	6
1.2.1 Planteamiento del problema	6
1.2.2 Existencia, unicidad y estabilidad de la solución	7
1.3 Métodos numéricos	12
1.3.1 Algunos números adimensionales importantes: CFL, D y Pe	12
1.3.2 Diferencias finitas	13
1.3.3 Métodos espectrales	15
1.3.4 Métodos semilagrangianos	15
1.3.5 Volúmenes finitos	17
1.3.6 Discretización del dominio esférico	18
2 Materiales y métodos	21
2.1 El algoritmo CN-DIM-SPLIT	21
2.1.1 Discretización (volúmenes finitos)	21
2.1.2 El modelo semidiscreto	27
2.1.3 Integración temporal	31
2.2 El algoritmo RK2-TVD-DIM-SPLIT	44
2.2.1 Discretización	44
2.2.2 Integración temporal	47
2.2.3 Estabilización del esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT	51

2.3	El modelo AdvDiff2D	52
3	Resultados	55
3.1	El modelo AdvDiff2D. Paralelización de los cálculos	55
3.2	Experimentos numéricos	57
3.2.1	Advección pura	57
3.2.2	Difusión lineal	67
3.2.3	Difusión no lineal	69
3.2.4	Advección-difusión	75
	Conclusiones	83
	Bibliografía	85
A		93
A.1	Viento no divergente a partir de observaciones reales	93
A.2	RK2-TVD-DIM-SPLIT con distintas funciones limitadoras	93

Lista de figuras

1.1	Esquema semilagrangiano	16
1.2	Algunos ejemplos de rejilla latitud/longitud	19
2.1	Discretización del dominio	22
2.2	Estructura de la matriz R_1	36
2.3	Estructura de la matriz R_2	39
2.4	Interpolación entre las rejillas $R(\Delta\lambda)$ y $R(k\Delta\lambda)$	53
3.1	Tiempo de ejecución contra número de procesos	57
3.2	Campo de viento (exp_adv01)	59
3.3	Condición inicial (exp_adv01)	59
3.4	Soluciones correspondientes al esquema CN-DIM-SPLIT (exp_adv01)	60
3.5	Soluciones correspondientes al esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT (exp_adv01)	61
3.6	Campo de viento (exp_adv02)	62
3.7	Soluciones correspondientes al esquema CN-DIM-SPLIT (exp_adv02)	62
3.8	Soluciones correspondientes al esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT (exp_adv02)	63
3.9	Condiciones iniciales (exp_adv02)	64
3.10	Soluciones para $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ (exp_adv02)	65
3.11	Soluciones para $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi^{\text{cos}}(\mathbf{x})$ (exp_adv02)	66
3.12	Difusión sobre el polo norte (exp_diff01)	67
3.13	Difusión desde el polo norte (exp_diff02)	68
3.14	Difusión desde el polo norte. Cortes meridional y longitudinal (exp_diff02)	68
3.15	Régimen de combustión HS (exp_diff03)	70
3.16	Régimen de combustión LS (exp_diff03)	71
3.17	Régimen de combustión S (exp_diff03)	71
3.18	Solución numérica (exp_diff04)	72
3.19	Solución numérica. Corte longitudinal (exp_diff04)	72
3.20	Gray-Scott, condición inicial (exp_diff05)	74
3.21	Gray-Scott, $\omega = 0.026$; $\kappa = 0.061$ (exp_diff05)	74
3.22	Gray-Scott, $\omega = 0.030$; $\kappa = 0.055$ (exp_diff05)	74
3.23	Gray-Scott, $\omega = 0.030$; $\kappa = 0.029$ (exp_diff05)	75

3.24	Gray-Scott, $\omega = 0.029$; $\kappa = 0.057$ (exp_diff05)	75
3.25	Viento divergente y no divergente (exp_advdiff01)	76
3.26	Advección-difusión, $t = 1$ día y $t = 2$ días (exp_advdiff01)	78
3.27	Advección-difusión, $t = 10$ días y $t = 15$ días (exp_advdiff01)	79
3.28	Advección-difusión, $t = 20$ día y $t = 30$ días (exp_advdiff01)	80
3.29	Advección pura, $t = 20$ (exp_advdiff01)	81
A.1	Condición inicial $\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x})$	94
A.2	Resultados para $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$	94
A.3	Resultados para $\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x})$	95
A.4	Resultados para $\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x})$	95

Lista de tablas

- 2.1 Funciones limitadoras 45
- 3.1 Errores relativos (exp_avd01) 59
- 3.2 Valor máximo CFL (exp_avd02) 61
- 3.3 Errores relativos (exp_adv02) 61

Resumen

En este trabajo se presenta un modelo bidimensional (AdvDiff2D) para la resolución numérica de la ecuación de advección-difusión sobre la superficie de una esfera. AdvDiff2D cuenta con dos esquemas numéricos de volúmenes finitos sobre una rejilla regular esférica. El esquema principal (CN-DIM-SPLIT), basado en el algoritmo [1, 2], es implícito (y directo), incondicionalmente estable y preserva de manera correcta la masa y la norma L_2 de la solución. El segundo esquema (RK2-TVD-DIM-SPLIT) es directo, condicionalmente estable y monótono, por lo que es más apropiado para casos de advección pura.

Los algoritmos CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT son descritos con detalle, y se discuten cada una de sus propiedades. Se hace especial énfasis en la estabilidad numérica, la conservación de la masa, el orden de convergencia y la realización de cálculos en paralelo de manera eficiente. Cada una de las propiedades de AdvDiff2D se ponen a prueba mediante una serie de experimentos numéricos con diferentes niveles de complejidad. Estos experimentos incluyen, desde problemas lineales de advección y difusión puras, hasta problemas más complejos (donde aparecen tanto procesos advectivos como difusivos) y problemas de difusión no lineal. Los resultados muestran que AdvDiff2D es capaz de resolver de manera correcta y eficiente cada uno de los experimentos anteriores.

El modelo AdvDiff2D fue implementado usando Fortran 90 y OpenMP, lo que puede facilitar la reutilización de su código fuente en otros proyectos de modelación atmosférica y viceversa. Las aplicaciones de AdvDiff2D, en la forma en que se presenta en este trabajo, se limitan al transporte de contaminantes pasivos en la atmósfera, donde se hacen simplificaciones importantes como considerar el flujo no divergente. Sin embargo, la implementación lograda puede ser usada, sin mayor dificultad, como la parte bidimensional de modelos tridimensionales o bien dentro de un marco de computación distribuida (MPI).

Abstract

In this work, a two-dimensional model (AdvDiff2D) is presented for the numerical resolution of the advection-diffusion equation on the surface of a sphere. AdvDiff2D has two finite volume numerical schemes defined over a spherical regular grid. The main scheme (CN-DIM-SPLIT), is based on the algorithm [1, 2], is implicit (and direct), unconditionally stable, and correctly preserves the mass and the L_2 norm of the solution. The second scheme (RK2-TVD-DIM-SPLIT) is direct, conditionally stable, and monotonous, making it more suitable for pure advection cases.

The CN-DIM-SPLIT and RK2-TVD-DIM-SPLIT algorithms are described in detail, and each of their properties is discussed. Special emphasis is placed on numerical stability, conservation of mass, order of convergence, and performing parallel calculations. Each of the properties of AdvDiff2D is tested by a series of numerical experiments with different levels of complexity. These experiments include, from linear advection-diffusion problems to non-linear diffusion problems. The results show that AdvDiff2D can correctly and efficiently solve each of the previous experiments.

The AdvDiff2D model was implemented using Fortran 90 and OpenMP, which can facilitate the reuse of its source code in other atmospheric modeling projects and vice versa. The applications of AdvDiff2D, as presented in this work, are limited to the transport of passive pollutants in the atmosphere, where important simplifications are made, such as, considering non-divergent flow. However, the implementation achieved can be used, without much difficulty, as the two-dimensional part of three-dimensional models or within a distributed computing framework (MPI)

Introducción

El problema de advección-difusión tiene un gran espectro de aplicaciones. Estas aplicaciones van desde la modelación del transporte de contaminantes en la atmósfera [3, 4], hasta pronósticos de algunas variables de importancia como la humedad y la temperatura en modelos meteorológicos [5, 6].

De manera muy simplificada, cualquier sustancia en un medio líquido (ej.: océanos, ríos, lagos) o gaseoso (atmósfera) experimentará dos procesos principales que determinarán su concentración espacial y temporal. El primero, se conoce como *advección*, que no es más que el transporte de sustancia que ocurre por el efecto de la velocidad del medio. Algunos ejemplos de este proceso son el transporte de vapor de agua en la atmósfera por la acción del viento o el desplazamiento de una mancha de petróleo por la acción de las corrientes marinas. El segundo proceso se conoce como *difusión*, en este caso el transporte ocurre desde las zonas de mayor concentración hacia las de menor concentración. Por ejemplo, gracias a la *difusión* podemos sentir el aroma de un perfume en una habitación cerrada, aún estando alejados del origen del perfume. Por último, también es necesario tener en cuenta las fuentes o sumideros de ciertas sustancias (ej.: industrias que emiten CO₂ y zonas boscosas que lo absorben), así como procesos físicos y químicos que también afectan su concentración. En el Capítulo 1 se hará una descripción más detallada de estos procesos y de su formulación matemática.

Los procesos advectivos y difusivos son parte fundamentales de la dinámica de los fluidos, abarcando áreas tan diversas como la biología (quimiotaxis [7]) o la física de plasmas [8]. En consecuencia, existe una amplia literatura dedicada a métodos numéricos para resolver el problema de advección-difusión. Entre los métodos más usadas se encuentran: los métodos espectrales [9], diferencias finitas [10], volúmenes finitos [1, 11–15] y elementos finitos [16], combinados con el uso de mallas estructuras y no estructuradas (ver [17, 18] para una discusión más profunda).

En el caso particular de las ciencias atmosféricas, la aplicación más notoria del problema de advección-difusión es la modelación del transporte de contaminantes. Estos modelos son muy útiles para un mejor entendimiento de los procesos de contaminación y sobre todo para concebir estrategias en aras de mitigar los daños al medio ambiente y la salud humana. Por lo tanto, no es de extrañar que la búsqueda de métodos numéricos eficientes para este tipo de modelos se remonte a

varias décadas y continúe de forma activa en la actualidad.

En este trabajo se presenta el modelo bidimensional AdvDiff2D para la resolución numérica de la ecuación de advección-difusión sobre la superficie de una esfera, basado en el algoritmo [1]. Como objetivo principal se propone: *desarrollar una herramienta simple pero robusta, que permita resolver el problema de transporte bidimensional en una capa esférica*. Las principales características de AdvDiff2D son:

- Uso de una rejilla esférica regular.
- Dos esquemas numéricos diferentes: CN-DIM-SPLIT (principal) y RK2-TVD-DIM-SPLIT (adecuado para casos predominantemente advectivos).
- Discretización mediante volúmenes finitos lo que permite representar de manera adecuada el balance de sustancia del dominio.
- Incondicionalmente estable (solo el esquema CN-DIM-SPLIT) y con segundo orden de aproximación espacial y temporal.
- Paralelización de los cálculos usando OpenMP [19].

La aplicación inmediata de AdvDiff2D es modelar el transporte de contaminantes pasivos en la atmósfera, asumiendo simplificaciones importantes como considerar el campo de viento no divergente y conocido. Aunque en este trabajo no se profundiza en aplicaciones concretas, queda claro según los resultados obtenidos, que AdvDiff2D puede ser aplicado a un amplio número de problemas que involucren fenómenos de advección-difusión sobre una capa esférica. También es relativamente sencillo adaptar el modelo para resolver problemas no lineales o reusar el código como la parte bidimensional de un modelo tridimensional más complejo o bien dentro de un marco de computación distribuida (MPI [20]).

El trabajo desarrollado en esta tesis doctoral se puede desglosar en los siguientes objetivos específicos:

1. Revisión bibliográfica. Asimilación del algoritmo [1].
2. Implementación de los algoritmos CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT, usando el lenguaje de programación Fortran 90.
3. Adición de funcionalidades al modelo, para facilitar la entrada y salida de datos, así como la configuración de experimentos numéricos.
4. Realizar experimentos numéricos para evaluar y validar el desempeño del algoritmo para distintos casos de interés.

El contenido de este documento está distribuido de la siguiente forma. En el Capítulo 1 se describe formalmente el problema de advección-difusión y se discuten los principales métodos numéricos usados para este tipo de problemas, haciendo énfasis en el dominio esférico. El Capítulo 2 está dedicado a la descripción detallada de los algoritmos CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT, así como a los detalles de la implementación del modelo AdvDiff2D. En el Capítulo 3 se presentan y se discuten los resultados. Finalmente se incluye una sección de anexos que pueden ser útiles como material suplementario de este trabajo.

Capítulo 1

El problema de advección-difusión

En este capítulo se abordarán cuestiones importantes sobre el fenómeno de advección-difusión. Desde el punto de vista teórico, se demostrará que el problema de advección-difusión sobre una esfera es un problema bien planteado (existencia, unicidad y estabilidad de la solución). También se resumirán los principales métodos numéricos usados para este problema, particularizando en los casos de geometría esférica. Lo anterior permitirá comprender mejor y darle un contexto a los siguientes capítulos.

1.1 La ecuación de advección-difusión

La ecuación de advección-difusión describe la evolución temporal y espacial de la concentración de cierta sustancia $\phi(\mathbf{x}, t)$ en un medio líquido o gaseoso. Esta ecuación en derivadas parciales se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}), \quad (1.1)$$

donde \mathbf{x} representa la posición espacial, t el tiempo, ∇ el operador gradiente y $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ la velocidad del medio (líquido o gaseoso) que se considera conocida y no divergente ($\nabla \cdot \mathbf{U} \equiv 0$). A continuación, se explicará el significado de cada uno de los términos de la ecuación (1.1).

1.1.1 Término advectivo: $\mathbf{U} \cdot \nabla \phi$

Supongamos un volumen de control ΔV embebido en un fluido que se mueve con velocidad \mathbf{U} . Sea $\phi(\mathbf{x}, t)$ la concentración de cierta sustancia, entonces el valor promedio de dicha concentración para el volumen de control ΔV será:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{|\Delta V|} \int_{\Delta V} \phi(\mathbf{x}, t) dV .$$

Por otra parte, la variación temporal de la masa total ($|\Delta V| \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t}$), depende de la cantidad que entre o salga a través de la frontera ΔS de ΔV . Es decir, podemos plantear la siguiente ecuación de balance:

$$|\Delta V| \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} = - \oint_{\Delta S} \phi \mathbf{U} dS. \quad (1.2)$$

El término derecho de la ecuación anterior tiene un signo negativo, indicando que la cantidad de masa que sale a través de ΔS (valores positivos de la integral de superficie) acarrea un cambio negativo en la masa total. Finalmente, usando el teorema de la divergencia [21] y el del valor medio [21], y pasando al límite cuando $|\Delta V| \rightarrow 0$ se llega a:

$$\begin{aligned} |\Delta V| \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} &= - \int_{\Delta V} \text{div}(\phi \mathbf{U}) dx \\ \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} &= - \frac{1}{|\Delta V|} \int_V \text{div}(\phi \mathbf{U}) dx \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\text{div}(\phi \mathbf{U}) \quad \text{cuando} \quad |\Delta V| \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Nótese que cuando $|\Delta V| \rightarrow 0$, es válido remplazar $\bar{\phi}$ por ϕ , debido a que el volumen ΔV queda reducido al punto \mathbf{x} .

La ecuación (1.3) se conoce como ecuación de advección en su forma conservativa [22]. El término $\text{div}(\phi \mathbf{U})$ es diferente al término $\mathbf{U} \cdot \nabla \phi$ que aparece en la ecuación (1.1) (forma advectiva), sin embargo, como se asume que el flujo es no divergente ($\nabla \cdot \mathbf{U} \equiv 0$), se tiene que: $\text{div}(\phi \mathbf{U}) = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi$.

El hecho de asumir que $\text{div} \mathbf{U} \equiv 0$ no es necesariamente una limitante, pues en varios problemas de interés práctico es posible considerar que el flujo es no divergente. Algunos ejemplos son: el transporte de sustancias en lagos y océanos (debido a que el agua es un fluido prácticamente incompresible), así como el transporte de contaminantes a grandes escalas en la atmósfera [18]. En los casos donde $\nabla \cdot \mathbf{U} \neq 0$ (flujo divergente), también es posible hacer una equivalencia entre la forma advectiva y conservativa de la ecuación de advección, valiéndose de la ecuación de continuidad y un simple cambio de variable.

Considere un fluido con densidad $\rho(\mathbf{x}, t) > 0$ y definamos $\xi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t)/\rho(\mathbf{x}, t)$. Remplazando $\phi(\mathbf{x}, t)$ por $\xi(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}, t)$ en la ecuación (1.3) y usando la ecuación de continuidad $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{U}) = 0$, se llega a:

$$\frac{\partial(\xi\rho)}{\partial t} = -\operatorname{div}(\xi\rho\mathbf{U}) \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \xi \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\rho \mathbf{U} \cdot \operatorname{div}(\xi) - \xi \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) \\ \frac{\partial \xi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \operatorname{div}(\xi) &= -\frac{\xi}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{U}) \right) = 0 \\ \frac{\partial \xi}{\partial t} &= -\mathbf{U} \cdot \operatorname{div}(\xi). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Las ecuaciones (1.4) (forma conservativa) y (1.5) (forma advectiva) son equivalentes. El término adimensional $\chi(\mathbf{x}, t)$ se conoce como razón de mezcla y es muy usado en química atmosférica [23]. Aunque no es objetivo de este trabajo considerar el caso de un fluido compresible (divergente), está claro que podemos usar la ecuación (1.4) para este fin, con la particularidad de tener que incluir la densidad en la ecuación. Como en este trabajo se asume que $\frac{d\rho}{dt} \equiv 0$ y por lo tanto $\rho(\mathbf{x}, t) = \text{Const.}$, en lo adelante podemos asumir que $\rho(\mathbf{x}, t) = 1$ para simplificar los cálculos.

Para analizar las propiedades de la ecuación advectiva es muy útil analizar el caso unidimensional:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -U \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x), \quad x \in [0, 1], \quad (1.6)$$

con $U = \text{Const.} > 0$ y condiciones de frontera cíclicas $\phi(x, t) = \phi(x \pm 1, t)$. A pesar de la simplicidad de la ecuación (1.6), esta no está muy alejada del problema advectivo longitudinal que aparece como resultado de la geometría esférica (ver 2.1.3).

Es sencillo verificar que la expresión $\phi(x, t) = \phi_0(x - Ut)$ es solución de la ecuación (1.6). Es decir, $\phi(x, t)$ no es más que la condición inicial $\phi_0(x)$ trasladada a una distancia Ut . Lo anterior quiere decir que la *forma* de $\phi_0(x)$ se preserva, y por lo tanto, también se conservan las magnitudes $\int_0^1 \phi_0(x) dx = \int_0^1 \phi(x, t) dx$ (masa) y $\int_0^1 \phi_0(x)^2 dx = \int_0^1 \phi(x, t)^2 dx$ (norma l_2) para $t > 0$. Lo anterior es extensible al caso multidimensional, siempre y cuando se tenga que $\frac{d\rho}{dt} \equiv 0$. También es posible demostrar que se cumplen los principios de positividad y máximo [18]:

$$\phi(x, 0) \geq 0 \quad \text{entonces} \quad \phi(x, t) \geq 0; \quad t > 0 \quad (\text{positividad}) \quad (1.7)$$

$$\min_x \{ \phi(x, 0) \} \leq \phi(x, t) \leq \max_x \{ \phi(x, 0) \} \quad (\text{máximo}). \quad (1.8)$$

La ecuación de advección supone un gran reto desde el punto de vista numérico. Por ejemplo, no es nada trivial construir un esquema numérico que conserve la masa y la norma l_2 , al mismo tiempo que preserve la forma [18, 22].

1.1.2 Término difusivo: $\text{div}(\mu \nabla \phi)$

Para explicar este término, nos remitiremos a la ley de Fick [24], que postula que si en un medio se tiene una sustancia con concentración $\phi(\mathbf{x}, t)$, entonces existirá un flujo de masa desde los puntos de mayor concentración hasta los punto de menor concentración. La velocidad de este flujo viene dada por la fórmula $-\mu \nabla \phi$, donde $\mu(\mathbf{x}, t)$ es el coeficiente de difusión y el signo negativo significa que el flujo se produce en sentido contrario al gradiente. Las unidades de μ son m^2/s , por lo tanto, las expresiones $-\mu \nabla \phi$ y $\phi \mathbf{U}$ son completamente análogas. La primera es el flujo debido a la advección y la segunda debido a la difusión. Dicho lo anterior, podemos proceder de la misma forma que el caso advectivo para llegar a:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \text{div}(\mu \nabla \phi) . \quad (1.9)$$

La ecuación (1.9) corresponde al caso de difusión pura y no es más que la formulación de la segunda ley de Fick [24]. Generalmente se suele hacer una distinción entre *difusión molecular*, donde $\mu(\mathbf{x}, t)$ depende de factores como la temperatura, la viscosidad del fluido y factores a escala molecular; y *difusión turbulenta*, determinada por movimientos rápidos y caóticos del fluido [22]. En la atmósfera (como en el resto de los fluidos), la difusión turbulenta puede ser varios órdenes de magnitud mayor que la difusión molecular. Determinar el valor μ en la atmósfera es bastante complejo, y por lo general, dichos valores se obtienen de manera empírica [25–27].

Para arrojar algo de luz acerca de las propiedades de la ecuación de difusión, nos concentraremos en el caso unidimensional (análogo al problema advectivo (1.6)):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad , \quad \phi(x, 0) = \phi_0(x) \quad , \quad \phi_0(x) = \phi_0(x \pm 1) , \quad (1.10)$$

con $\mu = \text{Const.} > 0$.

Aplicando el método de separación de variables [28] al problema (1.10), se llega a la siguiente solución analítica:

$$\phi(x, t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} C_k e^{-4\mu\pi^2 k^2 t} e^{2\pi i k x} \quad (1.11)$$

$$C_k = \int_0^1 \phi_0(x) e^{2\pi i k x} dx , \quad (1.12)$$

donde $i^2 = -1$ y las funciones $e^{2\pi i k x}$ forman un base ortonormal (armónicos de Fourier [21]) en el espacio $L_2[0, 1]$ (funciones de cuadrado integrable en el intervalo $[0, 1]$).

Le expresión (1.11) indica que todos los armónicos con frecuencia $k \neq 0$ decrecerán su amplitud en valor absoluto de manera exponencial, es decir, $|C_k| \leq |C_k| e^{-4\mu\pi^2 k^2 t}$ para $t \geq 0$. Por lo tanto, a

diferencia del problema advectivo, en el problema de difusión pura, la norma l_2 , en general, no se conserva. Para comprobar lo anterior, consideremos la condición inicial $\phi_0(x) = e^{2\pi ikx}$, para la que se obtiene de manera directa la solución

$$\phi(x, t) = e^{-4\mu\pi^2 k^2 t} e^{2\pi ikx} = e^{-4\mu\pi^2 k^2 t} \phi_0(x) ,$$

y por lo tanto se tiene que:

$$\int_0^1 [\phi_0(x)]^2 dx \leq \int_0^1 [e^{-4\mu\pi^2 k^2 t} \phi_0(x)]^2 dx . \quad (1.13)$$

La relación anterior es una igualdad para $k = 0$ (frecuencia 0) y una desigualdad estricta para $k \neq 0$, por lo tanto, la norma l_2 es decreciente para $t > 0$.

Otra consecuencia directa de la relación (1.13) es que el coeficiente de difusión μ tiene que ser mayor o igual que cero, de lo contrario, la norma l_2 de la solución crecerá exponencialmente, dando lugar a un problema inestable. De la misma forma que en el problema de advección, en este caso también se preserva la masa total y se cumple el principio de positividad.

1.1.3 Fuentes y decaimiento exponencial: $f(\mathbf{x}, t)$ y $\sigma(\mathbf{x}, t)\phi$

La expresión $f(\mathbf{x}, t)$ no es más que la cantidad de masa por unidad de tiempo y volumen (tasa de emisión) que se agrega ($f > 0$) o se elimina ($f < 0$) del dominio. Por medio de $f(\mathbf{x}, t)$ se modelan las distintas fuentes que emiten algún contaminante. Estas fuentes pueden ser puntuales (ej.: fábricas, refinerías, pequeñas industrias, etc.), lineales (ej.: emisión de vehículos a lo largo de una carretera) o espaciales (complejos industriales, grandes incendios forestales, etc.).

El término $\sigma(\mathbf{x}, t)\phi$ está relacionado con la disminución de la concentración $\phi(\mathbf{x}, t)$ debido a varios procesos químicos y físicos. Si analizamos el caso de $\sigma(\mathbf{x})$ constante, entonces la ecuación

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \sigma \phi = 0, \quad \phi(x, 0) = \phi^0(\mathbf{x}) ,$$

admite la siguiente solución:

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \phi^0(\mathbf{x}) \exp(-\sigma t) .$$

La ecuación anterior muestra que $\sigma(\mathbf{x}, t)$ es la tasa de decaimiento exponencial de $\phi(\mathbf{x}, t)$ con respecto al tiempo. Nótese que se asume que $\sigma(\mathbf{x}, t) \geq 0$, de lo contrario, el valor del $\phi(\mathbf{x}, t)$ crecerá exponencialmente.

Algunos ejemplos de procesos que implican un decaimiento exponencial de $\phi(\mathbf{x}, t)$ son: deposición, degradación por efecto de la luz ultravioleta y reacciones químicas.

1.2 La ecuación de advección-difusión sobre la esfera

En esta sección se demostrará que el problema de advección-difusión sobre la superficie de una esfera es un problema bien planteado. Por lo anterior, se entiende que la solución existe, es única y es estable.

1.2.1 Planteamiento del problema

Consideremos la ecuación (1.1) sobre la superficie S de una esfera de radio a :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}), \quad (1.14)$$

donde $\mathbf{x} = (\lambda, \vartheta)$ es un punto sobre S con longitud λ y colatitud ϑ , y el operador gradiente ∇ viene dado por:

$$\text{grad}\{p(\mathbf{x})\} = \nabla \cdot p(\mathbf{x}) = \frac{1}{a \sin \vartheta} \frac{\partial p}{\partial \lambda} \hat{\lambda} + \frac{1}{a} \frac{\partial p}{\partial \vartheta} \hat{\vartheta} \quad (1.15)$$

$$\text{div}\{\mathbf{q}(\mathbf{x})\} = \nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{a \sin \vartheta} \frac{\partial q_\lambda}{\partial \lambda} + \frac{1}{a \sin \vartheta} \frac{\partial (q_\vartheta \sin \vartheta)}{\partial \vartheta}, \quad (1.16)$$

donde $p(\mathbf{x})$ es una función escalar y $\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \{q_\lambda(\mathbf{x}), q_\vartheta(\mathbf{x})\}$ un función vectorial.

La velocidad $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ se considera no divergente ($\nabla \cdot \mathbf{U} \equiv 0$) y viene dada por $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) = \{u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t)\}$, donde $u(\mathbf{x}, t)$ es la componente zonal del viento y $v(\mathbf{x}, t)$ la meridional.

Es fácil demostrar que la solución de (1.14) satisface la ecuación de balance

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_S \phi dS = \int_S f dS - \int_S \sigma \phi dS \quad (1.17)$$

y la ecuación integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_S \phi^2 dS + 2 \int_S (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) dS = 2 \int_S f \phi dS, \quad (1.18)$$

donde $\int_S \phi^2 dS$ es la norma cuadrada en el espacio Hilbert $L_2(S)$, de todas las funciones de cuadrado integrable sobre S . De acuerdo con la ecuación (1.17), la masa total $\int_S \phi dS$ crece cuando ($f > 0$) y decrece cuando ($\sigma > 0; f < 0$). Por otra parte, en ausencia de fuentes ($f = 0$) y disipación ($\sigma = 0$), la masa total se conserva. Si solo consideramos que ($f = 0$), entonces la masa total $\int_S \phi dS$ y la norma $\int_S \phi^2 dS$ decrecen con el tiempo (ver ecuaciones (1.17) y (1.18)). Por último, cuando se tiene que ($f = \sigma = \mu = 0$) se conservan tanto la masa total como la norma, en este caso estamos ante un problema de advección pura.

1.2.2 Existencia, unicidad y estabilidad de la solución

La existencia y unicidad de la solución de un problema matemático siempre es una condición deseable. Evidentemente, que la solución exista y sea única, no aporta información particularmente útil en cuanto a cómo encontrarla (ya sea analíticamente o numéricamente). Sin embargo, la afirmación contraria si es una sentencia de fracaso para cualquier intento de resolver el problema. Por otra parte, la estabilidad de la solución es también de vital importancia, si un problema es inestable analíticamente, probablemente se podrá hacer muy poco desde el punto de vista numérico.

A continuación se demostrará que el problema (1.14) tiene solución única y estable. Para hacerlo, es necesario introducir algunos conceptos que serán útiles más adelante.

Considere el dominio $Q = S \times [0, T]$ ($\mathbf{x} \in S$ y $t \in [0, T]$) y definamos el espacio de Hilbert $L_2(Q)$ de las funciones reales en Q , con producto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_Q f(\mathbf{x}, t)g(\mathbf{x}, t)dSdt \quad (1.19)$$

y norma

$$\|g\| = \langle g, g \rangle^{1/2}. \quad (1.20)$$

Sea M el conjunto de funciones $\phi(\mathbf{x}, t)$ que pertenecen al espacio $C^2(Q)$ de funciones dos veces diferenciables en Q , que satisfacen que $\phi(\mathbf{x}, 0) = 0$ y tienen norma finita:

$$\|\phi\|_H = (\|\phi_t\|^2 + \|\nabla\phi\|^2)^{1/2}. \quad (1.21)$$

Introduzcamos en M el producto interno

$$\langle \phi, \varphi \rangle_H = \langle \phi_t, \varphi_t \rangle + \langle \nabla\phi, \nabla\varphi \rangle \quad (1.22)$$

y denotemos por $H(Q)$ el espacio de Hilbert formado por la clausura de M en la norma (1.21) (norma H en lo adelante).

Lema 1. Para cada función $g(\mathbf{x}, t) \in H(Q)$, la norma $\|g\|_H$ es equivalente a la norma: $(\|g\|^2 + \|g\|_H^2)^{1/2}$.

Demostración. Basta con demostrar que se cumple que

$$(\|g\|^2 + \|g\|_H^2)^{1/2} \leq C\|g\|_H, \quad (1.23)$$

donde $C \in \mathbb{R}^+$. Debido a que $g(\mathbf{x}, 0) = 0$, se puede escribir $g(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \frac{\partial g(\mathbf{x}, \tau)}{\partial t} d\tau$ y por lo tanto:

$$\|g\|^2 = \int_Q \left\{ \int_0^t \frac{\partial g}{\partial t} d\tau \right\}^2 dSdt \leq T^2 \|g_t\|^2 \leq T^2 \|g\|_H^2. \quad (1.24)$$

Usando $\|g\|^2 \leq T^2 \|g\|_H^2$, se llega a que la desigualdad (1.23) se satisface para $C = \sqrt{1 + T^2}$. ■

Por último, definiremos el espacio de funciones V , formado por todas las funciones de la forma

$$g(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \psi(\mathbf{x}, \tau) d\tau, \quad (1.25)$$

donde $\psi(\mathbf{x}, t) \in H(Q)$. El conjunto V es denso en $H(Q)$, debido a que M es denso en $H(Q)$, y la clausura de V en la norma (1.21) contiene al conjunto M .

Debido a que la ecuación general (1.14) es lineal, podemos asumir sin pérdida de generalidad que:

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}) = 0.$$

Definición 1. Una función $\phi(\mathbf{x}, t) \in H(Q)$ se dice que es una *solución generalizada* de (1.14) si satisface la identidad:

$$\langle \phi_t, g_t e^{-\delta t} \rangle + \langle \mu \nabla \phi, \nabla g_t e^{-\delta t} \rangle + \langle \sigma \phi, g_t e^{-\delta t} \rangle + \langle \mathbf{U} \cdot \nabla \phi, g_t e^{-\delta t} \rangle = \langle f, g_t e^{-\delta t} \rangle, \quad (1.26)$$

para cada función $g(\mathbf{x}, t) \in V$ y cierto $\delta > 0$.

Como $\phi(\mathbf{x}, t) \in H(Q)$ y $g(\mathbf{x}, t) \in V$, todos los términos en la identidad (1.26) son significativos. La identidad (1.26) se obtienen multiplicando la ecuación (1.14) por la función $g_t e^{-\delta t}$ y luego integrando por partes en Q . La solución definida de la forma anterior es una generalización de la solución clásica del problema. Si además, asumimos que $\phi(\mathbf{x}, t)$ es lo suficientemente suave (si todas sus derivadas son continuas hasta el segundo orden), entonces estamos ante la solución clásica del problema. Nótese que cuando $g_t e^{-\delta t} = 1$ y $g_t e^{-\delta t} = 2\phi$, la identidad (1.26) se reduce a la ecuaciones (1.17) y (1.18) integradas en el intervalo $[0, T]$.

Teorema 1. Sea $\nabla \cdot \mathbf{U} \equiv 0$, $f(\mathbf{x}, t) \in L_2(Q)$ y

$$\beta = \max_Q \{\mu, |\mu_t|, \sigma, |\mathbf{U}|\} < \infty; \quad \alpha = \min_Q \{\mu, \sigma\} > 0. \quad (1.27)$$

Entonces el problema (1.14) tiene solución generalizada única $\phi(\mathbf{x}, t)$ en $H(Q)$, y además, esta es estable ante variaciones de $f(\mathbf{x}, t)$ y las condiciones iniciales.

Demostración. **1. Existencia de la solución.** Usaremos el método funcional para demostrar la primera parte del teorema: la existencia. Denotemos por $a_i(\phi, g)$, $i = 1, 2, 3, 4$ a los miembros de la parte izquierda de la ecuación (1.26) y como $a_5(f, g)$ a la parte derecha. Para un $g \in V$ dado, cada $a_i(\phi, g)$ ($i = 1, 2, 3, 4$) es un funcional lineal acotado de ϕ en $H(Q)$, es decir:

$$|a_1(\phi, g)| \equiv |\langle \phi_t, g_t e^{-\delta t} \rangle| \leq \|g_t e^{-\delta t}\| \cdot \|\phi_t\| \leq C_1(g) \|\phi\|_H \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned} |a_2(\phi, g)| &\equiv |\langle \mu \nabla \phi, \nabla g_t e^{-\delta t} \rangle| \leq \beta \|\nabla g_t e^{-\delta t}\| \cdot \|\nabla \phi\| = \beta \|\nabla \psi e^{-\delta t}\| \cdot \|\nabla \phi\| \\ &\leq \beta \|\nabla \psi\| \cdot \|\nabla \phi\| \leq \beta \|\nabla \psi\|_H \cdot \|\nabla \phi\|_H \leq C_2(g) \|\phi\|_H \end{aligned} \quad (1.29)$$

$$|a_3(\phi, g)| \equiv |\langle \sigma \phi, g_t e^{-\delta t} \rangle| \leq \beta \|g\|_H \cdot \|\phi\|_H \leq C_3(g) \|\phi\|_H \quad (1.30)$$

$$|a_4(\phi, g)| \equiv |\langle \mathbf{U} \cdot \nabla \phi, g_t e^{-\delta t} \rangle| \leq \beta \|g\|_H \cdot \|\phi\|_H \leq C_4(g) \|\phi\|_H, \quad (1.31)$$

donde $\psi = g_t \in H(Q)$ debido a (1.25). Por lo tanto, según el teorema de Riesz [29], el i -ésimo funcional se puede representar como

$$a_i(\phi, g) = \langle \phi, g_i \rangle_H \quad ; \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad (1.32)$$

donde g_i se determina de manera única en $H(Q)$ ($i = 1, 2, 3, 4$). La correspondencia $g \rightarrow g_i$ define un operador A_i actuando desde V hacia $H(Q)$: $g_i = A_i g$ ($i = 1, 2, 3, 4$).

Además, $f(\mathbf{x}, t) \in L_2(Q)$ y por lo tanto, debido al Lema 1, $f(\mathbf{x}, t) \in H(Q)$. Entonces, para un $f(\mathbf{x}, t) \in L_2(Q)$ fijo, el término $a_5(f, g)$ es también un funcional lineal acotado sobre $H(Q)$:

$$a_5(f, g) \equiv |\langle f, g e^{-\delta t} \rangle| \leq \|f\| \cdot \|g_t\| \leq C_5(f) \|g\|_H.$$

Por lo tanto, según el teorema Riesz [29], se tiene que

$$a_5(f, g) = \langle R, g \rangle_H, \quad (1.33)$$

donde R queda determinado unívocamente en $H(Q)$. Sea el operador $A = \sum_{i=1}^4 A_i$, con dominio en V e imagen en $H(Q)$, entonces la identidad (1.26) puede ser escrita como:

$$\langle \phi, Ag \rangle_H = \langle R, g \rangle_H. \quad (1.34)$$

Para completar la primera parte de la demostración, solo es necesario probar el siguiente Lema.

Lema 2. *Sea $G \subseteq H(Q)$ la imagen del operador A . Entonces el operador inverso A^{-1} definido sobre G existe y es acotado.*

Demostración. Basta con demostrar que

$$\langle g, Ag \rangle_H \geq \frac{1}{2} e^{-\delta t} \langle g, g \rangle_H, \quad (1.35)$$

para cada $g \in V$ y algún $\delta > 0$ suficientemente grande. En efecto, según (1.35), $Ag = 0$ implica que $g = 0$, entonces A^{-1} existe y es acotado:

$$\|A^{-1}\|_H = \sup_{w \in G} \left\{ \frac{\|A^{-1}w\|_H}{\|w\|_H} \right\} = \sup_{\phi \in V} \left\{ \frac{\|g\|_H^2}{\|g\|_H \cdot \|Ag\|_H} \right\} \leq \sup_{\phi \in V} \left\{ \frac{\langle g, g \rangle_H}{\langle g, Ag \rangle_H} \right\} \leq 2e^{\delta T}, \quad (1.36)$$

donde $w = Ag$.

Ahora vamos a demostrar la desigualdad (1.35). Debido a que $g \in V$, $g(\mathbf{x}, 0) = 0$, entonces:

$$a_1(g, g) = \langle g_t, g_t e^{-\delta t} \rangle = \left\| g_t e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 \quad (1.37)$$

$$a_2(g, g) = \langle \mu \nabla g, \nabla g_t e^{-\delta t} \rangle = \frac{1}{2} e^{-\delta T} \int_S \mu(\mathbf{x}, T) |\nabla g(\mathbf{x}, T)|^2 dS \\ + \frac{\delta}{2} \int_Q \mu |\nabla g|^2 e^{-\delta t} dS dt - \frac{1}{2} \int_Q \mu_t |\nabla g|^2 e^{-\delta t} dS dt \geq \frac{1}{2} (\delta \alpha - \beta) \left\| \nabla g \cdot e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 \quad (1.38)$$

$$a_3(g, g) = \langle \sigma \nabla g, \nabla g_t e^{-\delta t} \rangle \geq \frac{\delta \alpha}{2} \left\| \nabla g e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2. \quad (1.39)$$

Para el término $a_4(g, g)$ usaremos la ε -desigualdad:

$$a_4(g, g) = \langle \mathbf{U} \cdot \nabla g, g_t e^{-\delta t} \rangle \leq \varepsilon \left\| g_t e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 + \frac{\beta^2}{4\varepsilon} \left\| \nabla g e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2. \quad (1.40)$$

Escogiendo ε de tal manera que $1 - \varepsilon \geq \frac{1}{2}$, y δ lo suficientemente grande para que se cumpla que $\delta \alpha - \frac{\beta}{2} \left(1 + \frac{\beta}{2\varepsilon}\right) \geq \frac{1}{2}$, se tiene que:

$$\langle g, Ag \rangle_H = \sum_{i=1}^4 a_i(g, g) \geq \sum_{i=1}^3 a_i(g, g) - |a_4(g, g)| \geq (1 - \varepsilon) \left\| g_t e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 \\ + \left\{ \delta \alpha - \frac{\beta}{2} \left(1 + \frac{\beta}{2\varepsilon}\right) \right\} \left\| \nabla g e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 \geq \frac{1}{2} \left(\left\| g_t e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 + \left\| \nabla g e^{-\frac{\delta}{2}t} \right\|^2 \right) \\ \geq \frac{1}{2} e^{-\delta T} (\|g_t\|^2 + \|\nabla g\|^2) = \frac{1}{2} e^{-\delta T} \langle g, g \rangle_H. \quad (1.41)$$

La última igualdad se deduce de la ecuación (1.21). Finalmente, con la desigualdad anterior queda demostrado el Lema 2. ■

Ahora podemos seguir con la demostración del Teorema 1. Por continuidad, el operador A^{-1} está definido en la clausura de G (\bar{G}) en la norma (1.21). Sea L el complemento ortogonal del conjunto G en $H(Q)$. Podemos extender A^{-1} a todo $H(Q)$ definiendo $A^{-1}w = 0$ para $w \in L$. Como resultado se obtiene el operador acotado \tilde{A}^{-1} definido sobre todo el espacio $H(Q)$, tal que $\|\tilde{A}^{-1}\|_H \leq 2e^{\delta T}$. El operador adjunto $(\tilde{A}^{-1})^*$ a \tilde{A}^{-1} está univocamente definido y su norma coincide con la de \tilde{A}^{-1} . Haciendo $Ag = w$ con $w \in G$, y usando la ecuación (1.34) se obtiene:

$$\langle \phi, w \rangle_H = \langle \phi, Ag \rangle_H = \langle R, g \rangle_H = \langle R, A^{-1}w \rangle_H \equiv \langle \phi, \tilde{A}^{-1}w \rangle_H. \quad (1.42)$$

En lugar de buscar la solución ϕ de la ecuación (1.34) cuando $w \in G$, lo que se hará es imponer una condición más restrictiva, suponiendo que se cumple que

$$\langle \phi, w \rangle_H = \langle R, (\tilde{A}^{-1})w \rangle_H = \left\langle (\tilde{A}^{-1})^* R, w \right\rangle_H, \quad (1.43)$$

para cualquier $w \in H(Q)$. Lo anterior se cumple si y solo si $\phi = (\tilde{A}^{-1})^* R$. Usando la expresión anterior para ϕ , se satisfacen la ecuación (1.42) y la identidad original (1.26), con lo que queda demostrada la existencia de la solución generalizada.

2. Unicidad de la solución y estabilidad: Sea $\phi(\mathbf{x}, t) \in H(Q)$ una solución generalizada del problema (1.14), entonces

$$g(\mathbf{x}, t) = \int_0^t \phi(\mathbf{x}, \tau) e^{\delta \tau} d\tau \quad (1.44)$$

pertenece a V . Sustituyendo $g(\mathbf{x}, t)$ en (1.26) se llega a la siguiente relación

$$\frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{x}, T)\|_{L_2(S)}^2 + \alpha \|\nabla \phi\|^2 \leq \|\phi(\mathbf{x}, 0)\|_{L_2(S)}^2 + \langle f, \phi \rangle, \quad (1.45)$$

donde

$$\|\phi(\mathbf{x}, t)\|_{L_2(S)}^2 = \int_S \phi^2 dS.$$

De la desigualdad (1.45) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{x}, T)\|_{L_2(S)}^2 + \alpha \|\nabla \phi\|^2 &\leq \max_{0 \leq \tau \leq T} \|\phi(\mathbf{x}, \tau)\|_{L_2(S)} \left(\sqrt{T} \|f\| + \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{x}, 0)\|_{L_2(S)} \right) \\ &\leq |\phi|_Q \left(\sqrt{T} \|f\| + \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{x}, 0)\|_{L_2(S)} \right), \end{aligned} \quad (1.46)$$

donde

$$|\phi|_Q = \max_{0 \leq \tau \leq T} \|\phi(\mathbf{x}, \tau)\|_{L_2(S)} + \|\nabla \phi\|, \quad (1.47)$$

es la norma energética en un espacio de Banach [30]. Usando el hecho de que cada término a la izquierda de la desigualdad (1.46) no es mayor que el término a su derecha, podemos establecer que

$$|\phi|_Q \leq \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha}} + \sqrt{2} \right)^2 \left(\sqrt{T} \|f\| + \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{x}, 0)\|_{L_2(S)} \right). \quad (1.48)$$

La desigualdad anterior relaciona la norma (1.47) con las normas de $f(\mathbf{x}, t)$ y la condición inicial $\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x})$. Como el problema (1.14) es lineal, la relación (1.48) también implica la unicidad de la solución generalizada y su estabilidad con respecto a las perturbaciones del forzamiento $\delta f(\mathbf{x}, t)$ y de la condición inicial $\delta \phi(\mathbf{x}, 0)$ respectivamente:

$$|\delta \phi|_Q \leq \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha}} + \sqrt{2} \right)^2 \left(\sqrt{T} \|\delta f\| + \frac{1}{2} \|\delta \phi(\mathbf{x}, 0)\|_{L_2(S)} \right). \quad (1.49)$$

Lo anterior completa la demostración del Teorema 1. ■

1.3 Métodos numéricos

La literatura dedicada a los problemas de advección, difusión o al problema combinado de advección-difusión es notablemente extensa. En esta sección nos limitaremos a mencionar aquellos que están más relacionados con este trabajo. Para una revisión más general sobre este tema, se recomiendan las referencias [18, 23, 31].

La ecuación (1.1) está planteada desde el punto de vista *Euleriano*, es decir, el fenómeno se describe desde el punto de vista de un observador fijo en el espacio. Por lo tanto, en el punto de vista *Euleriano* cada variable depende del tiempo t y de la coordenada espacial \mathbf{x} definida en cierto sistema de referencia. Por otra parte, también es posible describir el fenómeno desde el punto de vista de un observador que se mueve junto con la parcela de fluido P_i , a esto se le conoce como descripción *Lagrangiana*. En este caso, las propiedades de cada parcela de fluido solo dependen del tiempo t , al igual que la posición $\mathbf{x}(t)$ de la parcela en si misma, esto es $P_i(t, \mathbf{x}(t))$.

Los dos enfoques anteriores han sido tratados desde el punto de vista numérico. Los métodos numéricos *Lagrangianos* han demostrado dar buenos resultados, aunque suelen ser muy costosos computacionalmente cuando el número de parcelas a considerar es muy grande [23]. La relativa eficiencia de los métodos *Eulerianos* y su fácil implementación computacional [18] han hecho que estos sean los preferidos para el problema de advección-difusión, en particular en la modelación atmosférica [23].

A continuación se comentan algunos de los esquemas numéricos más usados.

1.3.1 Algunos números adimensionales importantes: CFL, D y Pe

Antes de comenzar con los diferentes métodos numéricos para el problema de advección-difusión, introduzcamos tres números adimensionales que juegan un papel muy importante en esta área:

$$CFL = \frac{|U|\Delta t}{\Delta x}, \quad (1.50)$$

$$D = \frac{\mu\Delta t}{(\Delta x)^2}, \quad (1.51)$$

$$Pe = \frac{|U|\Delta x}{\mu}. \quad (1.52)$$

En las fórmulas anteriores, $|U|$ es el valor absoluto de la velocidad, μ el coeficiente de difusión y Δt y Δx son las escalas espaciales (resolución espacial) y temporales (resolución temporal) del problema.

El número CFL (número de Courant-Friedrichs-Levy [22, 32]) tiene una importancia central en los métodos numéricos dedicados al problema de advección pura. Por ejemplo, la mayoría de los métodos explícitos son inestables para $CFL > 1$ (esta relación puede variar en dependencia de cada esquema en particular). Incluso cuando existen métodos incondicionalmente estables, también es deseable mantener valores pequeños de CFL para garantizar buenos resultados [1, 2]. El número D tiene un papel análogo a CFL , pero para el problema de difusión pura [22]. Por lo general, es necesario que $D < 0.5$ (esta relación puede variar ligeramente) para garantizar la estabilidad con esquemas explícitos [18, 22, 31].

Por último, el número Pe (número de Peclet [22, 31]) mide la importancia relativa de los términos advectivo y difusivo en la ecuación de advección-difusión. De la ecuación (1.52) se deduce que valores grandes de Pe corresponden a un predominio de la parte advectiva, mientras que valores pequeños de Pe , corresponden a un predominio de la parte difusiva. En concreto, para $Pe > 10$ se considera que el problema es predominantemente advectivo y para $Pe < 0.1$ predominantemente difusivo [22]. Un buen método numérico para el problema de advección-difusión debería dar buenos resultados para un gran rango de valores de Pe , algo muy difícil de lograr en la práctica [31].

1.3.2 Diferencias finitas

Desde el punto de vista histórico, las diferencias finitas fueron los primeros esquemas desarrollados para el problema de advección-difusión. Lo anterior se debe a su simplicidad y fácil implementación. Cualquier esquema de diferencias finitas se basa en discretizar el problema continuo en una serie finita de puntos sobre el dominio de definición de la solución.

Para concretar, consideremos el caso unidimensional del problema de advección-difusión con fronteras cíclicas, donde la velocidad U y el coeficiente de difusión $\mu > 0$ son constantes:

$$\phi_t + U\phi_x + \sigma\phi - \mu\phi_{xx} = f, \quad t \in [0, T], \quad x \in [0, 1]. \quad (1.53)$$

Sea el conjunto de puntos (t_n, x_j) ($n = 0, \dots, N$; $j = 0, \dots, M - 1$) donde $t_n = n\Delta t$, $x_j = j\Delta x$, $\Delta t = T/N$ y $\Delta x = 1/M$. Los puntos (t_n, x_j) definen una rejilla uniforme en $[0, T] \times [0, 1]$ donde se puede plantear el problema discreto

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + U \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n}{2\Delta x} + \sigma\phi_j^n - \mu \frac{\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n}{\Delta x^2} = f_j^n, \quad (1.54)$$

con:

$$\phi_j^n = \phi(j\Delta x, n\Delta t) \quad (1.55)$$

$$f_j^n = f(j\Delta x, n\Delta t) \quad (1.56)$$

$$\frac{\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n}{2\Delta x} = \phi_x(x, t) + O(\Delta x^2) \quad (1.57)$$

$$\frac{\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n}{h^2} = \phi_{xx}(j\Delta x, n\Delta t) + O(\Delta x^2) \quad (1.58)$$

$$\frac{\phi_{i+1, j} - \phi_{i, j}}{\Delta t} = \phi_t(j\Delta x, n\Delta t) + O(\Delta t) . \quad (1.59)$$

El sistema discreto (1.54) constituye una aproximación de la ecuación continua (1.53). Por lo tanto, el problema original (1.53) se reduce al problema discreto (1.54). Despejando ϕ_j^{n+1} en (1.54) se obtiene

$$\phi_j^{n+1} = \phi_j^{n+1} - \frac{1}{2} \frac{U\Delta t}{\Delta x} (\phi_{j+1}^n - \phi_{j-1}^n) + \Delta t \sigma \phi_j^n + \frac{\Delta t \mu}{\Delta x^2} (\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n) - \Delta t f_j^n . \quad (1.60)$$

La ecuación anterior proporciona un esquema explícito para resolver numéricamente el problema (1.53) con un error espacial y temporal que viene determinado por las aproximaciones que se usan para las derivadas espaciales y temporal (ecuaciones (1.57), (1.58) y (1.59)). En resumen, podemos generalizar el procedimiento anterior para obtener una variedad de esquemas de diferencias finitas en dependencia de las fórmulas que se usen para aproximar las derivadas de la ecuación continua. Con frecuencia, es más conveniente tratar el problema semidiscreto:

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{U}{\Delta x} (\phi_{j+1} - \phi_{j-1}) + \sigma \phi_j + \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) - f_j , \quad (1.61)$$

donde $\phi_j(t) \approx \phi(j\Delta x, t)$ y $f_j(t) \approx f(j\Delta x, t)$. La ventaja de la ecuación (1.61), es que permite tratar el problema como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Las diferencias finitas tienen como principal ventaja que es relativamente sencillo desarrollar esquemas con un alto orden de aproximación [33], así como implementarlos en sistemas de cálculo distribuido [34]. Por otra parte, en general no es sencillo garantizar la conservación de la masa total con diferencias finitas [12, 22]. Lo anterior es una consecuencia directa de discretizar el problema en una malla puntual.

Algunos ejemplos de la aplicación de diferencias finitas sobre una esfera se pueden encontrar en los trabajos [35–38]. En los ejemplos anteriores, los autores evitan definir sus esquemas sobre una rejilla regular esférica. Esto se debe a que la convergencia de los meridianos en los polos crea serios problemas de estabilidad cuando se usan esquemas explícitos como el (1.60). Lo anterior se explica porque los valores de CFL y D aumentan considerablemente en las áreas cercanas a los polos (problema polar). Para evitar el problema anterior, se usan formas alternativas de discretizar el dominio [35–38].

1.3.3 Métodos espectrales

Los métodos espectrales se basan en considerar la representación espectral de la solución en cierta base. En el caso de la geometría esférica, la solución $\phi(\mathbf{x}, t)$ puede ser representada como una combinación lineal de armónicos esféricos. La cantidad de armónicos usados determinará la máxima frecuencia de $\phi(\mathbf{x}, t)$ y por ende, la resolución espacial. Con $\phi(\mathbf{x}, t)$ definida de esta forma, el problema se reduce a encontrar los coeficientes de dicha combinación lineal, lo que se hace de manera eficiente con la ayuda de la *Transformada Rápida de Fourier* (FFT) [39]. Las referencias [40–43] contienen una amplia información acerca de este tipo métodos para los casos concretos de modelación atmosférica.

Los métodos espectrales (basados en armónicos esféricos), tienen la ventaja de poder usar una rejilla esférica uniforme y a la vez evitar los problemas asociados a la convergencia de los meridianos en los polos [44]. Por otra parte, estos métodos pueden ser costosos computacionalmente, especialmente a altas resoluciones. Lo anterior se debe al costo de calcular las transformadas de Fourier y Legendre [44], así como la dificultad de paralelizar este proceso [39, 44, 45].

1.3.4 Métodos semilagrangianos

Los métodos semilagrangianos son ampliamente usados en las ciencias atmosféricas [46–53]. En esencia, este tipo de métodos consisten en resolver el problema sobre una rejilla fija (enfoque *Euleriano*), mientras que para avanzar desde el tiempo t al tiempo $t + \Delta t$, se sigue un enfoque *Lagrangiano*. Para ilustrar la idea anterior, considere la ecuación de advección para $U = \text{Const.} > 0$:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -U \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad (1.62)$$

discretizada en una malla uniforme como lo que se muestra en la Fig. 1.1.

Según el enfoque *Lagrangiano*, podemos considerar cada nodo de malla x_j como parcelas que se desplazan en la dirección del flujo a una distancia $U\Delta t$ en el lapso de tiempo Δt . Según lo anterior, para el caso representado en la Fig. 1.1 podemos plantear que $\phi_j^{n+1} = \phi^*$. En general, el punto x^* no coincide con ningún punto de malla (ver Fig. 1.1), por lo que es necesario usar algún tipo de interpolación para encontrar ϕ^* . Usando interpolación lineal en el segmento $[x_{j-1}, x_j]$ se obtiene el siguiente esquema semilagrangiano:

$$\phi_j^{n+1} = \phi^* = \phi_j^n \left(1 - \frac{U\Delta t}{\Delta x}\right) + \phi_{j-1}^n \left(\frac{U\Delta t}{\Delta x}\right) = \phi_j^n - \Delta t U \left(\frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x}\right). \quad (1.63)$$

El esquema anterior también puede ser interpretado como un esquema en diferencias finitas de

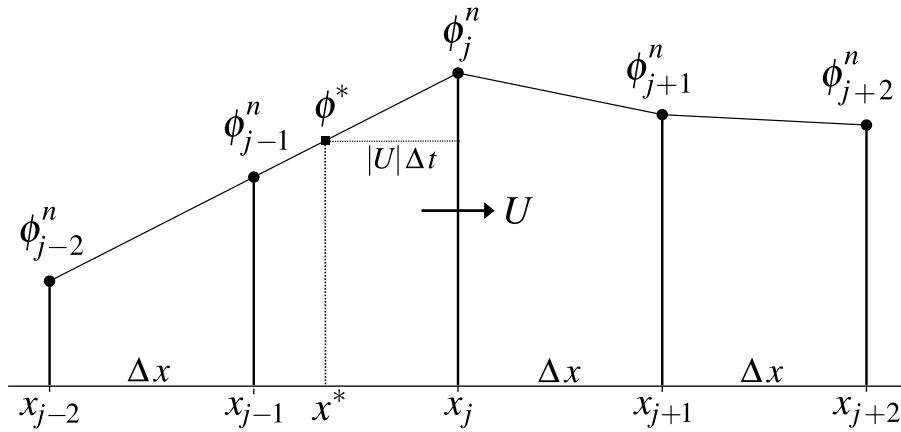


Fig. 1.1: Representación esquemática de un esquema semilagrangiano.

primer orden. Note además, que teniendo en cuenta que $CFL = \frac{U\Delta t}{\Delta x}$, podemos escribir:

$$\phi_j^{n+1} = \phi^* = \phi_j^n (1 - CFL) + \phi_{j-1}^n CFL. \quad (1.64)$$

Según la expresión anterior, el valor de ϕ^* es calculado por interpolación para $CFL \leq 1$ y por extrapolación para $CFL > 1$. Lo anterior explica, al menos de manera intuitiva, por qué es necesario que $CFL \leq 1$ para mantener la estabilidad del esquema. Por otra parte, el razonamiento anterior sugiere que es posible estabilizar el esquema usando más nodos para obtener el valor interpolado ϕ^* . Esta idea es usada en los trabajos [54, 55] para obtener esquemas explícitos e incondicionalmente estables. En [56] se puede encontrar la aplicación de estos esquemas al problema advectivo en geometría esférica.

Los métodos semilagrangianos se aplican con mayor frecuencia al problema de transporte advectivo. Su mayor ventaja es que poseen condiciones de estabilidad menos restrictivas que los esquemas *Eulerianos*, lo que permite usar pasos temporales más grandes. Por otra parte, estos métodos no son conservativos *per se*, por lo que es necesario usar técnicas para garantizar la conservación de la masa total [57–59]. También es posible eliminar este problema usando volúmenes finitos para discretizar el dominio (ver sección 1.3.5), en lugar de una rejilla puntual.

El esquema (1.63) es extremadamente sencillo. Sin embargo, para problemas bidimensionales o tridimensionales con velocidades variables, las estrategias para encontrar el punto x^* (punto de partida) pueden ser muy complicadas y aumentan bastante el costo computacional del esquema. Aún así, los métodos semilagrangianos siguen siendo de los más usados para el problema de transporte en las ciencias atmosféricas [57].

1.3.5 Volúmenes finitos

Los volúmenes finitos son más una forma de discretizar la ecuación en derivadas parciales que un nuevo método en si. Podemos agrupar aquí todos los esquemas numéricos que usan los valores medios de las magnitudes sobre cierto volumen V_j , en lugar de sus valores puntuales. Consideremos la ecuación (1.6) que se tomó de ejemplo en la sección 1.3.2:

$$\phi_t + U\phi_x + \sigma\phi - \mu\phi_{xx} = f. \quad (1.65)$$

Integrando por x en $[0, 1]$ se obtiene:

$$\frac{\partial t}{\partial t} \int_0^1 \phi dx = - \int_0^1 U\phi_x dx - \int_0^1 \sigma\phi dx + \int_0^1 \mu\phi_{xx} dx + \int_0^1 f dx. \quad (1.66)$$

Dividamos el dominio $[0, 1]$ en N segmentos V_j de longitud $\Delta x = 1/N$, centrados en los puntos $x_j = (j + \frac{1}{2})\Delta x$ ($j = 0, 1, \dots, N-1$). La ecuación integral (1.66) también será válida para cada segmento V_j , esto es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \phi dx = - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} U\phi_x dx - \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \sigma\phi dx + \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \mu\phi_{xx} dx + \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} f dx ; \quad j = 0, \dots, N-1. \quad (1.67)$$

Calculando cada una de las integrales de la ecuación anterior se llega a

$$\begin{aligned} \Delta x \frac{\partial \bar{\phi}_j}{\partial t} &= -U \left\{ \phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}} \right\} - \sigma \Delta x \bar{\phi}_j + \mu \left\{ (\phi_x)_{j+\frac{1}{2}} - (\phi_x)_{j-\frac{1}{2}} \right\} + \Delta x \bar{f}_j \\ \frac{\partial \bar{\phi}_j}{\partial t} &= -U \frac{\phi_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \sigma \bar{\phi}_j + \mu \frac{(\phi_x)_{j+\frac{1}{2}} - (\phi_x)_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \bar{f}_j, \end{aligned} \quad (1.68)$$

donde $j = 0, \dots, N-1$, y

$$\bar{\phi}_j = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \phi dx, \quad \bar{f}_j = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} f dx$$

son los valores medios de $\phi(x, t)$ y $f(x, t)$ sobre el segmento V_j (volumen finito), mientras que $\phi_{j\pm\frac{1}{2}}$ y $(\phi_x)_{j\pm\frac{1}{2}}$ son los valores puntuales de $\phi(x, t)$ y $\phi_x(x, t)$ en las fronteras del segmento V_j .

La ecuación semidiscreta (1.68) es la representación en volúmenes finitos del problema original (1.65). Para llegar a (1.68) no se hizo ninguna aproximación, por lo tanto, es una representación exacta del problema original. Las distintas estrategias que se usen para aproximar las magnitudes

$(\phi_x)_{j\pm\frac{1}{2}}$ y $\phi_{j\pm\frac{1}{2}}$, así como la integración temporal, definirán los distintos tipos de esquemas de numéricos. El procedimiento anterior puede extenderse a dos y tres dimensiones de manera muy sencilla. En el caso general, las integrales sobre los volúmenes finitos se calculan usando el teorema del valor medio y de la divergencia [31].

Para el caso particular de $f = \sigma = 0$, podemos escribir la ecuación (1.68) de una manera más sencilla e intuitiva:

$$\Delta x \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} = - \left(F_{j+\frac{1}{2}}^{adv} - F_{j-\frac{1}{2}}^{adv} \right) + \left(F_{j+\frac{1}{2}}^{diff} - F_{j-\frac{1}{2}}^{diff} \right),$$

donde $F^{adv} = \phi U$ (flujo advectivo) y $F^{diff} = \mu \phi_x$ (flujo difusivo). La notación anterior se suele usar con mucha frecuencia en literatura de volúmenes finitos [18,31].

La mayoría de los métodos de volúmenes finitos dedicados a la ecuación de advección-difusión, están más enfocados en el problema advectivo que en el difusivo. Desde el punto de vista numérico, la ecuación de advección supone un reto mayor que la de difusión [18,22]. Aspectos deseados como la positividad o evitar la aparición de dispersión numérica, son particularmente difíciles de lograr en el caso advectivo [18,22,23]. La forma de solventar la mayoría de los problemas que surgen del problema advectivo, se basan en calcular de manera adecuada el flujo $F^{adv} = \phi U$ en las fronteras de cada volumen finito.

En general, *calcular de manera adecuada* los valores de F^{adv} , implica aplicar alguna estrategia no lineal. Esta idea tiene sus orígenes en la familia de métodos conocidos como FCT (Flux Corrected Transport) [60,61]. Más adelante, los trabajos de Van Leer [62–64] dieron origen a los métodos conocidos como TVD (Total Variation Diminishing). Los TVD han sido ampliamente estudiados y constituyen una de las mejores alternativas para evitar problemas como la ocurrencia de oscilaciones no deseadas y valores negativos en las soluciones numéricas [65–68].

Es necesario destacar, que la implementación de técnicas como TVD traen consigo un alto costo computacional [31]. Tampoco estas técnicas corrigen los problemas de estabilidad, ni tienen un impacto especialmente importante en la exactitud del esquema. Por ejemplo, en los casos de advección-difusión donde se tenga que $Pe < 2$, es posible usar un esquema lineal sin que se produzcan oscilaciones indeseadas de la solución, ni se viole el principio de positividad (tal como se demuestra en [18], sección 3.4).

1.3.6 Discretización del dominio esférico

Existen diversas formas de discretizar el dominio esférico y aún es un tema de gran interés [35,36,38,69–73]. El tipo de rejilla que se use puede tener efectos importantes en la exactitud del método

numérico, en la conservación de la masa, la estabilidad o la paralelización de los cálculos. Por otra parte, la discretización espacial está estrechamente ligada al método numérico en si. Por ejemplo, una rejilla regular esférica (Fig 1.2a) es muy conveniente para los métodos espectrales mientras que puede ser muy mala opción para métodos de diferencias finitas.

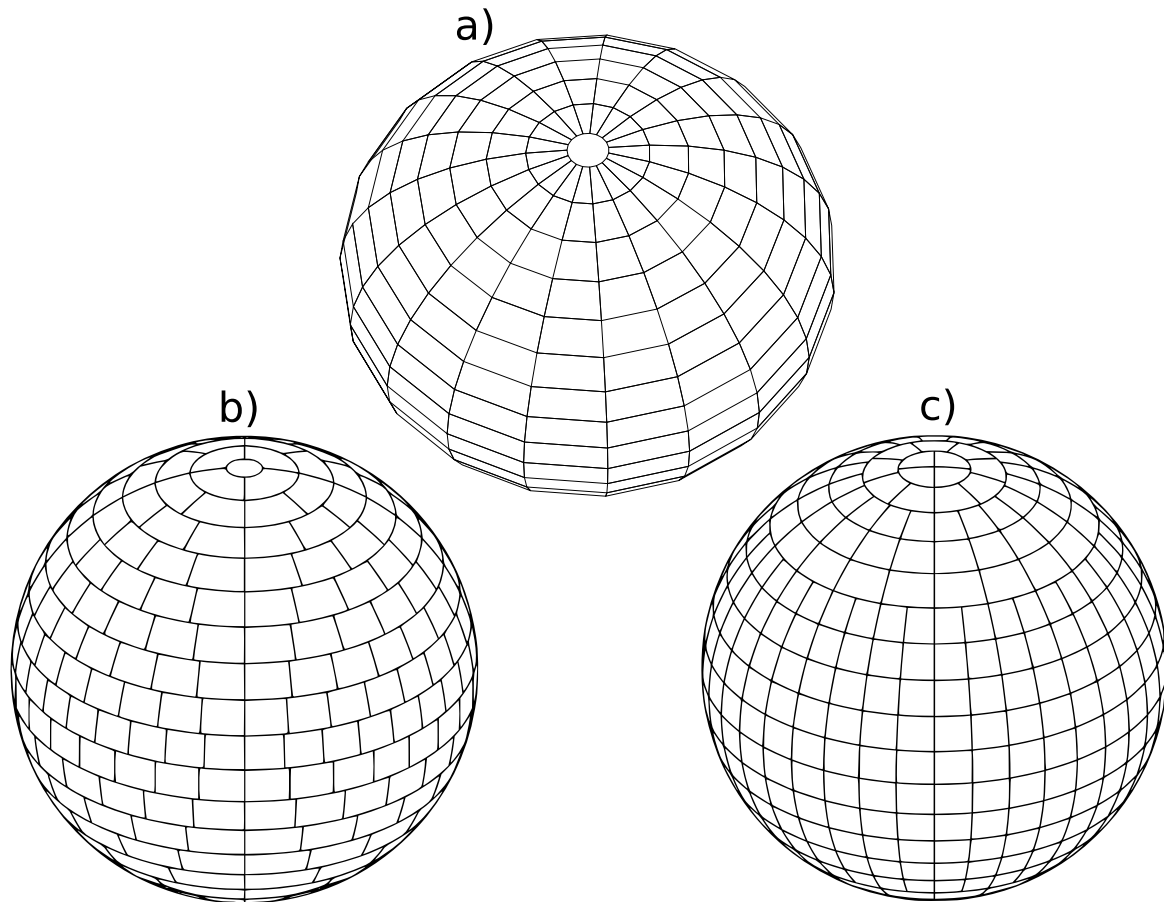


Fig. 1.2: Algunos ejemplos de rejilla latitud/longitud. Rejilla regular esférica (a), Kurihara [38] (b) y Rasch [69] (c).

El dominio esférico plantea retos adicionales a la hora de construir una buena discretización. Lo anterior se puede resumir en la siguiente afirmación: es imposible discretizar la superficie de una esfera manteniendo uniformidad, ortogonalidad y a la vez evitando los puntos singulares (polos).

Las rejillas del tipo latitud/longitud (Fig. 1.2) son las más populares para los problemas de modelación de transporte de contaminantes. Dos ejemplos notables son las propuestas por Kurihara [38] (Fig. 1.2b) y Rasch [69] (Fig. 1.2c). La idea aquí es reducir el número de celdas (rejilla esférica reducida) a medida que nos acercamos a los polos en aras de aumentar su ancho, y

por consiguiente, proporcionar condiciones de estabilidad menos restrictivas en el caso de esquemas explícitos. La idea de reducir el número de celdas cercanas a los polos también es usada en [41] para reducir el costo computacional en el contexto de modelos espectrales.

Además de las rejillas latitud/longitud existen otras variantes más complejas como las rejillas icosaédricas [70] o hexaédricas [71], que dividen la superficie esférica de manera uniforme (o casi uniforme en el caso de [70]). Este tipo de rejillas no es ortogonal y no tienen ninguna relación con las coordenadas esféricas. Por otra parte, no sufren de los problemas asociados a la presencia de las celdas polares. Para una revisión más profunda acerca de este tema se puede consultar [74].

En el próximo capítulo se describirá el modelo AdvDiff2D, el cual cuenta con dos algoritmos de integración temporal. El primero y principal, es incondicionalmente estable y usa una rejilla regular esférica como la mostrada en la figura 1.2a. El segundo es un método monótono y condicionalmente estable, por lo tanto será necesario introducir una nueva rejilla para evitar los problemas de estabilidad (ver sección 2.2.3).

Capítulo 2

Materiales y métodos

En este capítulo se describe en detalle el algoritmo CN-DIM-SPLIT [1] (base del model AdvDiff2D) y se demuestran cada una de sus propiedades. También se presenta un esquema explícito y monótono (RK2-TVD-DIM-SPLIT), como una alternativa para problemas predominantemente advectivos. Finalmente se discuten los detalles de la implementación de AdvDiff2D, así como la estrategia para la paralelización de los cálculos.

2.1 El algoritmo CN-DIM-SPLIT

El algoritmo [1] es la base del modelo AdvDiff2D. A continuación, se describirá dicho algoritmo y se demostrará cada una de sus propiedades. CN-DIM-SPLIT tiene como objetivo resolver numéricamente el problema lineal de advección-difusión

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

sobre la superficie de una esfera. Las principales propiedades del problema continuo fueron tratadas en el capítulo anterior (ver 1.2). En esta sección, se abordará el problema discreto y su resolución numérica según CN-DIM-SPLIT.

2.1.1 Discretización (volúmenes finitos)

Discretización del dominio

Considere la superficie esférica $S = \{(\lambda, \vartheta) : \lambda \in [0, 2\pi]; \vartheta \in [0, \pi]\}$, donde λ es la longitud y ϑ es la colatitud. La idea es dividir S mediante una rejilla regular con pasos constantes $\Delta\lambda$ y $\Delta\vartheta$ en las direcciones longitudinal y latitudinal respectivamente. Cada punto (λ_i, ϑ_j) con $i = 1, 2, \dots, I$ y $j = 1, 2, \dots, J$, está centrado en la celda $(\lambda_i - \Delta\lambda/2 \leq \lambda \leq \lambda_i + \Delta\lambda/2, \vartheta_j - \Delta\vartheta/2 \leq \vartheta \leq \vartheta_j + \Delta\vartheta/2)$ y los puntos $\vartheta_0 = 0$ (polo norte) y $\vartheta_{J+1} = \pi$ (polo sur) corresponden a las celdas $(0 \leq \vartheta \leq \Delta\vartheta/2)$ y $(\pi - \Delta\vartheta/2 \leq \vartheta \leq \pi)$ respectivamente. La figura 2.1 muestra una superficie esférica discretizada de

la forma descrita anteriormente, así como las celdas (volúmenes finitos) con la correspondiente ubicación de los valores de ϕ y las componentes del vector velocidad $\mathbf{U} = (u, v)$.

Nótese que usar una rejilla esférica tiene la ventaja de ser la forma natural de discretizar un dominio esférico (valga la redundancia), lo que se traduce en formas simples de definir los operadores que aparecen en la ecuación (2.1) y sus versiones discretas, además de aprovechar la estructura de estos operadores para hacer la integración temporal sin iteraciones (como se vera más adelante). Por otra parte, el mayor inconveniente es la convergencia de los meridianos hacia los polos, lo que hace que las celdas más cercanas a los polos tengan un área mucho menor en comparación con las cercanas al ecuador (ver la Fig. 2.1). Esta disparidad, junto a la existencia de dos celdas que difieren del resto (las polares) pueden traer problemas numéricos. Es posible encontrar en la literatura varias propuestas para solventar estos problemas, como el uso de rejillas cuasiuniformes [70, 71]. No obstante, en estos casos el problema discreto final es mucho más complicado e incluso se necesitan de estructuras de datos especializadas para almacenar las soluciones numéricas.

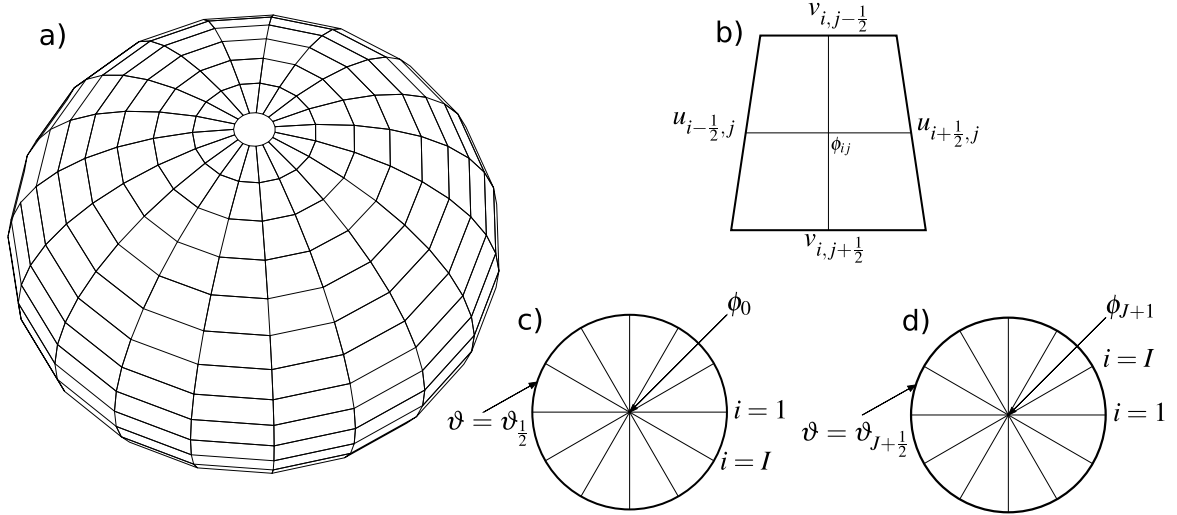


Fig. 2.1: Discretización del dominio (a); celda no polar (b); celda polo norte (c); celda polo sur (d).

A continuación se describe como discretizar los términos de la ecuación (2.1) sobre cada una de las celdas mostradas en la figura 2.1.

Discretización de la ecuación

En lo que sigue se usarán las siguientes aproximaciones de segundo orden para las áreas de las celdas:

$$|S_0| = |S_{J+1}| \approx \pi a^2 \frac{(\Delta\vartheta)^2}{4} \quad (\text{celdas polares}) \quad (2.2)$$

$$|S_{ij}| \approx a^2 \Delta\lambda \Delta\vartheta \sin \vartheta_j \quad (\text{celdas no polares}). \quad (2.3)$$

Además, se usarán los símbolos S_Δ y Γ_Δ para hacer referencia a cualquier celda y su frontera, sin distinción entre celdas polares (S_0 y S_{J+1}) y no polares (S_{ij}).

La estrategia para discretizar los términos de la ecuación (2.1) es la siguiente. El correspondiente valor discreto Q_Δ de cierta función $Q(\mathbf{x})$ sobre la celda S_Δ viene dado por:

$$Q_\Delta = \frac{1}{|S_\Delta|} \int_{S_\Delta} Q(\mathbf{x}) dS \quad (\text{valor medio}). \quad (2.4)$$

Es decir, Q_Δ es el valor medio de $Q(\mathbf{x})$ sobre S_Δ .

Para los términos de la forma $\nabla \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x})$, se aplicará el teorema de Gauss:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{V}|_\Delta &= \frac{1}{|S_\Delta|} \int_{S_\Delta} \nabla \cdot \mathbf{V} dS = \frac{1}{|S_\Delta|} \oint_{\Gamma_\Delta} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dl \\ \nabla \cdot \mathbf{V}|_\Delta &= \frac{1}{|S_\Delta|} \sum_{k=1}^n \int_{\Gamma_\Delta} \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} dl, \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde la frontera de Γ_Δ está formada por 4 lados para las celdas no polares (ver Fig. 2.1b) e I lados para las polares (ver Fig. 2.1c,d). Finalmente, las integrales del segundo miembro de la ecuación (2.5) se aproximan con segundo orden. A continuación se obtendrán las formas discretas de cada uno de los términos de la ecuación (2.1).

Ecuación de continuidad

Como consideramos que la velocidad \mathbf{U} es no divergente, entonces para cada área S_Δ se cumple que:

$$0 = \text{div}(\mathbf{U})|_\Delta = \frac{1}{|S_\Delta|} \int_{S_\Delta} \text{div} \mathbf{U} dS = \frac{1}{|S_\Delta|} \oint_{\Gamma_\Delta} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dl. \quad (2.6)$$

Aproximando, con segundo orden con respecto a $\Delta\lambda$ y $\Delta\vartheta$, se obtiene la versión discreta de la ecuación de continuidad para cada celda.

Celda no polar:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|S_{ij}|} \oint_{\Gamma_{ij}} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dl &\approx \frac{1}{a^2 \Delta\lambda \Delta\vartheta \sin \vartheta_j} \left[a \Delta\vartheta \left(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j} \right) + a \Delta\lambda \left(v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}} \right) \right] \\ 0 &= \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta\lambda} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta\vartheta}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Celda polo norte:

$$\frac{1}{|S_0|} \oint_{\Gamma_0} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dl \approx \frac{4a\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta)/2}{\pi a^2 (\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}}$$

$$0 = \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}}. \quad (2.8)$$

Celda polo sur:

$$\frac{1}{|S_0|} \oint_{\Gamma_0} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dl \approx -\frac{4a\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta)/2}{\pi a^2 (\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}}$$

$$0 = \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}}. \quad (2.9)$$

Término advectivo

$$\vec{\nabla} \phi \cdot \vec{U} \Big|_{\Delta} = \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{U}) \Big|_{\Delta} = \frac{1}{|S_{\Delta}|} \int_{S_{\Delta}} \vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{U}) dS = \frac{1}{|S_{\Delta}|} \oint_{\Gamma_{\Delta}} \phi \vec{U} \cdot \hat{n} dl \quad (2.10)$$

Celda no polar:

$$\frac{1}{|S_{ij}|} \oint_{\Gamma_{ij}} \phi \vec{U} \cdot \hat{n} dl \approx \frac{\phi_{i+\frac{1}{2},j} u_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i-\frac{1}{2},j} u_{i-\frac{1}{2},j}}{a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} + \frac{\phi_{i,j+\frac{1}{2}} v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{i,j-\frac{1}{2}} v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a\Delta\vartheta \sin \vartheta_j} \quad (2.11)$$

Los términos $\phi_{i\pm\frac{1}{2},j}$ y $\phi_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ pueden ser aproximados con las fórmulas de segundo orden:

$$\phi_{i\pm\frac{1}{2},j} = \frac{\phi_{i\pm 1,j} + \phi_{i,j}}{2} \quad (2.12)$$

$$\phi_{i,j\pm\frac{1}{2}} = \frac{\phi_{i,j\pm 1} + \phi_{i,j}}{2}. \quad (2.13)$$

Al sustituir (2.12) y (2.13) en (2.11) nos queda:

$$\frac{1}{|S_{ij}|} \oint_{\Gamma_{ij}} \phi \vec{U} \cdot \hat{n} dl \approx \frac{\phi_{i+1,j} u_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i-1,j} u_{i-\frac{1}{2},j}}{2a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} + \frac{\phi_{i,j+1} v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{i,j-1} v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{2a\Delta\vartheta \sin \vartheta_j} + \phi_{i,j} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{2a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{2a\Delta\vartheta \sin \vartheta_j} \right). \quad (2.14)$$

Nótese que el término que multiplica a $\phi_{i,j}$ es cero según (2.7). Por lo tanto:

$$\mathbf{U} \cdot \text{grad}(\phi)|_{ij} = \frac{\phi_{i+1,j} u_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i-1,j} u_{i-\frac{1}{2},j}}{2a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} + \frac{\phi_{i,j+1} v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{i,j-1} v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{2a\Delta\vartheta \sin \vartheta_j}. \quad (2.15)$$

Celda polo norte:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|S_0|} \oint_{\Gamma_0} \phi \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}} dl &\approx \frac{4\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I \phi_{i,\frac{1}{2}} v_{i,\frac{1}{2}} \approx \frac{2\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I (\phi_0 + \phi_{i,1}) v_{i,\frac{1}{2}} \\ &\approx \frac{2\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \phi_0 \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}} + \frac{2\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I \phi_{i,1} v_{i,\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Nótese que $\sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}} = 0$ según (2.8). Usando la igualdad $2\pi = I\Delta\lambda$, finalmente se llega:

$$\mathbf{U} \cdot \text{grad}(\phi)|_0 = \frac{4 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}} \phi_{i,1}. \quad (2.16)$$

Celda polo sur:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|S_{J+1}|} \oint_{\Gamma_{J+1}} \phi \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}} dl &\approx -\frac{2\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I (\phi_{i,J} + \phi_{i,J+1}) v_{i,J+\frac{1}{2}} \\ &\approx -\frac{2\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \phi_{J+1} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}} - \frac{2\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{\pi a(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I \phi_{i,J+\frac{1}{2}} v_{i,J+\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

$$\mathbf{U} \cdot \text{grad}(\phi)|_{J+1} = -\frac{4 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}} \phi_{i,J}. \quad (2.17)$$

Término difusivo

$$\text{div}(\mu \nabla \phi)|_{\Delta} = \frac{1}{|S_{\Delta}|} \int_{S_{\Delta}} \text{div}(\mu \nabla \phi) dS = \frac{1}{|S_{\Delta}|} \oint_{\Gamma_{\Delta}} \mu \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dl \quad (2.18)$$

En este caso, se usará la expresión del gradiente en coordenadas esféricas:

$$\nabla \phi = \text{grad}(\phi) = \left\{ \frac{1}{a \sin \vartheta} \frac{\partial \phi}{\partial \lambda}, \frac{1}{a} \frac{\partial \phi}{\partial \vartheta} \right\}. \quad (2.19)$$

Celda no polar:

$$\frac{1}{|S_{ij}|} \oint_{\Gamma_{ij}} \mu \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dl \approx \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j} \left\{ \frac{1}{a \sin \vartheta_j} \phi_\lambda \right\}_{i+\frac{1}{2},j} - \mu_{i-\frac{1}{2},j} \left\{ \frac{1}{a \sin \vartheta_j} \phi_\lambda \right\}_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta \lambda a \sin \vartheta_j} + \frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{a} \phi_\vartheta \right\}_{i,j+\frac{1}{2}} - \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{a} \phi_\vartheta \right\}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta \vartheta a \sin \vartheta_j}. \quad (2.20)$$

Sustituyendo en la ecuación anterior, las fórmulas de segundo orden

$$\{\phi_\lambda\}_{i+\frac{1}{2},j} \approx \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{ij}}{\Delta \lambda}, \quad \{\phi_\lambda\}_{i-\frac{1}{2},j} \approx \frac{\phi_{ij} - \phi_{i-1,j}}{\Delta \lambda} \quad (2.21)$$

$$\{\phi_\vartheta\}_{i,j+\frac{1}{2}} \approx \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{ij}}{\Delta \vartheta}, \quad \{\phi_\vartheta\}_{i,j-\frac{1}{2}} \approx \frac{\phi_{ij} - \phi_{i,j-1}}{\Delta \vartheta}, \quad (2.22)$$

finalmente se llega a:

$$\operatorname{div}(\mu \nabla \phi)|_{ij} = \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j}(\phi_{i+1,j} - \phi_{ij}) - \mu_{i-\frac{1}{2},j}(\phi_{ij} - \phi_{i-1,j})}{a^2(\Delta \lambda)^2 \sin^2 \vartheta_j} + \frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2}}(\phi_{i,j+1} - \phi_{ij}) \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \mu_{i,j-\frac{1}{2}}(\phi_{ij} - \phi_{i,j-1}) \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a^2(\Delta \vartheta)^2 \sin \vartheta_j} \quad (2.23)$$

Celda polo norte:

$$\frac{1}{|S_0|} \oint_{\Gamma_0} \mu \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dl \approx \frac{4 \sin(\Delta \vartheta/2) \Delta \lambda}{\pi a (\Delta \vartheta)^2} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{a} \phi_\vartheta \right\}_{i,\frac{1}{2}} = \frac{4 \sin(\Delta \vartheta/2) \Delta \lambda}{\pi a^2 (\Delta \vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} (\phi_{i,\frac{1}{2}} - \phi_0)$$

Finalmente, sustituyendo $2\pi = I \Delta \lambda$ se llega a:

$$\operatorname{div}(\mu \vec{\nabla} \phi)|_0 = \frac{8 \sin(\Delta \vartheta/2)}{I a^2 (\Delta \vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} (\phi_{i,\frac{1}{2}} - \phi_0). \quad (2.24)$$

Celda polo sur:

$$\frac{1}{|S_{J+1}|} \oint_{\Gamma_{J+1}} \mu \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dl \approx -\frac{4 \sin(\Delta \vartheta/2) \Delta \lambda}{\pi a (\Delta \vartheta)^2} \sum_{i=1}^I \mu_{i,J+\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{a} \phi_\vartheta \right\}_{i,J+\frac{1}{2}} = -\frac{4 \sin(\Delta \vartheta/2) \Delta \lambda}{\pi a^2 (\Delta \vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,J+\frac{1}{2}} (\phi_{i,J+1} - \phi_{i,J})$$

$$\operatorname{div}(\mu \nabla \phi)|_{J+1} = -\frac{8 \sin(\Delta \vartheta / 2)}{I a^2 (\Delta \vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i, J+1/2} (\phi_{J+1} - \phi_{i, J}). \quad (2.25)$$

Las fórmulas (2.16), (2.17), (2.24) y (2.25) difieren de las fórmulas originales presentadas en [1]. La diferencia se explica porque en [1] se usó la aproximación $\sin(\Delta \vartheta / 2) \approx \Delta \vartheta / 2$, mientras que en los cálculos anteriores no. Es necesario aclarar, que el uso de una u otra fórmula no influirá en los resultados, puesto que el error de esta aproximación es de orden tres (un orden mayor que el error del método). En este trabajo se prefirió no usar la aproximación para ser consistentes con las fórmulas (2.15) y (2.23) donde también aparece el término $\sin(\Delta \vartheta / 2)$ cuando $j \in \{1, J\}$.

2.1.2 El modelo semidiscreto

Una vez discretizados todos los términos de la ecuación (2.1), entonces se obtiene el modelo semidiscreto:

$$\frac{\partial \phi_0}{\partial t} + \frac{4 \sin(\Delta \vartheta / 2)}{I a (\Delta \vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i, 1/2} \phi_{i, 1} + \sigma \phi_0 - \frac{8 \sin(\Delta \vartheta / 2)}{I a^2 (\Delta \vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i, 1/2} (\phi_{i, 1} - \phi_0) = f_0 \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial t} + \left[\frac{\phi_{i, j+1} v_{i, j+1/2} \sin \vartheta_{j+1/2} - \phi_{i, j-1} v_{i, j-1/2} \sin \vartheta_{j-1/2}}{2 a \Delta \vartheta \sin \vartheta_j} + \frac{\phi_{i+1, j} u_{i+1/2, j} - \phi_{i-1, j} u_{i-1/2, j}}{2 a \Delta \lambda \sin \vartheta_j} \right] \\ + \sigma \phi_{ij} - \left[\frac{\mu_{i, j+1/2} (\phi_{i, j+1} - \phi_{ij}) \sin \vartheta_{j+1/2} - \mu_{i, j-1/2} (\phi_{ij} - \phi_{i, j-1}) \sin \vartheta_{j-1/2}}{a^2 (\Delta \vartheta)^2 \sin \vartheta_j} \right. \\ \left. + \frac{\mu_{i+1/2, j} (\phi_{i+1, j} - \phi_{ij}) - \mu_{i-1/2, j} (\phi_{ij} - \phi_{i-1, j})}{a^2 (\Delta \lambda)^2 \sin^2 \vartheta_j} \right] = f_{ij} \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial \phi_{J+1}}{\partial t} - \frac{4 \sin(\Delta \vartheta / 2)}{I a (\Delta \vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i, J+1/2} \phi_{i, J} + \sigma \phi_{J+1} + \frac{8 \sin(\Delta \vartheta / 2)}{I a^2 (\Delta \vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i, J+1/2} (\phi_{J+1} - \phi_{i, J}) = f_{J+1}. \quad (2.28)$$

Las ecuaciones (2.26) y (2.28) corresponden a las celdas del polo norte y sur respectivamente, y la ecuación (2.27) a las celdas no polares (λ_i, ϑ_j) ($i = 1, \dots, I; j = 1 \dots, J$). El sistema anterior se puede escribir de manera vectorial de la siguiente forma:

$$\vec{\phi}_t + \sum_{i=1}^2 R_i \vec{\phi} + \sigma \vec{\phi} = \vec{f}, \quad (2.29)$$

donde $\vec{\phi} = (\phi_0, \phi_{ij}, \phi_{J+1})^T$ y $\vec{f} = (f_0, f_{ij}, f_{J+1})^T$. Los operadores lineales $R_i = A_i + L_i$, $i = 1, 2$ están dados por:

$$(R_1 \vec{\phi})_0 = (R_1 \vec{\phi})_{J+1} = 0 \quad (\text{celdas polares}) \quad (2.30)$$

$$(A_1 \vec{\phi})_{ij} = \frac{\phi_{i+1,j} \mu_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i-1,j} \mu_{i-\frac{1}{2},j}}{2a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} \quad (2.31)$$

$$(L_1 \vec{\phi})_{ij} = -\frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j}(\phi_{i+1,j} - \phi_{ij}) - \mu_{i-\frac{1}{2},j}(\phi_{ij} - \phi_{i-1,j})}{a^2(\Delta\lambda)^2 \sin^2 \vartheta_j} \quad (2.32)$$

$$(A_2 \vec{\phi})_0 = \frac{4 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}} \phi_{i,1} \quad (\text{polo norte}) \quad (2.33)$$

$$(L_2 \vec{\phi})_0 = -\frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} (\phi_{i,1} - \phi_0) \quad (\text{polo norte}) \quad (2.34)$$

$$(A_2 \vec{\phi})_{ij} = \frac{\phi_{i,j+1} v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{i,j-1} v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{2a\Delta\vartheta \sin \vartheta_j} \quad (2.35)$$

$$(L_2 \vec{\phi})_{ij} = -\frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2}}(\phi_{i,j+1} - \phi_{ij}) \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \mu_{i,j-\frac{1}{2}}(\phi_{ij} - \phi_{i,j-1}) \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a^2(\Delta\vartheta)^2 \sin \vartheta_j} \quad (2.36)$$

$$(A_2 \vec{\phi})_{J+1} = -\frac{4 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}} \phi_{i,J} \quad (\text{polo sur}) \quad (2.37)$$

$$(L_2 \vec{\phi})_{J+1} = \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,J+\frac{1}{2}} (\phi_{J+1} - \phi_{i,J}) \quad (\text{polo sur}) \quad (2.38)$$

Introduzcamos en el producto escalar entre dos vectores \vec{f} y $\vec{\phi}$:

$$\langle \vec{\phi}, \vec{f} \rangle = \phi_0 f_0 |S_0| + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \phi_{ij} f_{ij} |S_{ij}| + \phi_{J+1} f_{J+1} |S_{J+1}|, \quad (2.39)$$

donde $|S_0|$, $|S_{J+1}|$ y $|S_{ij}|$ son las áreas de cada celda, dadas por las fórmulas (2.2) y (2.3). A continuación se demostrarán tres lemas importantes sobre el problema (2.29).

Lema 3. Sea $\vec{1}$ el vector columna cuyos $I \times J + 2$ componentes son iguales a 1. Entonces

$$\sum_{k=1}^2 \langle R_k \vec{\phi}, \vec{1} \rangle = 0. \quad (2.40)$$

Demostración. Usando la fórmula (2.39) se tiene que

$$\sum_{k=1}^2 \langle R_k \vec{\phi}, \vec{1} \rangle = \langle (R_1 + R_2) \vec{\phi}, \vec{1} \rangle = |S_0| \left(\{R_1 + R_2\} \vec{\phi} \right)_0 + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J |S_{ij}| \left(\{R_1 + R_2\} \vec{\phi} \right)_{ij} + |S_{J+1}| \left(\{R_1 + R_2\} \vec{\phi} \right)_{J+1}. \quad (2.41)$$

La ecuación anterior puede escribirse de manera simplificada usando el símbolo $S_\Delta \in \{S_0, S_{ij}, S_{J+1}\}$:

$$\sum_{k=1}^2 \langle R_k \vec{\phi}, \vec{1} \rangle = \sum |S_\Delta| \left(\{R_1 + R_2\} \vec{\phi} \right)_\Delta. \quad (2.42)$$

Por definición, el término $\left(\{R_1 + R_2\} \vec{\phi} \right)_\Delta$ es el flujo que sale de la celda S_Δ , por unidad de área de S_Δ . Por lo tanto, debido a que $S = S_0 \cup S_{ij} \cup S_{J+1}$, es una superficie cerrada, se tiene que el flujo total es cero:

$$\sum |S_\Delta| \left(\{R_1 + R_2\} \vec{\phi} \right)_\Delta = 0. \quad (2.43)$$

La igualdad anterior completa la demostración. ■

Multiplicando la ecuación (2.29) por el vector $\vec{1}$, y usando el resultado anterior, se obtiene la forma semidiscreta de la ecuación de balance de masa (1.17):

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{\phi}, \vec{1} \rangle = \langle \vec{f}, \vec{1} \rangle - \sigma \langle \vec{\phi}, \vec{1} \rangle. \quad (2.44)$$

Lema 4. *Los operadores A_k ($k = 1, 2$) y L_k ($k = 1, 2$) son antisimétricos y semidefinidos positivos respectivamente.*

Demostración. La demostración es directa para A_k ($k = 1, 2$). Usando la periodicidad en el índice i y la ecuación (2.31), se llega a

$$\langle A_1 \vec{\phi}, \vec{\phi} \rangle = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (A_1 \vec{\phi})_{ij} \phi_{ij} |S_{ij}| = \frac{a\Delta\vartheta}{2} \sum_{j=1}^J \left\{ \sum_{i=1}^I u_{i+\frac{1}{2},j} \phi_{i+1,j} \phi_{ij} - u_{i-\frac{1}{2},j} \phi_{i-1,j} \phi_{ij} \right\} = 0. \quad (2.45)$$

Usando (2.35), (2.33) y (2.37) se tiene que:

$$\begin{aligned} \langle A_2 \vec{\phi}, \vec{\phi} \rangle &= (A_2 \vec{\phi})_0 \phi_0 |S_0| + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (A_2 \vec{\phi})_{ij} \phi_{ij} |S_{ij}| + (A_2 \vec{\phi})_{J+1} \phi_{J+1} |S_{J+1}| \\ &= \frac{a\pi \sin(\Delta\vartheta/2)}{I} \sum_{i=1}^I \left(v_{i,\frac{1}{2}} \phi_0 \phi_{i,1} - v_{i,J+\frac{1}{2}} \phi_{J+1} \phi_{i,J} \right) \\ &= -\frac{a\Delta\lambda \sin(\Delta\vartheta/2)}{2} \sum_{i=1}^I \left(v_{i,\frac{1}{2}} \phi_0 \phi_{i,1} - v_{i,J+\frac{1}{2}} \phi_{J+1} \phi_{i,J} \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.46)$$

En la última relación se tuvo en cuenta que $\sin(\Delta\vartheta/2) = \sin(\vartheta_{\frac{1}{2}}) = \sin(\vartheta_{J+\frac{1}{2}})$ y $I\Delta\lambda = 2\pi$. Ahora demostremos que L_k ($k = 1, 2$) son semidefinidos positivos.

Usando (2.32), podemos escribir:

$$\begin{aligned}
\langle L_1 \vec{\phi}, \vec{\phi} \rangle &= \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (L_1 \vec{\phi})_{ij} \phi_{ij} |S_{ij}| \\
&= -\frac{\Delta\vartheta}{\Delta\lambda} \sum_{j=1}^J \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta_j} \sum_{i=1}^I \phi_{ij} \left[\mu_{i+\frac{1}{2},j} (\phi_{i+1,j} - \phi_{ij}) - \mu_{i-\frac{1}{2},j} (\phi_{ij} - \phi_{i-1,j}) \right] \right\} \\
&= \frac{\Delta\vartheta}{\Delta\lambda} \sum_{j=1}^J \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta_j} \sum_{i=1}^I \mu_{i+\frac{1}{2},j} (\phi_{i+1,j} - \phi_{ij})^2 \right\} \geq 0
\end{aligned} \tag{2.47}$$

A la desigualdad anterior se llega agrupando convenientemente los términos de la sumatoria en i , y asumiendo que el coeficiente de difusión no puede ser negativo.

Finalmente, usando (2.34), (2.36) y (2.38) obtenemos

$$\begin{aligned}
\langle L_2 \vec{\phi}, \vec{\phi} \rangle &= (L_2 \vec{\phi})_0 \phi_0 |S_0| + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (L_2 \vec{\phi})_{ij} \phi_{ij} |S_{ij}| + (L_2 \vec{\phi})_{J+1} \phi_{J+1} |S_{J+1}| \\
&= -\frac{\Delta\lambda}{\Delta\vartheta} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} (\phi_{i,1} - \phi_0) \phi_0 \sin(\Delta\vartheta/2) + \frac{\Delta\lambda}{\Delta\vartheta} \sum_{i=1}^I \mu_{i,J+\frac{1}{2}} (\phi_{J+1} - \phi_{i,J}) \phi_{J+1} \sin(\Delta\vartheta/2) \\
&= -\frac{\Delta\lambda}{\Delta\vartheta} \sum_{j=i}^I \sum_{j=1}^J \left\{ \mu_{i,j+\frac{1}{2}} (\phi_{i,j+1} - \phi_{ij}) \phi_{ij} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \mu_{i,j-\frac{1}{2}} (\phi_{ij} - \phi_{i,j-1}) \phi_{ij} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}} \right\} \\
&= \frac{\Delta\lambda}{\Delta\vartheta} \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^I \mu_{i,j+\frac{1}{2}} (\phi_{i,j+\frac{1}{2}} - \phi_{ij})^2 \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} \geq 0.
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Las ecuaciones (2.45), (2.46), (2.47) y (2.48) completan la demostración del lema. ■

Multiplicando cada término de la ecuación (2.29) por $\vec{\phi}$ y usando el Lema 4, se obtiene la forma semidicreta de la ecuación (1.18):

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \vec{\phi}, \vec{\phi} \rangle = \langle \vec{f}, \vec{\phi} \rangle - \sigma \|\vec{\phi}\|^2 - \sum_{k=1}^2 \langle L_k \vec{\phi}, \phi \rangle. \tag{2.49}$$

A continuación se describe el procedimiento para resolver el problema semidiscreto (2.29).

2.1.3 Integración temporal

Para resolver el problema (2.29) se usa el método de separación de variables simétrico de dos ciclos [75, 76]. Consideremos el intervalo de integración $[0, T]$, dividido en $2N$ subintervalos de tamaño τ . En cada intervalo doble $[t_{n-1}, t_{n+1}]$ con $n = 1, 3, 5, \dots, 2N - 1$, el modelo semidiscreto (2.29) puede ser integrado de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \vec{\phi}_1}{\partial t} + \Lambda_1^n \vec{\phi}_1 &= 0; & \vec{\phi}_1(t_{n-1}) &= \vec{\phi}(t_{n-1}); & t &\in [t_{n-1}, t_n] \\
\frac{\partial \vec{\phi}_2}{\partial t} + \Lambda_2^n \vec{\phi}_2 &= 0; & \vec{\phi}_2(t_{n-1}) &= \vec{\phi}_1(t_n); & t &\in [t_{n-1}, t_n] \\
\frac{\partial \vec{\phi}_3}{\partial t} + \sigma \vec{\phi}_3 &= \vec{f}; & \vec{\phi}_3(t_{n-1}) &= \vec{\phi}_2(t_n); & t &\in [t_{n-1}, t_{n+1}] \\
\frac{\partial \vec{\phi}_4}{\partial t} + \Lambda_2^n \vec{\phi}_4 &= 0; & \vec{\phi}_4(t_n) &= \vec{\phi}_3(t_{n+1}); & t &\in [t_n, t_{n+1}] \\
\frac{\partial \vec{\phi}_5}{\partial t} + \Lambda_1^n \vec{\phi}_5 &= 0; & \vec{\phi}_5(t_n) &= \vec{\phi}_4(t_{n+1}); & t &\in [t_n, t_{n+1}] \\
&& & \vec{\phi}(t_{n+1}) &= \vec{\phi}_5(t_{n+1}), &
\end{aligned} \tag{2.50}$$

donde $\Lambda_k^n = A_k(t_n) + L_k(t_n)$ ($k = 1, 2$).

El esquema anterior es de segundo orden con respecto a τ [75, 76], siempre que cada una de los problemas individuales se integren también con al menos segundo orden. La ventaja de usar un esquema como el (2.50) es que se tiene la libertad para escoger el método más conveniente para resolver cada uno de los subproblemas. En este trabajo, se escogió el método clásico de Crank-Nicolson (CN) [77]. CN es un esquema implícito y de segundo orden de aproximación, cuya fórmula para el problema $\vec{y}_t + \Lambda y = 0$ es:

$$\vec{y}_{n+1} - \vec{y}_n = -\frac{\Delta t}{2} \Lambda (\vec{y}_{n+1} + \vec{y}_n), \tag{2.51}$$

donde Λ es un operador lineal, Δt el paso temporal, y \vec{y}_n, \vec{y}_{n+1} las soluciones discretas para $t = t_n, t_{n+1}$. La combinación de CN con el esquema anterior, da como resultado el siguiente esquema implícito y

de segundo orden con respecto a τ :

$$\begin{aligned}
\vec{\phi} \left[n - \frac{2}{3} \right] - \vec{\phi} [n-1] &= -\frac{\tau}{2} \Lambda_1^n \left(\vec{\phi} \left[n - \frac{2}{3} \right] + \vec{\phi} [n-1] \right); \quad t \in [t_{n-1}, t_n] \\
\vec{\phi} \left[n - \frac{1}{3} \right] - \vec{\phi} \left[n - \frac{2}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} \Lambda_2^n \left(\vec{\phi} \left[n - \frac{1}{3} \right] + \vec{\phi} \left[n - \frac{2}{3} \right] \right); \quad t \in [t_{n-1}, t_n] \\
\vec{\phi} \left[n + \frac{1}{3} \right] - \vec{\phi} \left[n - \frac{1}{3} \right] &= 2\tau \vec{f}[n] - \tau \sigma \left(\vec{\phi} \left[n + \frac{1}{3} \right] + \vec{\phi} \left[n - \frac{1}{3} \right] \right); \quad t \in [t_{n-1}, t_{n+1}] \quad (2.52) \\
\vec{\phi} \left[n + \frac{2}{3} \right] - \vec{\phi} \left[n + \frac{1}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} \Lambda_2^n \left(\vec{\phi} \left[n + \frac{2}{3} \right] + \vec{\phi} \left[n + \frac{1}{3} \right] \right); \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \\
\vec{\phi} [n+1] - \vec{\phi} \left[n + \frac{2}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} \Lambda_1^n \left(\vec{\phi} [n+1] + \vec{\phi} \left[n + \frac{2}{3} \right] \right); \quad t \in [t_n, t_{n+1}].
\end{aligned}$$

El esquema (2.52) se resuelve secuencialmente. Partiendo de la solución conocida $\phi[n-1]$ se resuelve la primera ecuación con respecto a $\phi[n-\frac{2}{3}]$, luego este valor es usado para resolver la segunda ecuación con respecto a $\phi[n-\frac{1}{3}]$ y así sucesivamente hasta obtener $\phi[n+1]$. El esquema (2.52) es incondicionalmente estable. A continuación se demuestra la afirmación anterior.

Lema 5. *En cada intervalo $(0, T)$, $T = 2N\tau$, el algoritmo implícito (2.52) es incondicionalmente estable. Esto es*

$$\left\| \vec{\phi}[2N] \right\| \leq \left\| \vec{\phi}[0] \right\| + T \max_{1 \leq k \leq N} \left\| \vec{f}[2k-1] \right\|, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (2.53)$$

Demostración. Primero se demostrará que en cada intervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) se cumple que:

$$\left\| \vec{\phi}[n+1] \right\| \leq \left\| \vec{\phi}[n-1] \right\| + 2\tau \left\| \vec{f}[n] \right\|. \quad (2.54)$$

Multiplicando la primera ecuación de (2.52) por $\vec{g} = \vec{\phi}[n-2/3] + \vec{\phi}[n-1]$, usando el Lema 4 y la fórmula $\langle \phi - \varphi, \phi + \varphi \rangle = \|\phi\|^2 - \|\varphi\|^2$ se obtiene que:

$$\left\| \vec{\phi} \left[n - \frac{2}{3} \right] \right\|^2 - \left\| \vec{\phi} [n-1] \right\|^2 = -\frac{\tau}{2} \langle \Lambda_1^n \vec{g}, \vec{g} \rangle = -\frac{\tau}{2} \langle L_1(t_n) \vec{g}, \vec{g} \rangle \geq 0, \quad (2.55)$$

por lo tanto

$$\left\| \vec{\phi} [n-2/3] \right\| \leq \left\| \vec{\phi} [n-1] \right\|. \quad (2.56)$$

Aplicando la misma estrategia para las segunda, cuarta y quinta ecuaciones del esquema (2.52), se obtiene:

$$\left\| \vec{\phi}\left[n - \frac{1}{3}\right] \right\| \leq \left\| \vec{\phi}\left[n - \frac{2}{3}\right] \right\| \quad (2.57)$$

$$\left\| \vec{\phi}\left[n + \frac{2}{3}\right] \right\| \leq \left\| \vec{\phi}\left[n + \frac{1}{3}\right] \right\| \quad (2.58)$$

$$\left\| \vec{\phi}[n+1] \right\| \leq \left\| \vec{\phi}\left[n + \frac{2}{3}\right] \right\|. \quad (2.59)$$

Para la tercera ecuación del esquema (2.52), tenemos que:

$$\left\| \vec{\phi}\left[n + \frac{1}{3}\right] \right\|^2 - \left\| \vec{\phi}\left[n - \frac{1}{3}\right] \right\|^2 \leq 2\tau \left\| \vec{f}[n] \right\| - \tau\sigma \left(\left\| \vec{\phi}\left[n + \frac{1}{3}\right] \right\| + \left\| \vec{\phi}\left[n - \frac{1}{3}\right] \right\| \right) \leq 2\tau \left\| \vec{f}[n] \right\|. \quad (2.60)$$

Combinando las desigualdades anteriores se llega a (2.54). Finalmente, aplicando de manera consecutiva la desigualdad (2.54) para cada subintervalo (t_{n-1}, t_{n+1}) , se llega a (2.53), lo que completa la demostración. ■

Multiplicando cada ecuación de (2.52) por el vector $\vec{1}$ y usando el Lema 3, se llega a la forma discreta de la ecuación de balance de masa (1.17):

$$\left\langle \vec{\phi}[n+1], \vec{1} \right\rangle - \left\langle \vec{\phi}[n-1], \vec{1} \right\rangle = 2\tau \left\langle \vec{f}[n], \vec{1} \right\rangle - 2\tau\sigma \left\langle \frac{\vec{\phi}[n+1] + \vec{\phi}[n-1]}{2}, \vec{1} \right\rangle. \quad (2.61)$$

Si además se usa la fórmula $\langle \vec{\phi} - \vec{\phi}, \vec{\phi} + \vec{\phi} \rangle = \|\vec{\phi}\|^2 - \|\vec{\phi}\|^2$, se llega a la versión discreta de la ecuación (1.18):

$$\begin{aligned} \left\| \vec{\phi}[n+1] \right\|^2 - \left\| \vec{\phi}[n-1] \right\|^2 &= 2\tau \left\langle \vec{f}[n], \vec{\phi}\left[n + \frac{1}{3}\right] + \vec{\phi}\left[n - \frac{1}{3}\right] \right\rangle - \tau\sigma \left\| \vec{\phi}\left[n + \frac{1}{3}\right] + \vec{\phi}\left[n - \frac{1}{3}\right] \right\|^2 \\ &\quad - \frac{\tau}{2} \sum_{k=1}^2 \{ \langle L_k(t_n) \vec{w}_k, \vec{w}_k \rangle + \langle L_k(t_n) \vec{z}_k, \vec{z}_k \rangle \}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

donde:

$$\begin{aligned} \vec{w}_1 &= \vec{\phi}\left[n - \frac{2}{3}\right] + \vec{\phi}[n-1] & \vec{w}_2 &= \vec{\phi}\left[n - \frac{1}{3}\right] + \vec{\phi}\left[n - \frac{2}{3}\right] \\ \vec{z}_1 &= \vec{\phi}[n+1] + \vec{\phi}\left[n + \frac{2}{3}\right] & \vec{z}_2 &= \vec{\phi}\left[n + \frac{2}{3}\right] + \vec{\phi}\left[n + \frac{1}{3}\right]. \end{aligned}$$

Al igual que en el problema continuo (ver sec. 1.2.1), de la fórmula (2.61) se deduce que cuando $\sigma \equiv 0$ y $\vec{f}[n] \equiv 0$ la masa total se conserva: $\langle \vec{\phi}[n+1], \vec{1} \rangle - \langle \vec{\phi}[n-1], \vec{1} \rangle = 0$. De la misma manera,

según la ecuación (2.62) la norma se conserva solo cuando se tiene que $\mu \equiv 0$, $\sigma \equiv 0$ y $\vec{f}[n] \equiv 0$, lo que también está en concordancia con el problema continuo (sec. 1.2.1).

El esquema (2.52) es estable (según el Lema 5) y de segundo orden de aproximación con respecto a $\Delta\vartheta$, $\Delta\lambda$ y τ . Por lo tanto, según el teorema de equivalencia de Lax [78], se tiene que:

Teorema 2. *El esquema (2.52) converge con segundo orden con respecto a $\Delta\vartheta$, $\Delta\lambda$ y τ .*

Las propiedades del algoritmo (2.52), como la conservación de la norma o la estabilidad incondicional, son consecuencia directa de usar el método implícito de Crank-Nicolson. Por otra parte, el carácter implícito de CN implica que es necesario invertir los operadores Λ_k ($k = 1, 2$), o lo que es lo mismo, resolver varios sistema de ecuaciones lineales. A continuación se describe la estrategia seguida para resolver cada una de los problemas del esquema (2.52) sin la necesidad de iteraciones y usando cálculos en paralelo, esto es precisamente uno de los mayores atractivos del algoritmo CN-DIM-SPLIT. La estrategia consiste en aprovechar convenientemente la estructura de los operadores Λ_k ($k = 1, 2$).

Problema en la dirección de λ

La primera y la última ecuación del esquema (2.52) involucran el operador lineal $\Lambda_1^n = R_1(t_n) = L_1(t_n) + A_1(t_n)$. Para resolver estos problemas de manera eficiente, se hará uso de la estructura matricial del operador $R_1 = R_1(t_n)$ (se omitirá la dependencia de t_n por simplicidad).

Luego de algún trabajo algebraico con las expresiones (2.31) y (2.32) se llega a la forma matricial del operador R_1 . Es fácil percatarse de que la matriz R_1 esta formada por J matrices $R_1^j \in \mathbb{R}^{I \times I}$ ($j = 1, 2, \dots, J$) independientes, cada una actuando sobre el vector $\vec{\phi}^j = \{\phi_{1,j}, \phi_{2,j}, \dots, \phi_{I,j}\}^T$:

$$R_1^j = -\frac{1}{2a^2(\Delta\lambda)^2 \sin^2 \vartheta_j} \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & a_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{I-1} & b_{I-1} & c_{I-1} \\ c_I & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_I & b_I \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{I \times I} \quad (2.63)$$

donde:

$$a_i = \Delta\lambda a u_{i-\frac{1}{2},j} \sin \vartheta_j + 2\mu_{i-\frac{1}{2},j} \quad (2.64)$$

$$b_i = -2\mu_{i+\frac{1}{2},j} - 2\mu_{i-\frac{1}{2},j} \quad (2.65)$$

$$c_i = -\Delta\lambda a u_{i+\frac{1}{2},j} \sin \vartheta_j + 2\mu_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \quad (2.66)$$

Es decir, el operador R_1 viene dado por la matriz

$$R_1 = \begin{pmatrix} R_1^1 & & & \\ & R_1^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & R_1^J \end{pmatrix} \in R^{(I \times J) \times (I \times J)}, \quad (2.67)$$

y por lo tanto tenemos que

$$R_1 \vec{\phi} = \begin{pmatrix} R_1^1 \vec{\phi}^1 \\ R_1^2 \vec{\phi}^2 \\ \vdots \\ R_1^J \vec{\phi}^J \end{pmatrix}, \quad (2.68)$$

donde

$$\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \vec{\phi}^1 \\ \vec{\phi}^2 \\ \vdots \\ \vec{\phi}^J \end{pmatrix} = \{(\phi_{1,1}, \phi_{2,1}, \dots, \phi_{I,1}), (\phi_{1,2}, \phi_{2,2}, \dots, \phi_{I,2}), \dots, (\phi_{1,J}, \phi_{2,J}, \dots, \phi_{I,J})\}^T. \quad (2.69)$$

En la expresión (2.69) se omiten los polos ϕ_0 y ϕ_{J+1} debido a que el operador R_1 no actúa sobre las celdas polares (ver ec. (2.30)). La Figura 2.2 muestra la estructura del operador R_1 para el caso particular de $J = 4$ y $I = 10$.

Las primera y última ecuaciones del esquema (2.52) pueden escribirse de la forma:

$$\left[\zeta + \frac{\tau}{2} R_1 \right] \vec{\phi} = \left[\zeta - \frac{\tau}{2} R_1 \right] \vec{\phi}_0, \quad (2.70)$$

donde ζ es la matriz unitaria, $\vec{\phi} = \vec{\phi}[n - \frac{2}{3}]$, $\vec{\phi}_0 = \vec{\phi}[n - 1]$ para la primera ecuación y $\vec{\phi} = \vec{\phi}[n + 1]$, $\vec{\phi}_0 = \vec{\phi}[n + \frac{2}{3}]$ para la quinta.

Debido a la estructura de la matriz R_1 (ver Fig. 2.2), es sencillo mostrar que el sistema de ecuaciones lineales (2.70) de dimension $J \times I$, se divide en J sistemas de dimensión I , que se pueden resolver de manera independiente, esto es:

$$\left[\zeta + \frac{\tau}{2} R_1^j \right] \vec{\phi}^j = \left[\zeta - \frac{\tau}{2} R_1^j \right] \vec{\phi}_0^j \quad j = 1, 2, \dots, J. \quad (2.71)$$

Las matrices $\zeta + \frac{\tau}{2} R_1^j$ ($j = 1, \dots, J$) son tridiagonales, excepto por el último elemento de la primera fila y el primer elemento de la última (resaltados en azul y rojo en la Fig. 2.2). Este tipo de sistemas se puede resolver de manera muy eficiente usando el algoritmo de Thomas [79] para resolver la parte tridiagonal y la fórmula de Sherman-Morrison [80, 81] para incluir la parte *no*

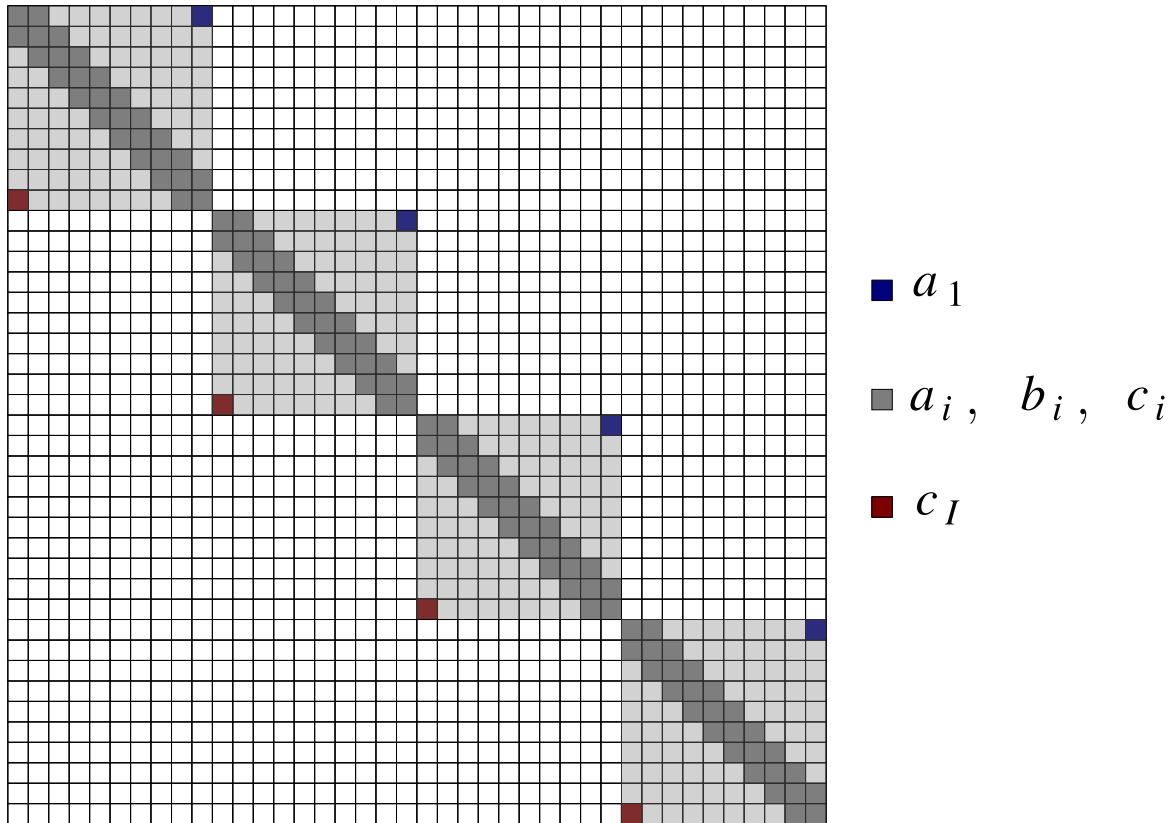


Fig. 2.2: Estructura de la matriz R_1 . En colores cada uno de los elementos diferentes de cero de las submatrices R_1^j . La matriz mostrada corresponde a $I = 10$ y $J = 4$. Nótese que las submatrices $R_1^j \in \mathbb{R}^{10 \times 10}$ ($j = 1, 2, 3, 4$) son independientes entre si.

tridiagonal (los elementos en azul y rojo en la Fig. 2.2). Cada sistema (2.71) corresponde a *un problema de advección-difusión unidimensional con fronteras cíclicas en la dirección longitudinal, a lo largo de una franja de ancho $\Delta\vartheta$ y colatitud constante.*

El algoritmo de Thomas [79] es directo (sin iteraciones) y tiene un costo computacional de solo $O(I)$ pasos, por lo que es mucho más eficiente que la eliminación gaussiana (aproximadamente de $O(I^3)$ [82]). Por otra parte, la fórmula de Sherman-Morrison [80, 81] solo supone unos pocos cálculos extra [82]. En la práctica, el algoritmo de Thomas y la fórmula de Sherman-Morrison se combinan en un mismo procedimiento [82].

Si denotamos por $\text{CN_AdvDiff}_\lambda(j)$ al procedimiento (o subrutina) que resuelve el j -ésimo sistema lineal (2.71), entonces obtenemos el algoritmo 1. Este algoritmo es aplicable a la primera y quinta ecuaciones del esquema (2.52). La etiqueta — **parallel for** — se usa para especificar que cada una de las iteraciones del ciclo **for** pueden ser ejecutadas de forma paralela. La implementación práctica del

algoritmo 1 es bastante sencilla, debido a que los procedimientos $\text{CN_AdvDiff}_\lambda(j)$ ($j = 1, 2, \dots, J$) son independientes entre si y no se necesita ninguna sincronización entre ellos.

Algoritmo 1: Algoritmo para resolver el problema de advección-difusión en la dirección longitudinal (λ).

```

1 for  $j = 1, 2, \dots, J$  do
2   — parallel for —
3   Run  $\vec{\phi}^j = \text{CN\_AdvDiff}_\lambda(j)$ 

```

Problema en la dirección de ϑ

Como se verá a continuación, el problema en la dirección meridional (dirección de ϑ) es notablemente más complejo por la presencia de las celdas polares. Sin embargo, también es posible desarrollar un algoritmo eficiente y paralelizar los cálculos.

Usando las fórmulas (2.33), (2.33), (2.34), (2.35), (2.36), (2.37) y (2.38) se obtiene la forma matricial del operador $R_2 = R_2(t_n) = A_2(t_n) + L_2(t_n)$,

$$R_2 = \begin{pmatrix} \bar{b} & \bar{X}^T & 0 \\ \bar{Y} & R_2^* & \bar{W} \\ 0 & \bar{U}^T & \bar{b} \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

donde:

$$R_2^* = \begin{pmatrix} R_2^1 & & & \\ & R_2^2 & & \\ & & \dots & \\ & & & R_2^J \end{pmatrix}, \quad R_2^i = \begin{pmatrix} b_{i1} & c_{i1} & & & \\ a_{i2} & b_{i2} & c_{i2} & & \\ & a_{i3} & b_{i3} & c_{i3} & \\ & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{i,J-1} & b_{i,J-1} & c_{i,J-1} \\ & & & & a_{i,J} & b_{i,J} \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

$$\bar{X} = \begin{pmatrix} \bar{X}_1 \\ \bar{X}_2 \\ \vdots \\ \bar{X}_I \end{pmatrix} \quad \bar{X}_i = \begin{pmatrix} \bar{c}_i \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^J, \quad \bar{U} = \begin{pmatrix} \bar{U}_1 \\ \bar{U}_2 \\ \vdots \\ \bar{U}_I \end{pmatrix} \quad \bar{U}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \bar{a}_i \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^J \quad (2.74)$$

$$\bar{Y} = \begin{pmatrix} \bar{Y}_1 \\ \bar{Y}_2 \\ \vdots \\ \bar{U}_I \end{pmatrix} \quad \bar{Y}_i = \begin{pmatrix} a_{i,1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^J, \quad \bar{W} = \begin{pmatrix} \bar{W}_1 \\ \bar{W}_2 \\ \vdots \\ \bar{W}_I \end{pmatrix} \quad \bar{W}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ c_{i,J} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^J \quad (2.75)$$

y

$$\bar{b} = \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}}, \quad \tilde{b} = \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_i \mu_{i,J+\frac{1}{2}} \quad (2.76)$$

$$\bar{c}_i = \frac{4a\Delta\vartheta \sin(\Delta\vartheta/2)v_{i,\frac{1}{2}} - 8 \sin(\Delta\vartheta/2)\mu_{i,\frac{1}{2}}}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \quad (2.77)$$

$$\tilde{a}_i = \frac{-4a\Delta\vartheta \sin(\Delta\vartheta/2)v_{i,J+\frac{1}{2}} - 8 \sin(\Delta\vartheta/2)\mu_{i,J+\frac{1}{2}}}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \quad (2.78)$$

$$a_{ij} = \frac{-a\Delta\vartheta v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}} - 2\mu_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{2(\Delta\vartheta)^2 a^2 \sin \vartheta_j} \quad (2.79)$$

$$b_{ij} = \frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} + \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a^2(\Delta\vartheta)^2 \sin \vartheta_j} \quad (2.80)$$

$$c_{ij} = \frac{a\Delta\vartheta v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - 2\mu_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}}}{2(\Delta\vartheta)^2 a^2 \sin \vartheta_j}. \quad (2.81)$$

La Figura 2.3 muestra la estructura del operador R_2 . Si se eliminan las filas y columnas más externas de la matriz R_2 (los *bordes* de la matriz, ver Fig. 2.3), entonces la submatriz R_2^* se puede dividir en I matrices $R_2^i \in \mathbb{R}^{J \times J}$ independientes entre sí. Es decir, las matrices R_2^i ($i = 1 \dots, I$) juegan un papel análogo a las matrices R_1^j ($j = 1, \dots, J$) en el operador R_1 .

La segunda y cuarta ecuación de (2.52) se pueden escribir como

$$\left[\zeta + \frac{\tau}{2} R_2 \right] \vec{\phi} = \left[\zeta - \frac{\tau}{2} R_2 \right] \vec{\phi}_0, \quad (2.82)$$

donde $R_2 = R_2(t_n) = A_2(t_n) + L_2(t_n)$, $\vec{\phi} = \vec{\phi}[n - \frac{1}{3}]$, $\vec{\phi}_0 = \vec{\phi}[n - \frac{2}{3}]$ para la segunda ecuación y $\vec{\phi} = \vec{\phi}[n + \frac{2}{3}]$, $\vec{\phi}_0 = \vec{\phi}[n + \frac{1}{3}]$ para la cuarta. A continuación se describe como resolver el sistema (2.82).

Para facilitar la explicación, escribiremos el sistema (2.82) como

$$M_2 \vec{\phi}_2 = \vec{F}_2, \quad (2.83)$$

donde $M_2 = \zeta + \frac{\tau}{2} R_2$ y $\vec{F}_2 = \left[\zeta - \frac{\tau}{2} R_2 \right] \vec{\phi}_0$. El uso del subíndice 2 cobrará sentido con la siguiente notación:

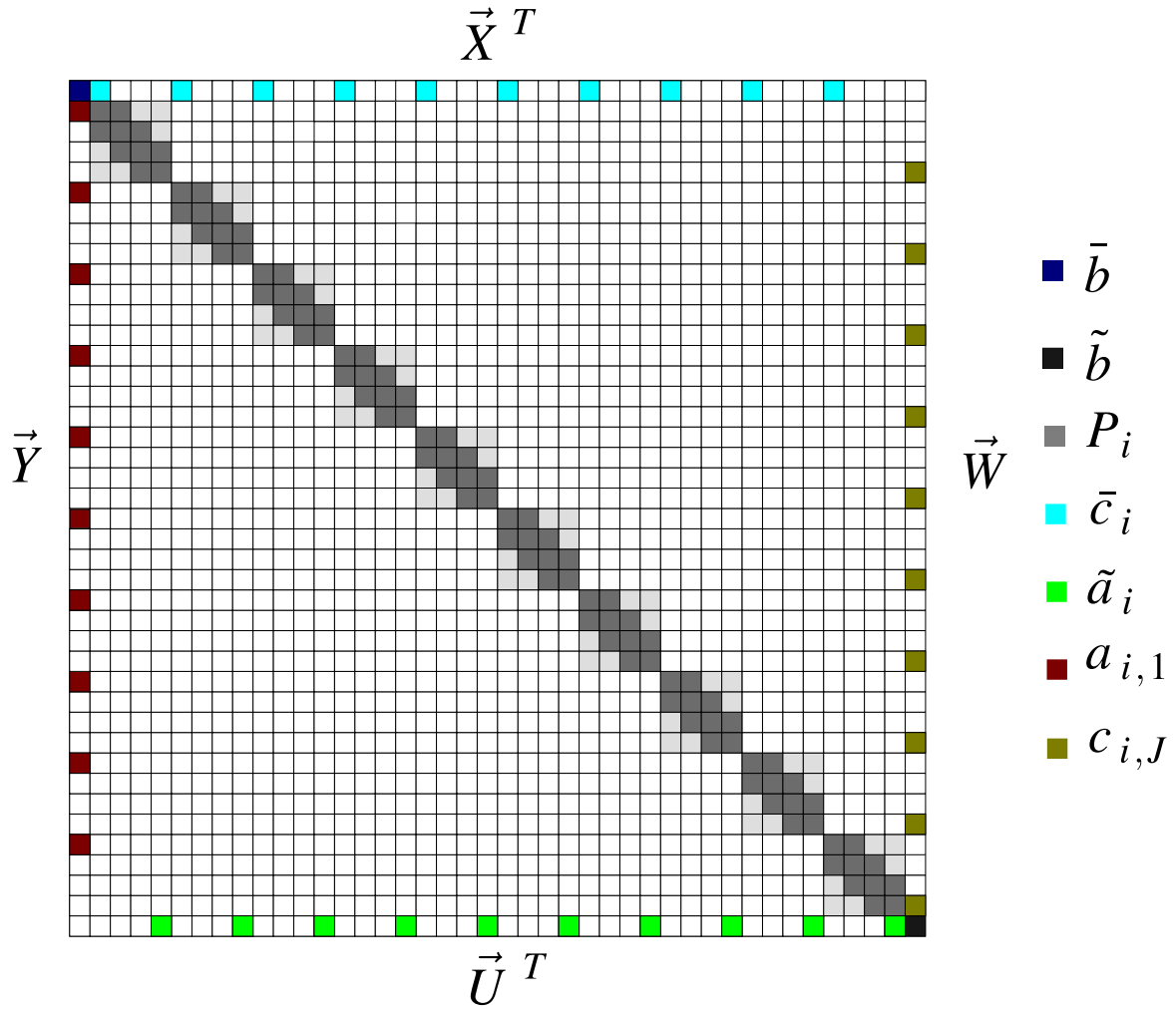


Fig. 2.3: Estructura de la matriz R_2 . En colores cada uno de los elementos diferentes de cero. La matriz mostrada corresponde a $I = 10$ y $J = 4$. Nótese que las submatrices $R_1^i \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ ($i = 1, \dots, 10$) son tridiagonales.

$$\vec{\phi}_2 = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \vec{\phi} \\ \phi_{J+1} \end{pmatrix}, \vec{\phi}_1 = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \vec{\phi} \end{pmatrix}, \vec{\phi} = \begin{pmatrix} \phi_{1,1} \\ \phi_{1,2} \\ \vdots \\ \phi_{1,J} \\ \vdots \\ \phi_{I,1} \\ \phi_{I,2} \\ \vdots \\ \phi_{I,J} \end{pmatrix}, \vec{F}_2 = \begin{pmatrix} F_0 \\ \vec{F} \\ F_{J+1} \end{pmatrix}, \vec{F}_1 = \begin{pmatrix} F_0 \\ \vec{F} \end{pmatrix}, \vec{F} = \begin{pmatrix} F_{1,1} \\ F_{1,2} \\ \vdots \\ F_{1,J} \\ \vdots \\ F_{I,1} \\ F_{I,2} \\ \vdots \\ F_{I,J} \end{pmatrix}, \quad (2.84)$$

$$M_2 = \begin{pmatrix} \bar{b}_\tau & \bar{X}_\tau^T & 0 \\ \bar{Y}_\tau & M_1 & \bar{W}_\tau \\ 0 & \bar{U}_\tau^T & \tilde{b}_\tau \end{pmatrix}, M_1 = \begin{pmatrix} \bar{b}_\tau & \bar{X}_\tau^T \\ \bar{Y}_\tau & M \end{pmatrix}, M = \begin{pmatrix} P_2^1 & & & \\ & P_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & P_2^I \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

En la fórmula anterior se tiene que:

$$\begin{aligned} \bar{b}_\tau &= 1 + \frac{\tau}{2}\bar{b}, \quad \bar{X}_\tau^T = \frac{\tau}{2}\bar{X}^T, \quad \bar{Y}_\tau = \frac{\tau}{2}\bar{Y}, \quad \bar{W}_\tau = \frac{\tau}{2}\bar{W}, \quad \bar{U}_\tau^T = \frac{\tau}{2}\bar{W}^T, \quad \tilde{b}_\tau = 1 + \frac{\tau}{2}\tilde{b}, \\ P_2^i &= \zeta + \frac{\tau}{2}R_2^i, \quad i = 1, 2, \dots, I. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Para resolver el sistema (2.83) se usará el método de bordes [28], esto es:

$$\vec{\phi}_2 = \begin{pmatrix} \vec{\phi}_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{F_{J+1} - (0, \bar{U}_\tau^T) \cdot \vec{\phi}_1}{\tilde{b} - (0, \bar{U}_\tau^T) \cdot M_1^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{W}_\tau \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} -M_1^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{W}_\tau \end{pmatrix} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\phi}_1 = M_1^{-1} \vec{F}_1. \quad (2.87)$$

En la ecuación anterior debemos resolver dos problemas auxiliares:

$$\vec{\phi}_1 = M_1^{-1} \vec{F}_1 \quad (2.88)$$

$$\vec{g}_1 = M_1^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{W}_\tau \end{pmatrix}. \quad (2.89)$$

La ec. (2.88) es equivalente a:

$$M_1 \vec{\phi}_1 = \vec{F}_1, \quad (2.90)$$

Aplicando el método de bordes en el sistema anterior se tiene que:

$$\phi_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{\phi} \end{pmatrix} + \frac{F_0 - \bar{X}_\tau^T \cdot \vec{\phi}}{\bar{b} - \bar{X}_\tau^T \cdot M^{-1} \cdot \bar{Y}_\tau} \begin{pmatrix} 1 \\ -M^{-1} \cdot \bar{Y}_\tau \end{pmatrix}, \quad \vec{\phi} = M^{-1} \cdot \vec{F}. \quad (2.91)$$

Notar que, dada la forma de la matriz M (ver ec. (2.85)), los sistemas:

$$\vec{\phi} = M^{-1} \cdot \vec{F} \quad (2.92)$$

$$\vec{h} = M^{-1} \cdot \vec{Y}, \quad (2.93)$$

se pueden resolver muy eficientemente. La matriz M está formada por submatrices tridiagonales independientes entre si (submatrices $\zeta + \frac{\tau}{2}P_2^i \in \mathbb{R}^{J \times J}$), por lo tanto, un problema de la forma $M\vec{x} = \vec{b}$ puede descomponerse en varios subproblemas tridiagonales de menor dimensión y que pueden ser resueltos en paralelo.

La ec. (2.89) es equivalente a:

$$M_1 \vec{g}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{W}_\tau \end{pmatrix}, \quad (2.94)$$

Aplicando el método de bordes en el sistema anterior se tiene que:

$$\vec{g}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{g} \end{pmatrix} + \frac{-\vec{X}_\tau^T \cdot \vec{g}}{\bar{b} - \vec{X}_\tau^T \cdot M^{-1} \cdot \vec{Y}_\tau} \begin{pmatrix} 1 \\ -M^{-1} \cdot \vec{Y}_\tau \end{pmatrix}, \quad \vec{g} = M^{-1} \cdot \vec{W}. \quad (2.95)$$

Nuevamente el sistema:

$$\vec{g} = M^{-1} \cdot \vec{W}_\tau, \quad (2.96)$$

se puede resolver muy eficientemente. Es más, debido a que los sistemas (2.92), (2.93) y (2.96) comparten la misma matriz M , entonces será necesario calcular M^{-1} solo una vez.

Ahora se puede reescribir la expresión (2.87) como:

$$\vec{\phi}_2 = \begin{pmatrix} \vec{\phi}_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{F_{J+1} - (0, \vec{U}_\tau^T) \cdot \vec{\phi}_1}{\bar{b} - (0, \vec{U}_\tau^T) \cdot \vec{g}_1} \begin{pmatrix} -\vec{g}_1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.97)$$

Definiendo las constantes:

$$K_g = \frac{-\vec{X}_\tau^T \cdot \vec{g}}{\bar{b} - \vec{X}_\tau^T \cdot \vec{h}} \quad (2.98)$$

$$K_\phi = \frac{F_0 - \vec{X}_\tau^T \cdot \vec{\phi}}{\bar{b} - \vec{X}_\tau^T \cdot \vec{h}}, \quad (2.99)$$

se tiene que:

$$\vec{g}_1 = \begin{pmatrix} K_g \\ \vec{g} - K_g \vec{h} \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

$$\vec{\phi}_1 = \begin{pmatrix} K_\phi \\ \vec{\phi} - K_\phi \vec{h} \end{pmatrix} \quad (2.101)$$

$$(0, \vec{U}_\tau^T) \cdot \vec{\phi}_1 = \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{\phi} - K_\phi \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{h} \quad (2.102)$$

$$(0, \vec{U}_\tau^T) \cdot \vec{g}_1 = \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{g} - K_g \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{h} \quad (2.103)$$

Sustituyendo en (2.97) se obtiene:

$$\vec{\phi}_2 = \begin{pmatrix} K_\phi \\ \vec{\phi} - K_\phi \vec{h} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{F_{J+1} - \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{\phi} + K_\phi \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{h}}{\bar{b} - \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{g} + K_g \vec{U}_\tau^T \cdot \vec{h}} \begin{pmatrix} -K_g \\ -\vec{g} + K_g \vec{h} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.104)$$

Desarrollando las expresión anterior, finalmente nos queda:

$$\vec{\phi}_2 = \begin{pmatrix} p_n \\ \vec{p} \\ p_s \end{pmatrix}, \quad (2.105)$$

donde

$$p_n = \frac{(\vec{X}_\tau \cdot \vec{\phi} - F_0)(\vec{U}_\tau \cdot \vec{g} - \vec{b}_\tau) - (\vec{X}_\tau \cdot \vec{g})(\vec{U}_\tau \cdot \vec{\phi} - F_{J+1})}{(\vec{U}_\tau \cdot \vec{g} - \vec{b}_\tau)(\vec{X}_\tau \cdot \vec{h} - \vec{b}_\tau) - (\vec{U}_\tau \cdot \vec{h})(\vec{X}_\tau \cdot \vec{g})} \quad (\text{polo norte}) \quad (2.106)$$

$$p_s = \frac{(\vec{U}_\tau \cdot \vec{\phi} - F_{J+1})(\vec{X}_\tau \cdot \vec{h} - \vec{b}_\tau) + (\vec{U}_\tau \cdot \vec{h})(F_0 - \vec{X}_\tau \cdot \vec{\phi})}{(\vec{U}_\tau \cdot \vec{g} - \vec{b}_\tau)(\vec{X}_\tau \cdot \vec{h} - \vec{b}_\tau) - (\vec{U}_\tau \cdot \vec{h})(\vec{X}_\tau \cdot \vec{g})} \quad (\text{polo sur}) \quad (2.107)$$

$$\vec{p} = \vec{\phi} - p_s \vec{g} - p_n \vec{h} \quad (\text{celdas no polares}). \quad (2.108)$$

En la estrategia anterior, la parte más costosa computacionalmente es resolver los problemas lineales (2.92), (2.93) y (2.96). Sin embargo, podemos usar el hecho de que los tres problemas comparten la misma matriz M y aprovechar la estructura de dicha matriz convenientemente. Esto es, resolver (2.92), (2.93) y (2.96) es equivalente a resolver I subproblemas de la forma

$$\left[\zeta + \frac{\tau}{2} P_2^i \right] \vec{\phi}^i = \left[\zeta - \frac{\tau}{2} P_2^i \right] \vec{\phi}_0^i - \frac{\tau}{2} \begin{pmatrix} a_{i,1} \phi_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ c_{i,J} \phi_{J+1} \end{pmatrix}, \quad (2.109)$$

$$\left[\zeta + \frac{\tau}{2} P_2^i \right] \vec{h}^i = \frac{\tau}{2} \vec{Y}_i, \quad (2.110)$$

$$\left[\zeta + \frac{\tau}{2} P_2^i \right] \vec{g}^i = \frac{\tau}{2} \vec{W}_i, \quad (2.111)$$

donde $\vec{\phi}^i = \{\phi_{i,1}, \phi_{i,2}, \dots, \phi_{i,J}\}^T$ y $R_2^i, \vec{Y}_i, \vec{W}_i$ vienen dados por la fórmulas (2.73) y (2.75). Dado que la matriz $\zeta + \frac{\tau}{2} P_2^i \in \mathbb{R}^{J \times J}$ es común para los tres sistemas, entonces solo es necesario invertirla una vez. En la práctica esto se hace usando el algoritmo de Thomas [79] modificado para resolver los tres sistemas en un mismo procedimiento. Con lo anterior, el costo computacional de resolver los tres sistemas lineales (2.109), (2.110), (2.111) disminuye drásticamente. Vale destacar que el sistema (2.109) tiene una interpretación física directa: *es el equivalente a resolver el problema de advección-difusión unidimensional (usando el esquema de Crank-Nicolson) en la dirección de ϑ (meridional), sobre una franja de ancho $\Delta\lambda$, con frontera en los polos.*

Si denotamos por $\text{CN_AdvDiff}_\vartheta(i)$ al procedimiento que resuelve los tres sistemas lineales (2.109), (2.110) y (2.111), entonces podemos escribir el algoritmo 2, aplicable a la segunda y cuarta

ecuación del esquema (2.52).

Algoritmo 2: Algoritmo para resolver el problema de advección-difusión en la dirección latitudinal (ϑ).

```

1 for  $i = 1, 2, \dots, I$  do
2   — parallel for —
3   Run  $\vec{\phi}^i, \vec{h}^i, \vec{g}^i = \text{CN\_AdvDiff}_{\vartheta}(i)$ 
4    $p_n = \text{UpdateNortPole}(\tau, \vec{\phi}, \vec{h}, \vec{g}, R_2, F_0, F_{J+1})$ 
5    $p_s = \text{UpdateSouthPole}(\tau, \vec{\phi}, \vec{h}, \vec{g}, R_2, R_2, F_0, F_{J+1})$ 
6    $\vec{\phi}_2 = \{p_n, \vec{\phi} - p_s \vec{g} - p_n \vec{h}, p_s\}$ 

```

En el algoritmo 2, los I problemas $\text{CN_AdvDiff}_{\vartheta}(i)$ ($i = 1, \dots, I$) se ejecutan en paralelo, estando en esta parte el mayor costo computacional (líneas 1, 2 y 3). Las líneas 4, 5 y 6 corresponden a las fórmulas (2.106), (2.107) y (2.105) respectivamente. Note además, que el cálculo de p_n y p_s se puede realizar parcialmente dentro del ciclo **for**. Por ejemplo, podemos escribir

$$\vec{X}_{\tau} \cdot \vec{\phi} = \frac{\tau}{2} \sum_{i=1}^I \vec{X}_i \cdot \vec{\phi}^i = \frac{\tau}{2} \left(\vec{X}_1 \cdot \vec{\phi}^1 + \vec{X}_2 \cdot \vec{\phi}^2 \dots + \vec{X}_I \cdot \vec{\phi}^I \right), \quad (2.112)$$

y en cada subproblema $\text{CN_AdvDiff}_{\vartheta}(i)$ obtener la parte $\vec{X}_i \cdot \vec{\phi}^i$ correspondiente. Esta idea se puede extender a los términos $\vec{X}_{\tau} \cdot \vec{g}$, $\vec{X}_{\tau} \cdot \vec{h}$, $\vec{U}_{\tau} \cdot \vec{\phi}$, $\vec{U}_{\tau} \cdot \vec{g}$ y $\vec{U}_{\tau} \cdot \vec{h}$, por lo que en la implementación del algoritmo 2, la mayor parte de las rutinas $\text{UpdateNorthPole}()$ y $\text{UpdateSouthPole}()$ también se ejecutan en paralelo.

Fuentes y decaimiento exponencial

Esta parte corresponde a la tercera ecuación del esquema (2.52). A diferencia de los problemas tratados anteriormente, en este caso no existen derivadas espaciales y por lo tanto, no existe dependencia entre las celdas. El algoritmo 3 resume la idea seguida para resolver este problema.

Algoritmo 3: Algoritmo para resolver el tercer problema del esquema (2.52) (forzamiento y decaimiento exponencial).

```

1 for  $\Delta \in \{0, i, j, J+1\}$  ( $i = 1 \dots I; j = 1 \dots J$ ) do
2   — parallel for —
3    $\phi_{\Delta} = \frac{(1 - \sigma \tau) \phi_{\Delta} + 2 \tau f_{\Delta}}{1 + \sigma \tau}$ 

```

El algoritmo 3 es bastante simple en comparación con los anteriores. El hecho de que no existan derivadas espaciales hace que tengamos $I \times J + 2$ subproblemas (uno por cada celda) muy simples e

independientes entre si. Lo anterior que hace que el proceso de paralelización sea muy sencillo y eficiente.

Finalmente, el esquema (2.52) (y por ende el núcleo del algoritmo CN-DIM-SPLIT) se resume en la siguiente secuencia: **Algoritmo 1** \rightarrow **Algoritmo 2** \rightarrow **Algoritmo 3** \rightarrow **Algoritmo 2** \rightarrow **Algoritmo 1**.

2.2 El algoritmo RK2-TVD-DIM-SPLIT

El algoritmo CN-DIM-SPLIT es la parte fundamental del modelo AdvDiff2D, sin embargo, no es un algoritmo monótono. Esto quiere decir que, para ciertos problemas se pueden producir oscilaciones en la solución que dan lugar a valores negativos no deseados. A este fenómeno se le conoce como *dispersión numérica* y afecta mayormente a los problemas de advección pura o con una fuerte componente advectiva. A continuación se describirá el algoritmo RK2-TVD-DIM-SPLIT, como una alternativa para casos predominantemente advectivos. RK2-TVD-DIM-SPLIT no es más que un esquema TVD (Total Variation Diminishing) [62–64], adaptado al problema de advección-difusión sobre la esfera. Para más detalles sobre los métodos TVD se puede consultar [18, 31].

2.2.1 Discretización

La discretización espacial, tanto para el dominio esférico como para la ecuación (2.1), coincide con el algoritmo CN-DIM-SPLIT (ver sección 2.1.1). Sin embargo, hay una diferencia fundamental entre los dos algoritmos: la forma en que son aproximados los términos $\phi_{i\pm\frac{1}{2},j}$ y $\phi_{i,j\pm\frac{1}{2}}$. Mientras que en CN-DIM-SPLIT se usan las fórmulas (2.12) y (2.13) dando lugar a un esquema lineal; en el caso de RK2-TVD-DIM-SPLIT se usará una estrategia no lineal conocida como TVD (Total Variation Diminishing) [62–64, 64].

La idea detrás de los métodos TVD es aproximar el flujo advectivo (ϕU) en las fronteras de cada celda, de manera que no se produzcan oscilaciones no deseadas en la solución. En la práctica, esto se logra aproximando el valor de ϕ en las fronteras mediante una función no lineal. Para concretar, consideremos la ecuación de advección unidimensional

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\partial (\phi U)}{\partial x}. \quad (2.113)$$

Discretizando mediante volúmenes finitos sobre una rejilla regular con resolución Δx , se llega a

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial t} = - \frac{\phi_{j+\frac{1}{2}} U_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{j-\frac{1}{2}} U_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x}. \quad (2.114)$$

Para aproximar los términos $\phi_{j-\frac{1}{2}}$ y $\phi_{j+\frac{1}{2}}$ se distinguirá entre dos casos:

Caso 1: Velocidad positiva $U_{j\pm\frac{1}{2}} > 0$:

$$\phi_{j-\frac{1}{2}} = \phi_{j-1} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_j - \phi_{j-1}); \quad r = \frac{\phi_{j-1} - \phi_{j-2}}{\phi_j - \phi_{j-1}} \quad (2.115)$$

$$\phi_{j+\frac{1}{2}} = \phi_j + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{j+1} - \phi_j); \quad r = \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\phi_{j+1} - \phi_j}. \quad (2.116)$$

Caso 2: Velocidad negativa $U_{j\pm\frac{1}{2}} < 0$:

$$\phi_{j-\frac{1}{2}} = \phi_j + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{j-1} - \phi_j); \quad r = \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\phi_j - \phi_{j-1}} \quad (2.117)$$

$$\phi_{j+\frac{1}{2}} = \phi_{j+1} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_j - \phi_{j+1}); \quad r = \frac{\phi_{j+2} - \phi_{j+1}}{\phi_{j+1} - \phi_j}. \quad (2.118)$$

La función no lineal $L(r)$ (función limitadora) debe garantizar que las aproximaciones de $\phi_{j-\frac{1}{2}}$ y $\phi_{j+\frac{1}{2}}$ sean de segundo orden y el esquema sea monótono. Algunas funciones limitadoras con estas características se muestran en la tabla 2.1.

Tabla 2.1: Algunas de las funciones limitadoras más usadas en la literatura.

Nombre	$L(r)$
Van Leer [63]	$\frac{r + r }{1 + r}$
Van Albada [83]	$\frac{r + r^2}{1 + r^2}$
Min-Mod [67]	$L(r) = \begin{cases} \min(r, 1) & r > 0 \\ 0 & r \leq 0 \end{cases}$
SUPERBEE [67]	$\max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)]$
Sweby [66]	$\max[0, \min(\beta r, 1), \min(r, \beta)] ; \beta \in [1, 2]$
QUICK [84]	$\max[0, \min\{2r, (3+r)/4, 2\}]$
UMIST [85]	$\max[0, \min\{2r, (1+3r)/4, (3+r)/4, 2\}]$

Si aplicamos la estrategia anterior a nuestro problema de advección-difusión sobre la esfera, obtenemos el siguiente sistema semidiscreto (2.1)

$$\vec{\phi}_t + \sum_{i=1}^2 R_i^{TVD} \vec{\phi} + \sigma \vec{\phi} = \vec{f}, \quad (2.119)$$

donde $R_i^{TVD} = A_i^{TVD} + L_i$ ($i = 1, 2$). Los operadores L_i ($i = 1, 2$) están dados por las fórmulas (2.32) y (2.36). El operador A_i^{TVD} ($i = 1, 2$) difiere de A_i ($i = 1, 2$) (fórmulas (2.31), (2.33), (2.35) y (2.37)) solo en la forma en que se aproximan los términos $\phi_{i,j\pm\frac{1}{2}}$ y $\phi_{i\pm\frac{1}{2},j}$, es decir:

$$(A_1^{TVD}\vec{\phi})_{ij} = \frac{\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{TVD}u_{i+\frac{1}{2},j} - \phi_{i-\frac{1}{2},j}^{TVD}u_{i-\frac{1}{2},j}}{a\Delta\lambda \sin\vartheta_j} \quad (2.120)$$

$$(A_2^{TVD}\vec{\phi})_0 = \frac{8\sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}}\phi_{i,\frac{1}{2}}^{TVD} \quad (\text{polo norte}) \quad (2.121)$$

$$(A_2^{TVD}\vec{\phi})_{ij} = \frac{\phi_{i,j+\frac{1}{2}}^{TVD}v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin\vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \phi_{i,j-\frac{1}{2}}^{TVD}v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin\vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a\Delta\vartheta \sin\vartheta_j} \quad (2.122)$$

$$(A_2^{TVD}\vec{\phi})_{J+1} = -\frac{8\sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}}\phi_{i,J+\frac{1}{2}}^{TVD} \quad (\text{polo sur}) , \quad (2.123)$$

donde

$$\phi_{i-\frac{1}{2},j}^{TVD} = \phi_{i-1,j} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}), \quad r = \frac{\phi_{i-1,j} - \phi_{i-2,j}}{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}, \quad (2.124)$$

$$\phi_{i,j-\frac{1}{2}}^{TVD} = \phi_{i,j-1} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}), \quad r = \frac{\phi_{i,j-1} - \phi_{i,j-2}}{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}, \quad (2.125)$$

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{TVD} = \phi_{i,j} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}), \quad r = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}, \quad (2.126)$$

$$\phi_{i,j+\frac{1}{2}}^{TVD} = \phi_{i,j} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}), \quad r = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}, \quad (2.127)$$

para $u_{i\pm\frac{1}{2},j}, v_{i,j\pm\frac{1}{2}} > 0$, y

$$\phi_{i-\frac{1}{2},j}^{TVD} = \phi_{i,j} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i-1,j} - \phi_{i,j}), \quad r = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}, \quad (2.128)$$

$$\phi_{i,j-\frac{1}{2}}^{TVD} = \phi_{i,j} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i,j-1} - \phi_{i,j}), \quad r = \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}, \quad (2.129)$$

$$\phi_{i+\frac{1}{2},j}^{TVD} = \phi_{i+1,j} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i,j} - \phi_{i+1,j}), \quad r = \frac{\phi_{i+2,j} - \phi_{i+1,j}}{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}, \quad (2.130)$$

$$\phi_{i,j+\frac{1}{2}}^{TVD} = \phi_{i,j+1} + \frac{1}{2}L(r)(\phi_{i,j} - \phi_{i,j+1}), \quad r = \frac{\phi_{i,j+2} - \phi_{i,j+1}}{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}, \quad (2.131)$$

para $u_{i\pm\frac{1}{2},j}, v_{i,j\pm\frac{1}{2}} < 0$. Cuando $u_{i\pm\frac{1}{2},j}, v_{i,j\pm\frac{1}{2}} \equiv 0$ el flujo advectivo es cero.

Las fórmulas de la (2.124) hasta la (2.131) son la extensión de las fórmulas (2.115)-(2.116) y (2.118)-(2.117) a nuestro problema.

Note que el problema semidiscreto (2.119) solo difiere de (2.29) en el término advectivo. Esta diferencia viene determinada por la función limitadora $L(r)$ que se escoja, coincidiendo ambos problemas cuando $L(r) \equiv 1$.

2.2.2 Integración temporal

Para resolver el problema (2.119) se usa el mismo método de separación de variables simétrico de dos ciclos [75, 76] del algoritmo CN-DIM-SPLIT (ver sección 2.1.3). En cada intervalo doble $[t_{n-1}, t_{n+1}]$ con $n = 1, 3, 5, \dots, 2N - 1$, el modelo semidiscreto (2.119) puede ser integrado de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \vec{\phi}_1}{\partial t} + \Lambda_1^n \vec{\phi}_1 = 0; \quad \vec{\phi}_1(t_{n-1}) = \vec{\phi}(t_{n-1}); \quad t \in [t_{n-1}, t_n] \quad (2.132)$$

$$\frac{\partial \vec{\phi}_2}{\partial t} + \Lambda_2^n \vec{\phi}_2 = 0; \quad \vec{\phi}_2(t_{n-1}) = \vec{\phi}_1(t_n); \quad t \in [t_{n-1}, t_n] \quad (2.133)$$

$$\frac{\partial \vec{\phi}_3}{\partial t} + \sigma \vec{\phi}_3 = f; \quad \vec{\phi}_3(t_{n-1}) = \vec{\phi}_2(t_n); \quad t \in [t_{n-1}, t_{n+1}] \quad (2.134)$$

$$\frac{\partial \vec{\phi}_4}{\partial t} + \Lambda_2^n \vec{\phi}_4 = 0; \quad \vec{\phi}_4(t_n) = \vec{\phi}_3(t_{n+1}); \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \quad (2.135)$$

$$\frac{\partial \vec{\phi}_5}{\partial t} + \Lambda_1^n \vec{\phi}_5 = 0; \quad \vec{\phi}_5(t_n) = \vec{\phi}_4(t_{n+1}); \quad t \in [t_n, t_{n+1}] \quad (2.136)$$

$$\vec{\phi}(t_{n+1}) = \vec{\phi}_5(t_{n+1}),$$

donde $\Lambda_k^n = A_k^{TVD}(t_n) + L_k(t_n)$ ($k = 1, 2$).

Para integrar cada una de las ecuaciones del sistema anterior, se usa el esquema de Runge-Kutta de segundo orden (RK2) [82] que se describe a continuación.

Dada la ecuación diferencial

$$y_t = F(t, y(t)), \quad y(0) = y_0, \quad t \in [0, T], \quad (2.137)$$

el esquema RK2 tiene la siguiente forma:

$$\gamma = y_n + \frac{1}{2} \Delta t F(t_n, y_n), \quad (2.138)$$

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t F\left(t_n + \frac{1}{2} \Delta t, \gamma\right), \quad (2.139)$$

donde $y_n \approx y(t_n)$, Δt es el paso temporal y $t_n = n\Delta t$.

El esquema RK2 es explícito, por lo que a diferencia de Crank-Nicolson, es un esquema condicionalmente estable. La estabilidad condicional de RK2 es una seria limitante debido a que usamos una rejilla regular esférica. A continuación se describe como resolver cada uno de los subproblemas (2.132)-(2.136), usando el esquema RK2.

Problema en la dirección de λ

Usando el esquema RK2 ((2.138)-(2.139)) y el operador $\Lambda_1^n = A_1^{TVD}(t_n) + L_1(t_n)$ (ecuaciones (2.32) y (2.120)) se obtienen el siguiente esquema de integración para el problema en la dirección de λ (subproblemas (2.132) y (2.136)):

$$\gamma_{ij} = \varphi_{ij} - \frac{\tau}{2} \left\{ \frac{\varphi_{i+\frac{1}{2},j}^{TVD} u_{i+\frac{1}{2},j} - \varphi_{i-\frac{1}{2},j}^{TVD} u_{i-\frac{1}{2},j}}{a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} - \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j}(\varphi_{i+1,j} - \varphi_{ij}) - \mu_{i-\frac{1}{2},j}(\varphi_{ij} - \varphi_{i-1,j})}{a^2(\Delta\lambda)^2 \sin^2 \vartheta_j} \right\} \quad (2.140)$$

$$\psi_{ij} = \varphi_{ij} - \tau \left\{ \frac{\gamma_{i+\frac{1}{2},j}^{TVD} u_{i+\frac{1}{2},j} - \gamma_{i-\frac{1}{2},j}^{TVD} u_{i-\frac{1}{2},j}}{a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} - \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j}(\gamma_{i+1,j} - \gamma_{ij}) - \mu_{i-\frac{1}{2},j}(\gamma_{ij} - \gamma_{i-1,j})}{a^2(\Delta\lambda)^2 \sin^2 \vartheta_j} \right\}, \quad (2.141)$$

donde $\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_1(t_{n-1})$, $\vec{\psi} = \vec{\varphi}_1(t_n)$ para el problema (2.132) y $\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_5(t_n)$, $\vec{\psi} = \vec{\varphi}_5(t_{n+1})$ para el problema (2.136).

Las fórmulas (2.140) y (2.141) pueden ser implementadas en paralelo muy fácilmente. Sean $\text{TVD_AdvDiff_I}_\lambda(j)$ y $\text{TVD_AdvDiff_II}_\lambda(j)$ las rutinas que implementan las fórmulas (2.140) y (2.141) respectivamente, para $i = 1, 2, \dots, I$ y $j \equiv \text{Const.}$. Entonces podemos escribir el algoritmo 4 para resolver el problema en la dirección de λ .

Problema en la dirección de ϑ

De la misma forma que en el caso anterior, podemos usar las fórmulas (2.138)-(2.139) (RK2) y el operador $\Lambda_1^n = A_1^{TVD}(t_n) + L_1(t_n)$ (ecuaciones (2.36), (2.34), (2.38) y (2.122)) para obtener el siguiente esquema para el problema en la dirección de ϑ (subproblemas (2.133) y (2.135)).

Algoritmo 4: Algoritmo para resolver el problema de advección-difusión en la dirección longitudinal (λ) (RK2-TVD-DIM-SPLIT).

```

1 for  $j = 1, 2, \dots, J$  do
2   — parallel for —
3   Run  $\vec{\gamma}^j = \text{TVD\_AdvDiff\_I}_\lambda(j)$ 
4   Run  $\vec{\psi}^j = \text{TVD\_AdvDiff\_II}_\lambda(j)$ 

```

$$\gamma_0 = \varphi_0 - \frac{\tau}{2} \left\{ \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}} \phi_{i,\frac{1}{2}}^{TVD} - \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} (\phi_{i,1} - \phi_0) \right\} \quad (2.142)$$

$$\gamma_{J+1} = \varphi_{J+1} + \frac{\tau}{2} \left\{ \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}} \phi_{i,J+\frac{1}{2}}^{TVD} - \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,J+\frac{1}{2}} (\phi_{i,J} - \phi_{J+1}) \right\} \quad (2.143)$$

$$\gamma_{ij} = \varphi_{ij} - \frac{\tau}{2} \left\{ \frac{\varphi_{i,j+\frac{1}{2}}^{TVD} v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \varphi_{i,j-\frac{1}{2}}^{TVD} v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} - \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j} (\varphi_{i,j+1} - \varphi_{ij}) \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \mu_{i-\frac{1}{2},j} (\varphi_{ij} - \varphi_{i,j-1}) \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a^2(\Delta\vartheta)^2 \sin \vartheta_j} \right\}, \quad (2.144)$$

$$\psi_0 = \varphi_0 - \tau \left\{ \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,\frac{1}{2}} \gamma_{i,\frac{1}{2}}^{TVD} - \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,\frac{1}{2}} (\gamma_{i,1} - \gamma_0) \right\} \quad (2.145)$$

$$\psi_{J+1} = \varphi_{J+1} + \tau \left\{ \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia(\Delta\vartheta)^2} \sum_{i=1}^I v_{i,J+\frac{1}{2}} \gamma_{i,J+\frac{1}{2}}^{TVD} - \frac{8 \sin(\Delta\vartheta/2)}{Ia^2(\Delta\vartheta)^3} \sum_{i=1}^I \mu_{i,J+\frac{1}{2}} (\gamma_{i,J} - \gamma_{J+1}) \right\} \quad (2.146)$$

$$\psi_{ij} = \varphi_{ij} - \tau \left\{ \frac{\gamma_{i,j+\frac{1}{2}}^{TVD} v_{i,j+\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \gamma_{i,j-\frac{1}{2}}^{TVD} v_{i,j-\frac{1}{2}} \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} - \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j} (\gamma_{i,j+1} - \varphi_{ij}) \sin \vartheta_{j+\frac{1}{2}} - \mu_{i-\frac{1}{2},j} (\gamma_{ij} - \gamma_{i,j-1}) \sin \vartheta_{j-\frac{1}{2}}}{a^2(\Delta\vartheta)^2 \sin \vartheta_j} \right\}, \quad (2.147)$$

donde $\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_2(t_{n-1})$, $\vec{\psi} = \vec{\varphi}_2(t_n)$ para el problema (2.133) y $\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_4(t_n)$, $\vec{\psi} = \vec{\varphi}_4(t_{n+1})$ para el problema (2.135).

La implementación de las fórmulas anteriores se muestra en el algoritmo 5, donde $\vec{\gamma}^i = \{\gamma_{i,1}, \gamma_{i,2}, \dots, \gamma_{i,J}\}$ y $\vec{\psi}^i = \{\psi_{i,1}, \psi_{i,2}, \dots, \psi_{i,J}\}$. Las rutinas `TVD_UpdateNortPoleI()`,

TVD_UpdateSouthPoleI(), TVD_UpdateNortPoleII() y TVD_UpdateSouthPoleII() representan las fórmulas (2.142), (2.143), (2.145) y (2.146) respectivamente; mientras que TVD_AdvDiff_I ϑ (i) y TVD_AdvDiff_II ϑ (i) corresponden a las fórmulas (2.144) y (2.147) para $i \equiv \text{Const}$ y $j = 1, 2, \dots, J$.

Algoritmo 5: Algoritmo para resolver el problema de advección-difusión en la dirección latitudinal (ϑ) (RK2-TVD-DIM-SPLIT).

```

1  $\gamma_0 = \text{TVD\_UpdateNortPoleI}()$ 
2  $\gamma_{J+1} = \text{TVD\_UpdateSouthPoleI}()$ 
3 for  $i = 1, 2, \dots, I$  do
4   — parallel for —
5   Run  $\vec{\gamma}^i = \text{TVD\_AdvDiff\_I}_{\vartheta}(i)$ 
6   Run  $\vec{\psi}^i = \text{TVD\_AdvDiff\_II}_{\vartheta}(i)$ 
7  $\psi_0 = \text{TVD\_UpdateNortPoleII}()$ 
8  $\psi_{J+1} = \text{TVD\_UpdateSouthPoleII}()$ 

```

Por claridad, las rutinas TVD_UpdateNortPoleII() y TVD_UpdateSouthPoleII() no se incluyen en el ciclo **for**, sin embargo, en la implementación práctica del algoritmo 5 también es posible paralelizar estos cálculos. La idea es la misma que se explicó en el caso del algoritmo 2 (ver sección 2.1.3).

Fuentes y decaimiento exponencial

Aplicando el esquema (2.138)-(2.139) al problema (2.134), se obtiene de manera directa el algoritmo 6. Aquí se considera que $\vec{\varphi} = \vec{\varphi}_3(t_{n-1})$ y $\vec{\psi} = \vec{\varphi}_3(t_{n+1})$.

Algoritmo 6: Algoritmo para resolver el subproblema (2.134) (forzamiento y decaimiento exponencial).

```

1 for  $\Delta \in \{0, ij, I \times J + 2\}$  ( $i = 1 \dots I; j = 1 \dots J$ ) do
2   — parallel for —
3    $\gamma_{\Delta} = \varphi_{\Delta} + \tau(f_{\Delta} - \sigma \varphi_{\Delta})$ 
4    $\psi_{\Delta} = \varphi_{\Delta} + 2\tau(f_{\Delta} - \sigma \gamma_{\Delta})$ 

```

Nótese que el algoritmo anterior y el algoritmo 3, perteneciente al esquema CN-DIM-SPLIT, pueden ser intercambiados al ser ambos de segundo orden de aproximación. Sin embargo, el algoritmo 6 a diferencia del 3, puede ser usado para casos de fuentes no lineales. Para esto, basta con reescribir las líneas 3 y 4 del algoritmo como:

$$\gamma_{\Delta} = \varphi_{\Delta} + \tau[f_{\Delta}(\varphi_{\Delta}) - \sigma \varphi_{\Delta}] \quad (2.148)$$

$$\psi_{\Delta} = \varphi_{\Delta} + 2\tau[f_{\Delta}(\gamma_{\Delta}) - \sigma \gamma_{\Delta}] . \quad (2.149)$$

Lo anterior sugiere que podemos considerar casos de forzamiento no lineal manteniendo segundo de orden aproximación. El modelo AdvDiff2D permite escoger entre los algoritmos 3 o 6, tanto en el esquema CN-DIM-SPLIT como en RK2-TVD-DIM-SPLIT, lo que amplía las posibilidades del modelo más allá de casos estrictamente lineales.

2.2.3 Estabilización del esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT

Como se mencionó anteriormente, el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT no es incondicionalmente estable. La condición de estabilidad depende de cada uno de los subproblemas unidimensionales (2.132), (2.133), (2.134), (2.135) y (2.136). En concreto, para el problema en la dirección de λ (subproblemas (2.132) y (2.134)) tenemos la condición de estabilidad

$$CFL_\lambda = \max_{ij} \left\{ \frac{\tau |u_{i\pm\frac{1}{2},j}|}{a\Delta\lambda \sin \vartheta_j} \right\} \leq 1, \quad D_\lambda = \max_{ij} \left\{ \frac{\tau |\mu_{i\pm\frac{1}{2},j}|}{(a\Delta\lambda \sin \vartheta_j)^2} \right\} \leq \frac{1}{2}, \quad (2.150)$$

y para el problema en la dirección de ϑ (subproblemas (2.133) y (2.135)) tenemos

$$CFL_\vartheta = \max_{ij} \left\{ \frac{\tau |v_{i,j\pm\frac{1}{2}}|}{a\Delta\vartheta} \right\} \leq 1, \quad D_\vartheta = \max_{ij} \left\{ \frac{\tau |\mu_{i,j\pm\frac{1}{2}}|}{(a\Delta\vartheta)^2} \right\} \leq \frac{1}{2}. \quad (2.151)$$

Las condiciones anteriores son válidas únicamente para los problemas de advección o difusión por separado. Para el problema combinado de advección-difusión, la estabilidad de RK2-TVD-DIM-SPLIT depende de que se cumplan que:

$$CFL + 2D \leq 1, \quad (2.152)$$

donde CFL y D se sustituyen por CFL_λ y D_λ para el problema longitudinal, y por CFL_ϑ y D_ϑ para el problema meridional. Las fórmulas (2.150), (2.151) y (2.152) se deducen a partir del análisis del correspondiente problema de advección-difusión unidimensional en coordenadas rectangulares (ver [31, 86]).

En el caso de (2.134) (forzamiento y decaimiento exponencial), la condición de estabilidad se reduce a $\tau < \frac{1}{\sigma}$, a lo que se llega directamente a partir de las propiedades del método RK2.

Note que la condición (2.150) para el problema en la dirección de λ es particularmente restrictiva. El término $\sin \vartheta_j$ que aparece en el denominador de las fórmulas (2.150) tiende a cero para valores de ϑ_j cercanos a 0 (Polo Norte) o a π (Polo Sur). Esto quiere decir que para las celdas cercanas a los polos es muy difícil cumplir con la condición de estabilidad. Lo descrito anteriormente es un problema bien conocido en las ciencias atmosféricas y la solución más común es usar rejillas esféricas reducidas [38, 69] o alguna otra variante de rejilla uniforme o

cuasiuniforme [74] (ver sección 1.3.6). Sin embargo, queremos mantener completa compatibilidad con el algoritmo CN-DIM-SPLIT y por lo tanto, mantener la misma rejilla regular esférica descrita la sección 2.1.1. La estrategia para lograr ese objetivo se describe a continuación.

Denotemos como $\text{TVD_AdvDiff}_{R(\Delta\lambda)}(j)$ al problema de advección-difusión unidimensional en la dirección de λ , sobre la rejilla $R(\Delta\lambda)$ de resolución $\Delta\lambda$ y colatitud constante ϑ_j (líneas 3 y 4 del algoritmo 4). La idea es bastante simple: para colatitudes cercanas a los polos podemos remplazar $\text{TVD_AdvDiff}_{R(\Delta\lambda)}(j)$ por $\text{TVD_AdvDiff}_{R(k\Delta\lambda)}(j)$ con $k > 1$, sin afectar significativamente la exactitud, pero relajando la condición de estabilidad (debido a que $k\Delta\lambda > \Delta\lambda$). Note que a medida que nos acercamos a los polos aumenta la resolución espacial en la dirección de λ , por lo tanto, tenemos un *exceso de celdas de las que podemos prescindir*.

Remplazar el problema $\text{TVD_AdvDiff}_{R(\Delta\lambda)}(j)$ por $\text{TVD_AdvDiff}_{R(k\Delta\lambda)}(j)$, implica interpolar desde la rejilla original $R(\Delta\lambda)$ hacia la de menor resolución $R(k\Delta\lambda)$, y luego volver a interpolar hacia la rejilla $R(\Delta\lambda)$. Evidentemente, estos pasos adicionales representan un aumento en el costo computacional. Sin embargo, si restringimos el valor de k a solo números enteros ($k \in \mathbb{Z}$) que dividan de manera exacta a I , entonces el proceso de interpolación es extremadamente sencillo y eficiente. Esto es, a cada celda en la rejilla $R(k\Delta\lambda)$ se le asigna el promedio de k celdas consecutivas en $R(\Delta\lambda)$; mientras que para interpolar hacia la rejilla original (de $R(k\Delta\lambda)$ hacia $R(\Delta\lambda)$) solo es necesario copiar los valores. En la figura 2.4 se ilustra este proceso para el caso hipotético de $I = 9$ y $k = 3$.

Con este sencillo procedimiento es posible usar el algoritmo RK2-TVD-DIM-SPLIT sin la necesidad de reducir extremadamente el valor de τ para cumplir con la condición de estabilidad (2.150). Evidentemente, solo es necesario aplicar esta estrategia para las colatitudes más cercanas a los polos. En concreto, el problema $\text{TVD_AdvDiff}_{R(\Delta\lambda)}(j)$ solo se remplazará por $\text{TVD_AdvDiff}_{R(k\Delta\lambda)}(j)$ cuando se tenga que $\sin \vartheta_j < \frac{1}{2}$, lo que ocurre para $\vartheta_j < \pi/6$ (por encima de los 60° Norte) y $\vartheta_j > 5\pi/6$ (por abajo de los 60° Sur).

2.3 El modelo AdvDiff2D

El modelo AdvDiff2D consiste en un software que incorpora la implementación de los algoritmos CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT, además de características adicionales. De manera general, AdvDiff2D consiste en:

- Programa principal para resolver el problema de advección-difusión sobre una esfera, con las siguientes características:
 - Completamente programado en Fortran 90, sin dependencia de bibliotecas externas.

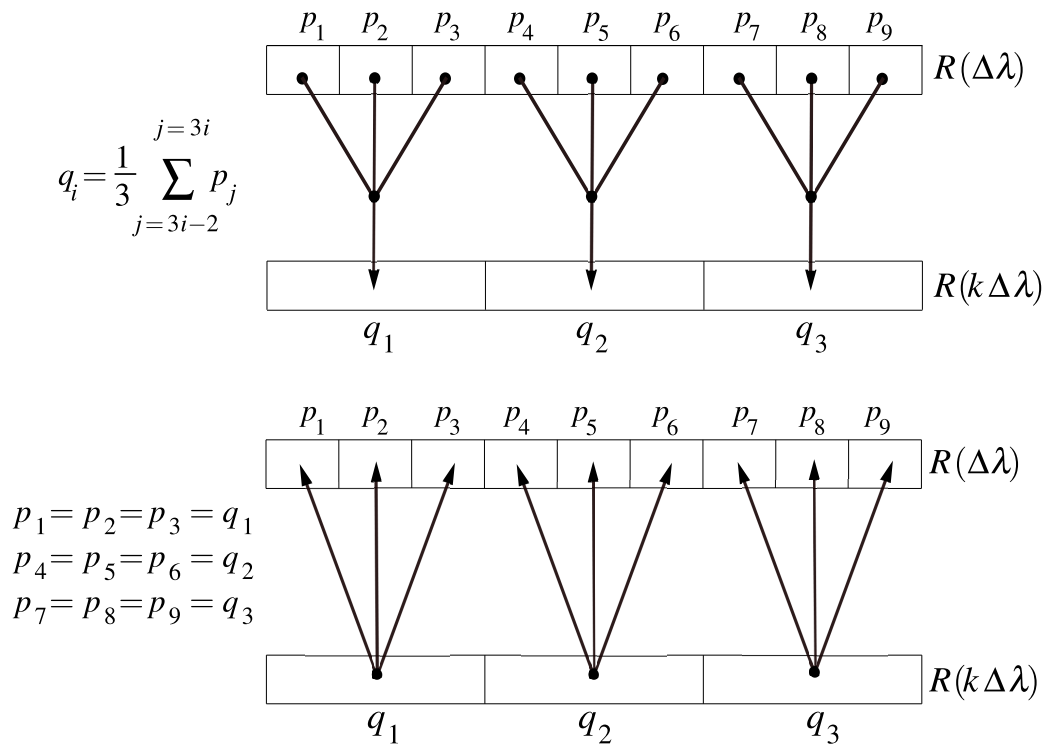


Fig. 2.4: Representación esquemática del proceso de interpolación entre las rejillas $R(\Delta\lambda)$ y $R(k\Delta\lambda)$.

- Configuración basada en ficheros *namelist*. Entrada y salida de datos usando ficheros de texto y binarios.
- Posibilidad de usar cálculos en paralelo usando OpenMP [19].
- Pequeños programas (scripts) de Python (se usan las bibliotecas de código abierto SciPy [87] (cálculo científico), Matplotlib [88] (visualización de datos) y Cartopy [89] (visualización de datos sobre mapas) para facilitar tareas comunes como:
 - Interpolar datos desde y hacia la rejilla de AdvDiff2D.
 - Lectura y visualización de las salidas del modelo.

El modelo AdvDiff2D puede ser ejecutado en una máquina personal sin mayores dificultades. La paralelización de los cálculos se lleva a cabo mediante OpenMP, es decir, usando un esquema de memoria compartida. OpenMP es un estándar bastante extendido y facilita enormemente la implementación de cálculos en paralelo y el aprovechamiento del enfoque multiproceso de las computadoras modernas [19].

En el próximo capítulo se muestra el desempeño del modelo AdvDiff2D resolviendo una serie de problemas con varios niveles de complejidad, desde problemas de advección-difusión lineal hasta

problemas no lineales. Por cada experimento numérico se incluirán las instrucciones para reproducirlo, usando AdvDiff2D.

Capítulo 3

Resultados

En este capítulo se evalúa el desempeño del modelo AdvDiff2D mediante la realización de diferentes experimentos numéricos. Estos incluyen desde problemas lineales de advección y difusión puras, hasta problemas más complejos de difusión no lineal. Con esto se pretende demostrar las capacidades del modelo AdvDiff2D para resolver casos de interés práctico. Todos los problemas mostrados a continuación, excepto los relacionados con el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT, han sido publicados en revistas arbitradas [2, 90, 91] o bien presentados en los congresos ECMI-2018 (Budapest), UGM-2018 (Puerto Vallarta), UGM-2019 (Puerto Vallarta) y IC-MSQUARE-2021 (Grecia).

Cada uno de los experimentos discutidos en este capítulo será identificado por una abreviatura (ej.: `exp_adv01`). Con esto es posible encontrar las instrucciones necesarias para reproducir el experimento correspondiente. Por ejemplo, las instrucciones correspondientes a `exp_adv01` se encuentran en la carpeta `experiments/exp_adv01`, ubicada dentro del código fuente de AdvDiff2D. El modelo AdvDiff2D es capaz de ejecutarse en cualquier máquina personal moderna, por lo que no se necesita requerimientos especiales.

3.1 El modelo AdvDiff2D. Paralelización de los cálculos

A continuación se hace una breve descripción de la implementación de AdvDiff2D. Esto facilitará la reproducción de los experimentos mostrados en este capítulo, así como verificar la implementación de los algoritmos mostrados en el capítulo 2. Finalmente, se demuestra la capacidad del modelo para realizar cálculos en paralelo.

Todo el código fuente del modelo AdvDiff2D se encuentra dentro de la carpeta `AdvDiff2D/src`. Los principales ficheros son los siguientes:

- `advdiff_global_data.f90`: contiene las variables de uso global (ej.: los vectores de $\vec{\phi}$ y \vec{f}).

- `advdiff_cn_dim_split.f90`: contiene las rutinas `solve_lon_problem_cn()` y `solve_lat_problem_cn()` correspondientes a los algoritmos 1 y 2 respectivamente (ver capítulo 2, sección 2.1).
- `advdiff_rk2_tvd_dim_split.f90`: contiene las rutinas `solve_lon_problem_rk2_tvd()` y `solve_lat_problem_rk2_tvd()` correspondientes a los algoritmos 4 y 5 respectivamente (ver capítulo 2, sección 2.2).
- `advdiff_solver.f90`: implementación de la integración temporal (esquemas CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT).
- `advdiff_main.f90`: fichero principal. Aquí se leen los datos de entrada y se controla la ejecución del modelo.
- `advdiff_user.f90`: contiene las rutinas encargadas de actualizar los valores de $f(\mathbf{x}, t)$, $\mu(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ y $\sigma(\mathbf{x}, t)$ para cada paso temporal (en el punto medio de cada intervalo $[t_{n-1}, t_{n+1}]$). En general, esta es la única parte del código que necesita ser modificada para ciertos problemas.

No es objetivo de este trabajo discutir los detalles técnicos de la implementación del modelo AdvDiff2D. Sin embargo, la información anterior sirve para tener una idea general de cómo está estructurado el modelo. Por otra parte, algunas ideas que se discutieron en el capítulo anterior son más fáciles de entender (o pueden ser complementadas) revisando directamente el código (por ejemplo, la paralelización de los cálculos o la estabilización del esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT).

Paralelización de los cálculos

La capacidad de hacer cálculos en paralelo es de vital importancia para cualquier software moderno y en particular, para los enfocados en la modelación numérica. En este experimento se pone a prueba la capacidad de AdvDiff2D de paralelizar los cálculos de manera eficiente.

La figura 3.1 muestra los tiempos de ejecución obtenidos con AdvDiff2D, usando diferente cantidad de procesadores. En cada caso se consideró un problema de advección-difusión con resolución espacial de 0.25° y se completaron un total de 10^3 iteraciones.

Como se aprecia en la figura 3.1, el esquema CN-DIM-SPLIT es ligeramente más rápido que RK2-TVD-DIM-SPLIT, aunque esta diferencia disminuye a medida que aumenta el número de procesos. Como es de esperar, para el caso de un solo procesador (cálculos sin paralelizar) se obtiene el mayor tiempo de ejecución; mientras que para el mayor número de procesadores (6 en este caso) este tiempo disminuye aproximadamente 5 veces (6 veces es el límite teórico). Lo anterior demuestra que la implementación de los algoritmos 1, 2, 3 (correspondientes a CN-DIM-SPLIT) y 4, 5, 6 (correspondientes a RK2-TVD-DIM-SPLIT) funciona de manera correcta.

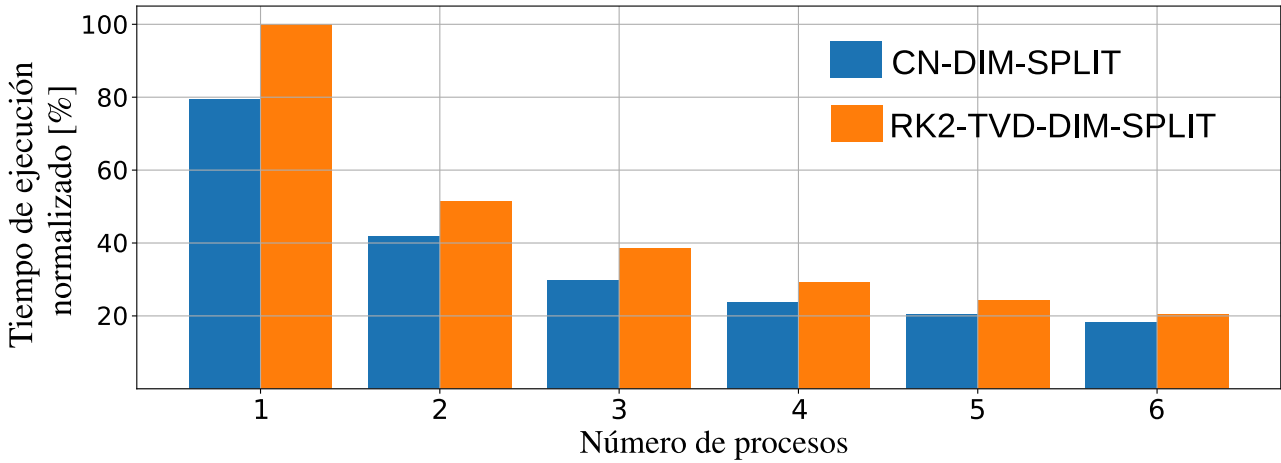


Fig. 3.1: Tiempo de ejecución contra número de procesos. El tiempo de ejecución ha sido normalizado dividiendo entre el mayor valor.

Los resultados mostrados en la figura 3.1, pueden variar en dependencia del hardware que se use para realizar el experimento. En este caso se empleó un procesador Intel Core i5 de novena generación, con un total de 6 núcleos (procesadores). Con esta configuración, el mayor tiempo de ejecución fue de 141.36 segundos (RK2-TVD-DIM-SPLIT con un procesador) y el menor tiempo de 25.841 segundos (CN-DIM-SPLIT con 6 procesadores).

3.2 Experimentos numéricos

3.2.1 Advección pura

En los siguientes experimentos se resuelve numéricamente el problema de advección lineal pura

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = 0, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}), \quad (3.1)$$

donde $\mathbf{U} = \{u, v\}$ se considera no divergente ($\text{div} \mathbf{U} \equiv 0$). Desde el punto de vista numérico, este problema es particularmente difícil por la ocurrencia de dispersión numérica, sobre todo cuando existen grandes gradientes o discontinuidades en la solución [18, 31, 69, 92].

Como se mencionó en el capítulo anterior, para este tipo de problemas es más recomendable usar el esquema secundario RK2-TVD-DIM-SPLIT, debido a que es un esquema monótono (ver cap. 2 sec. 2.2). Sin embargo, el esquema CN-DIM-SPLIT, aún siendo no monótono, muestra muy buenos resultados en los casos de soluciones suaves.

Definiremos el error relativo de la solución numérica $\vec{\phi}$ como

$$ER(\vec{\phi}) = 100 \frac{L_2(\vec{\phi} - \vec{\phi}^*)}{L_2(\vec{\phi}^*)}, \quad (3.2)$$

donde $\vec{\phi}^*$ es la solución analítica y $L_2(\vec{\phi}) = \langle \vec{\phi}, \vec{\phi} \rangle^{1/2}$ (norma l_2). El producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$ viene dado por la ecuación (2.39), definida en el capítulo anterior.

En lo que sigue, cuando se haga referencia al esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT, se debe entender que se usará la función limitadora SUPERBEE [67] (ver sección 2.2.1, tabla 2.1). La selección de SUPERBEE se debe a que mostró ser menos difusiva que otras funciones de la tabla 2.1 (ver anexo A.2). No obstante, no existe una forma clara de escoger cuál es la función limitadora más conveniente para un problema en particular [31], lo que en muchos casos deberá hacerse por *prueba y error* [18, 31]. El modelo AdvDiff2D permite ser compilado con cualquiera de las funciones de la tabla 2.1.

Advección en la dirección longitudinal (exp_adv01)

Consideremos el campo de viento (ver Fig. 3.2)

$$\mathbf{U} = \{U_0(\sin \vartheta \cos \alpha - \cos \vartheta \cos \lambda \sin \alpha), -U_0 \sin \lambda \sin \alpha\}. \quad (3.3)$$

La ecuación anterior representa el viento resultado de la rotación de un cuerpo sólido. El eje de rotación forma un ángulo α con el eje z . Para este caso tenemos $\alpha = 0$, es decir, el eje de rotación coincide con el eje z . El término U_0 se escoge de manera que una rotación completa demore 5 unidades de tiempo para un radio unitario ($a = 1$), esto es, $U_0 = \frac{2\pi}{5}$. Este experimento corresponde al presentado en [93] pero con algunas variaciones.

La condición inicial (ver Fig.3.3) viene dada por

$$\phi^0(\mathbf{x}) = \exp\{-50d^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})\}, \quad (3.4)$$

donde $\mathbf{x}_0 = (\lambda_0, \vartheta_0) = (90^\circ, 0.0^\circ)$ y $d(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ representa la distancia Euclideana entre los puntos \mathbf{p}_1 and \mathbf{p}_2 .

La tabla 3.1 muestra los errores obtenidos en tres experimentos, usando resoluciones espaciales de 1° , 0.5° y 0.25° . En cada caso, el paso temporal τ se escogió manteniendo un valor de CFL constante de 0.36. Como se aprecia, con el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT se obtienen mejores resultados para 1° y 0.5° . Sin embargo, para la resolución de 0.25° el esquema CN-DIM-SPLIT es mejor. Para resoluciones bajas, el esquema CN-DIM-SPLIT produce mucha dispersión numérica (debido a su naturaleza no monótona [1]); sin embargo, esta dispersión disminuye con el aumento de la resolución espacial y temporal [1]. En concreto, para la resolución más alta ($\Delta\lambda = \Delta\vartheta = 0.25^\circ$), la dispersión es del orden de 10^{-15} .

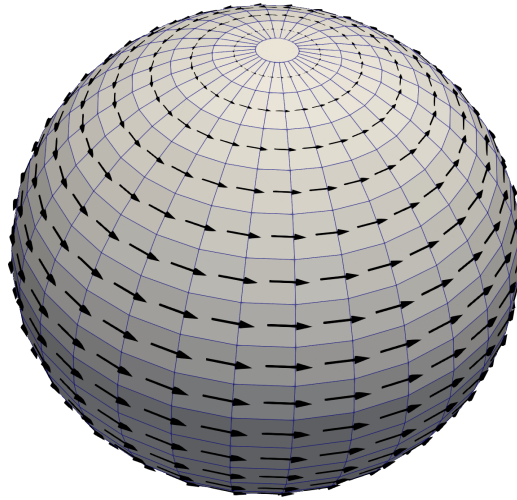


Fig. 3.2: Campo de viento (3.3) para $\alpha = 0$.

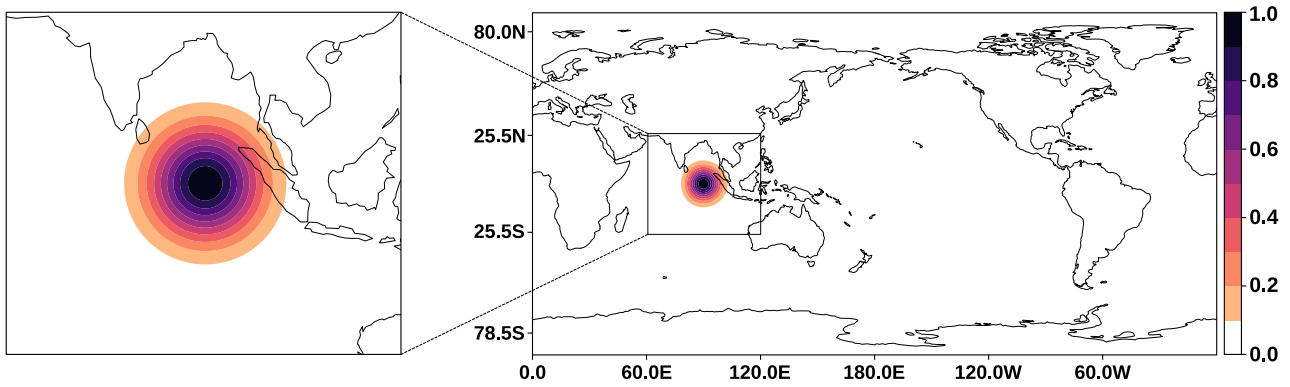


Fig. 3.3: Condición inicial (exp_adv01).

Tabla 3.1: Errores relativos para diferentes resoluciones (exp_adv01).

	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$
CN-DIM-SPLIT	36.5%	11.3%	2.89%
RK2-TVD-DIM-SPLIT	12.1%	6.36%	4.12%

En las figuras 3.4 y 3.5 se muestran las soluciones obtenidas con los esquemas CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT respectivamente. En el caso del CN-DIM-SPLIT, la solución muestra una deformación notable en la dirección del flujo (Fig. 3.4ab), en especial para la resolución de 1° . Esta deformación disminuye hasta prácticamente desaparecer para la resolución de 0.25° (Fig. 3.4c). En la parte inferior de la Fig. 3.4, se aprecia que las oscilaciones no deseadas de la solución numérica disminuyen al aumentar la resolución, lo que es un resultado esperado.

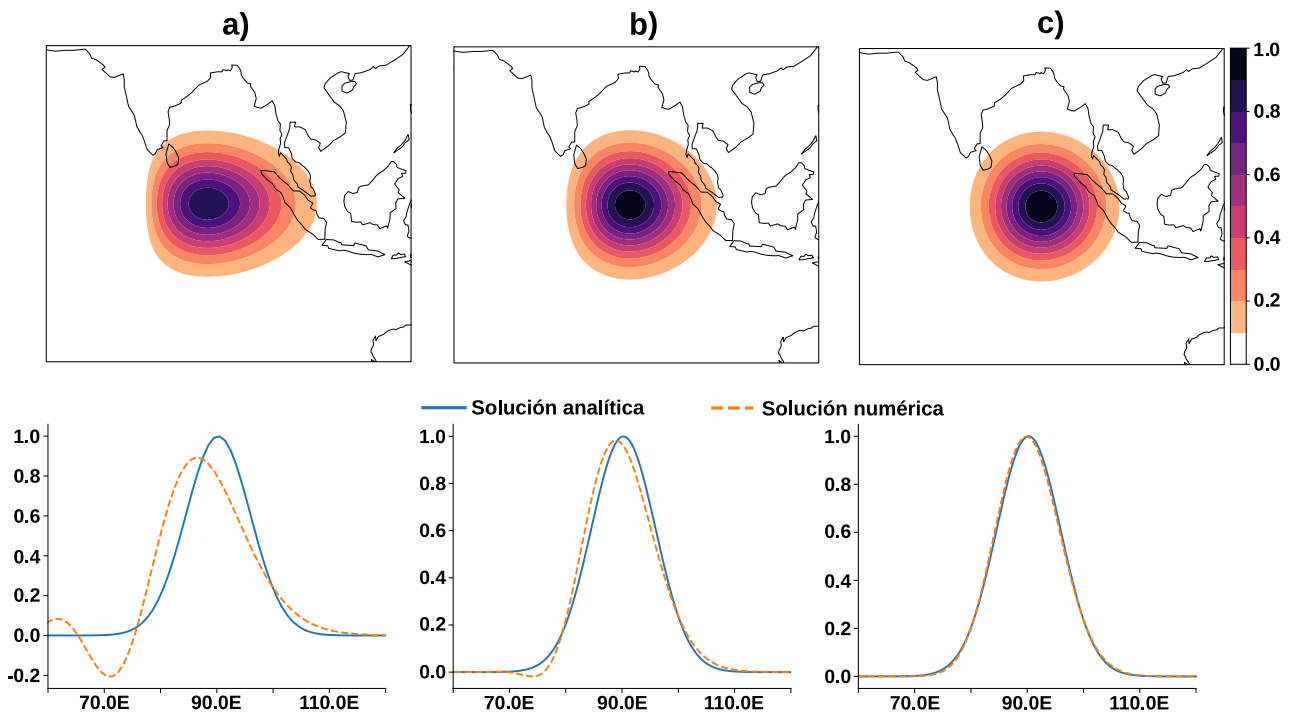


Fig. 3.4: Soluciones correspondientes al esquema CN-DIM-SPLIT para $t = 5$; a) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$; b) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$; c) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$. Abajo se muestra un corte longitudinal para $\vartheta = 90^\circ$.

Como se aprecia en la parte inferior de la Fig. 3.5, el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT no produce valores negativos, lo que también es un resultado esperado al ser un esquema monótono. A modo de comparación, el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT tiende a deformar más la forma inicial y dar una solución menos suave que CN-DIM-SPLIT. No obstante, es necesario aclarar que esto depende directamente de la función limitadora que se usó (SUPERBEE en este caso).

Advección sobre los polos (exp_avd02)

Este experimento es análogo al anterior, es decir, mantenemos la misma condición inicial y los mismos valores de resolución espacial y temporal. La principal diferencia es que ahora se asume $\alpha = \pi/2$ en la ecuación (3.3), dando lugar a un caso de advección sobre los polos (ver Fig. 3.6). El valor máximo CFL para cada resolución se muestra en la tabla 3.2. Como se aprecia, los valores de CFL son especialmente grandes para el esquema CN-DIM-SPLIT, debido al uso de una rejilla regular esférica. En el caso del esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT, los valores de CFL se mantienen menores a la unidad (condición de estabilidad) gracias a la estrategia que se describió en la sección 2.2.3 del capítulo anterior. La idea de este experimento es evaluar la influencia de las celdas polares en la exactitud de la solución.

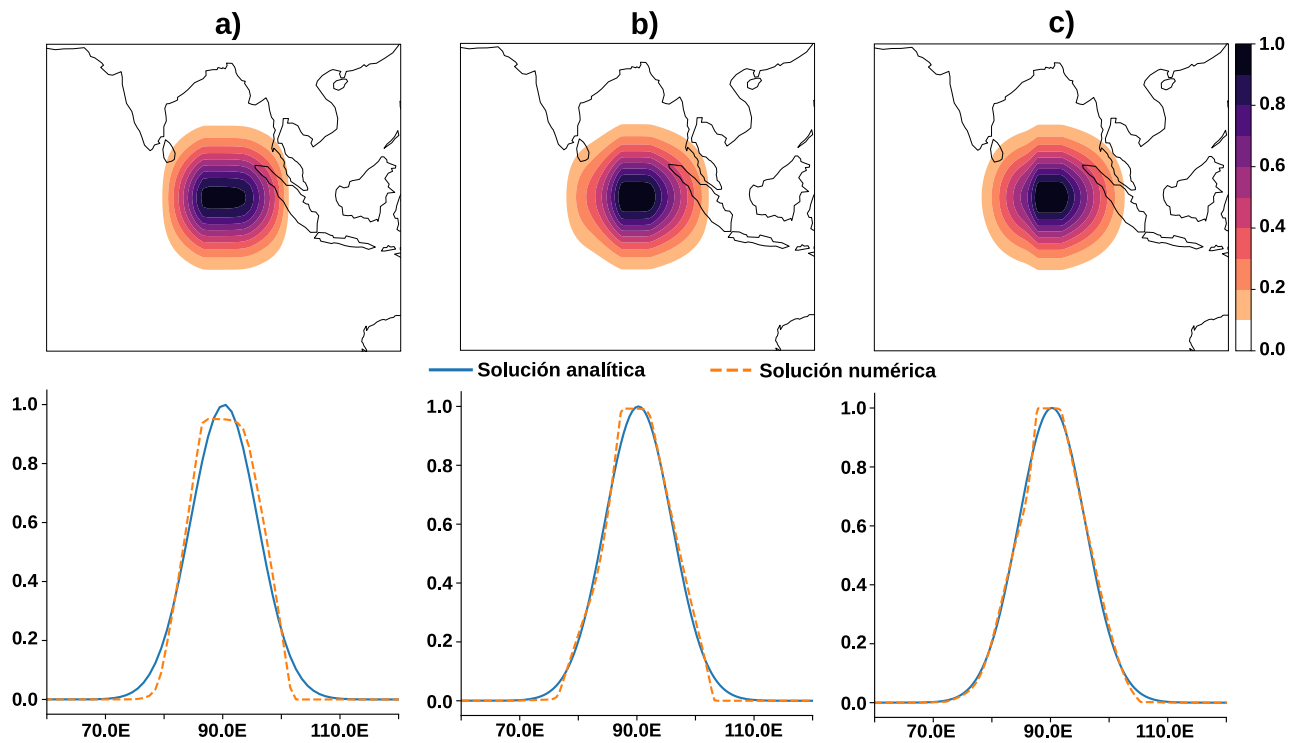


Fig. 3.5: Soluciones correspondientes al esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT para $t = 5$; a) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$; b) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$; c) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$. Abajo se muestra un corte longitudinal para $\vartheta = 90^\circ$.

Tabla 3.2: Valor máximo CFL para las diferentes resoluciones.

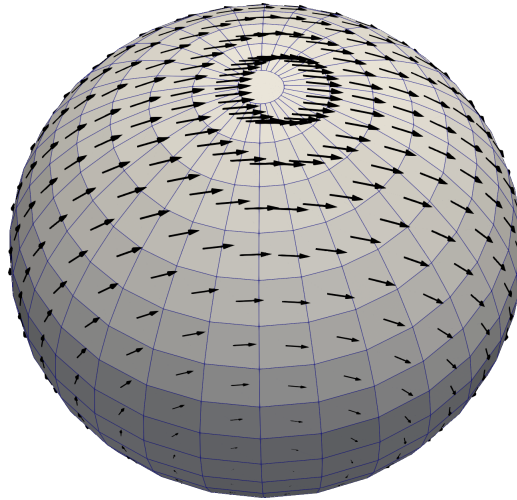
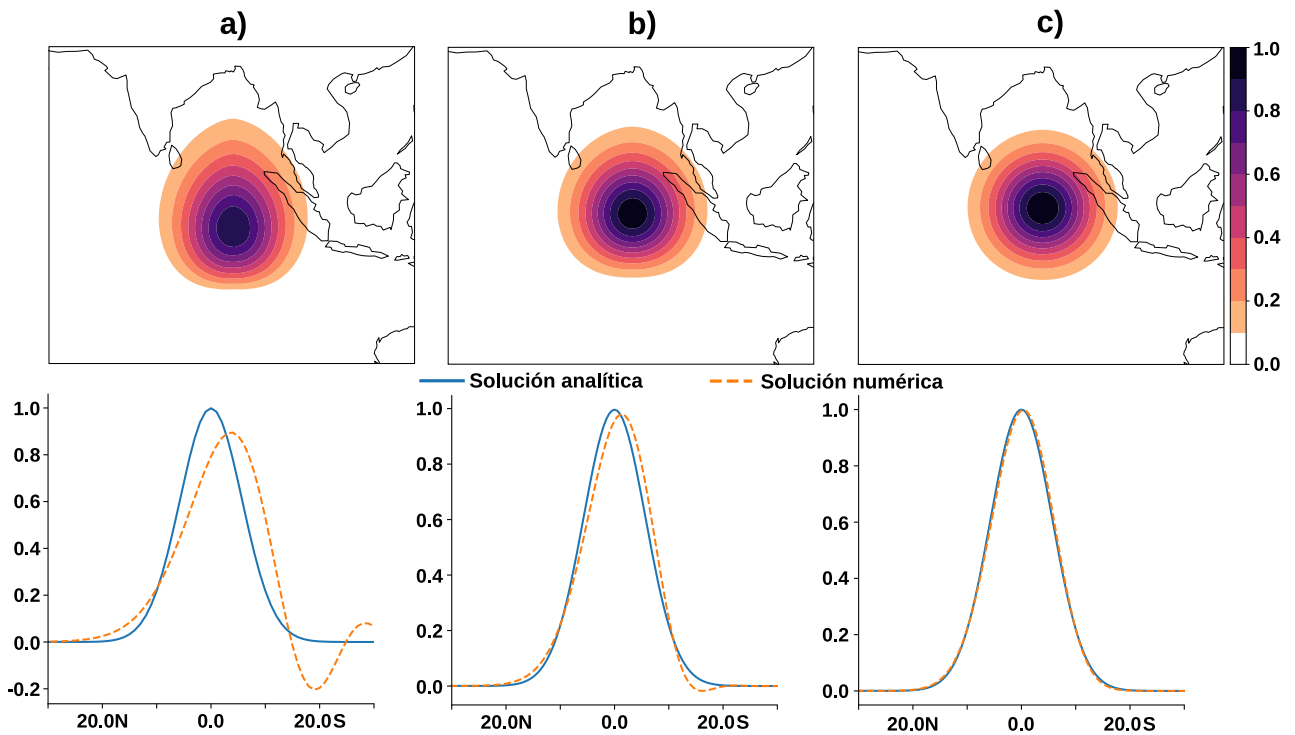
	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$
CN-DIM-SPLIT	20.62	41.25	82.51
RK2-TVD-DIM-SPLIT	0.687	0.696	0.715

Tabla 3.3: Errores relativos para las diferentes resoluciones (exp_adv02).

	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$	$\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$
CN-DIM-SPLIT	35.7%	10.84%	2.76%
RK2-TVD-DIM-SPLIT	13.7%	6.34%	3.18%

La tabla 3.2 muestra que los errores obtenidos en este experimento no difieren de manera notable de los mostrados en el experimento anterior (tabla 3.1). Por lo tanto, la presencia de las celdas polares no altera el resultado de manera significativa, al menos, según la métrica (3.2).

Las figuras 3.7 y 3.8 son análogas a las mostradas en el experimento anterior (figuras 3.4 y 3.5). Para el caso de CN-DIM-SPLIT, nuevamente se obtiene una deformación de la forma inicial en la dirección del flujo, que desaparece a medida que aumenta la resolución (Fig. 3.7c). Para la máxima

Fig. 3.6: Campo de viento (3.3) para $\alpha = \pi/2$ Fig. 3.7: Soluciones correspondientes al esquema CN-DIM-SPLIT para $t = 5$; a) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$; b) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$; c) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$. Abajo se muestra un corte meridional (de norte a sur) para $\lambda = 90^\circ$.

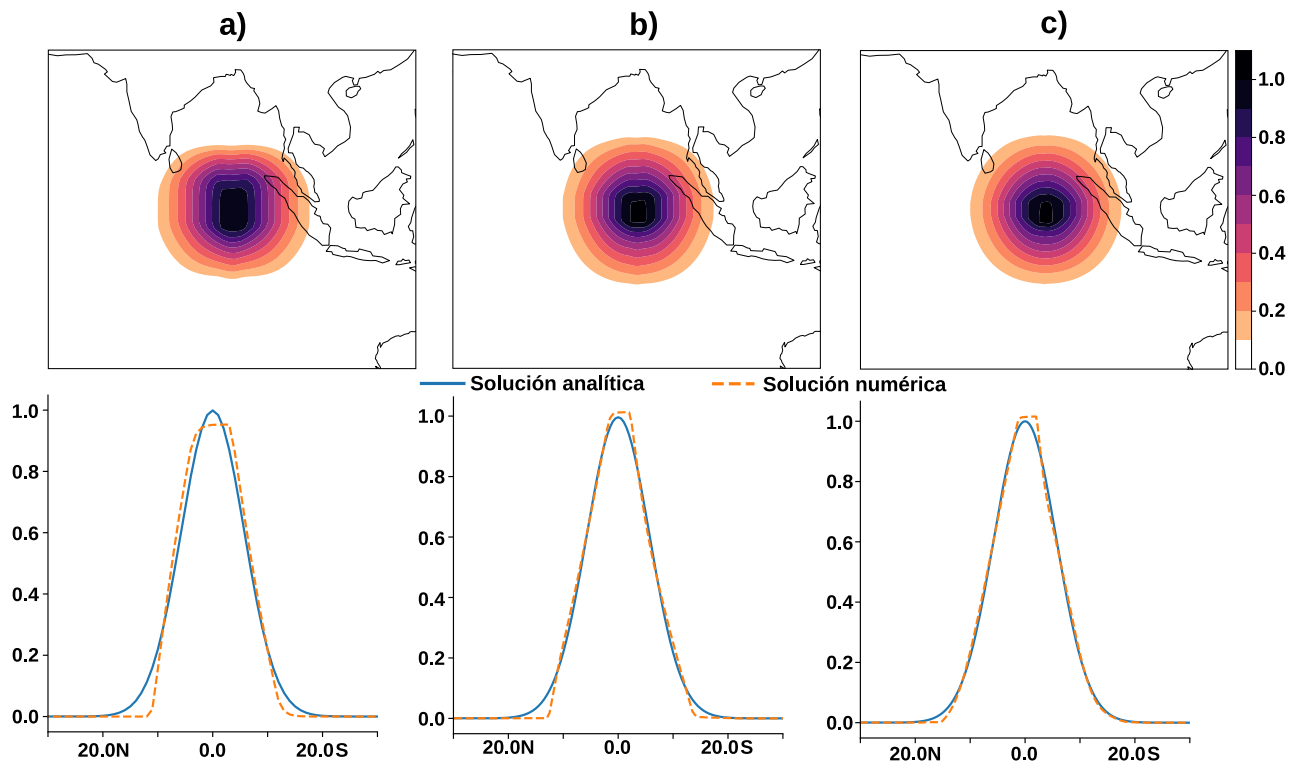


Fig. 3.8: Soluciones correspondientes al esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT para $t = 5$; a) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 1^\circ$; b) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$; c) $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$. Abajo se muestra un corte meridional (de norte a sur) para $\lambda = 90^\circ$.

resolución ($\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$), la dispersión numérica es del orden de 10^{-7} , lo que si bien es un valor pequeño, es notablemente más grande que en el experimento anterior (de 10^{-15}). Es necesario aclarar que este experimento es mucho más complejo desde el punto de vista numérico, principalmente por el drástico aumento del valor de CFL en comparación con el caso anterior.

Los resultados del esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT son muy similares a los del experimento anterior. Sin embargo, en este caso, se produce una ligera sobreestimación de la solución (ver parte inferior de la Fig. 3.8bc).

Los resultados de este experimento no difieren significativamente del anterior, aún cuando la advección sobre los polos es un experimento notablemente más complejo. Lo anterior significa que la presencia de las celdas polares no afectan de manera considerable la solución. Aún así, en el caso del esquema CN-DIM-SPLIT, si se produce un aumento notable de la dispersión numérica, causado por el alto valor de CFL en las cercanías de ambos polos.

Advección con viento variable (exp_adv03)

Este experimento, propuesto por [94], consiste en dos condiciones iniciales con distinto grados de complejidad. La primera es una curva suave (de clase C^∞) formada por dos *colinas* gaussianas:

$$\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x}) = \exp\{-5d^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})\} + \exp\{-5d^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})\}, \quad (3.5)$$

donde $\mathbf{x}_0 = (150^\circ, 90^\circ)$ y $\mathbf{x}_1 = (210^\circ, 90^\circ)$ (ver Fig.3.9a). La segunda condición inicial (Fig.3.9b) pertenece a la clase C^1 y viene dada por la ecuación

$$\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0.1 + 0.45[1 + \cos\{2\pi\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})\}] & \text{para } \rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) < 0.5 \\ 0.1 + 0.45[1 + \cos\{2\pi\rho(\mathbf{x}_2, \mathbf{x})\}] & \text{para } \rho(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}) < 0.5 \\ 0.1 & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (3.6)$$

donde $\rho(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)$ es la distancia sobre la esfera entre los puntos \mathbf{p}_1 y \mathbf{p}_2 .

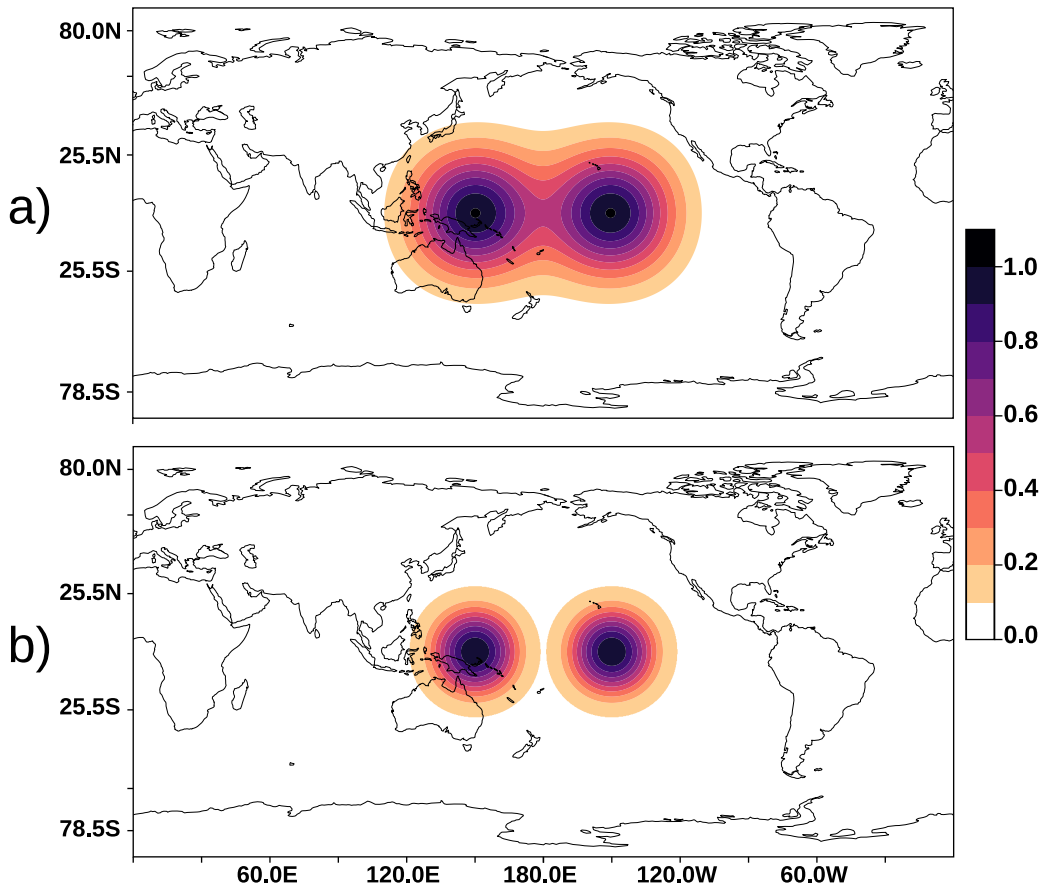


Fig. 3.9: Condiciones iniciales $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ (parte superior) y $\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x})$ (parte inferior).

A diferencia de los experimentos anteriores, en este caso, el campo de viento $\mathbf{U} = \{u, v\}$ es no estacionario, es decir,

$$u(\lambda, \vartheta, t) = \frac{10a}{T} \sin\left(\lambda - \frac{2\pi}{T}t\right)^2 \sin(\pi - 2\vartheta) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) + \frac{2a\pi}{T} \cos\left(\frac{\pi}{2} - \vartheta\right) \quad (3.7)$$

$$v(\lambda, \vartheta, t) = -\frac{10a}{T} \sin\left(2\lambda - \frac{4\pi}{5}t\right) \sin(\vartheta) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right), \quad (3.8)$$

donde $T = 5$ para el caso de radio unitario $a = 1$, o bien $T = 12$ días, para el caso de dimensiones terrestres ($a = 6378$ km) [94].

El problema de advección pura (3.1), con cualquiera de las condiciones iniciales $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ o $\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x})$, y con el campo de viento anterior, tiene como solución analítica la condición inicial correspondiente para $t = T$ [94].

Las figura 3.10 muestran los resultados obtenidos para $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$, usando $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.25^\circ$ y $\tau = 1.25 \times 10^{-3}$. Como se aprecia, los resultados con ambos esquemas son casi indistinguibles, aunque existe una mayor deformación de la forma inicial con el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT. Los errores relativos son de 2.51% y 2.55% para CN-DIM-SPLIT y RK2-TVD-DIM-SPLIT respectivamente. Por lo tanto, en este caso, no existe una diferencia significativa entre ambos esquemas.

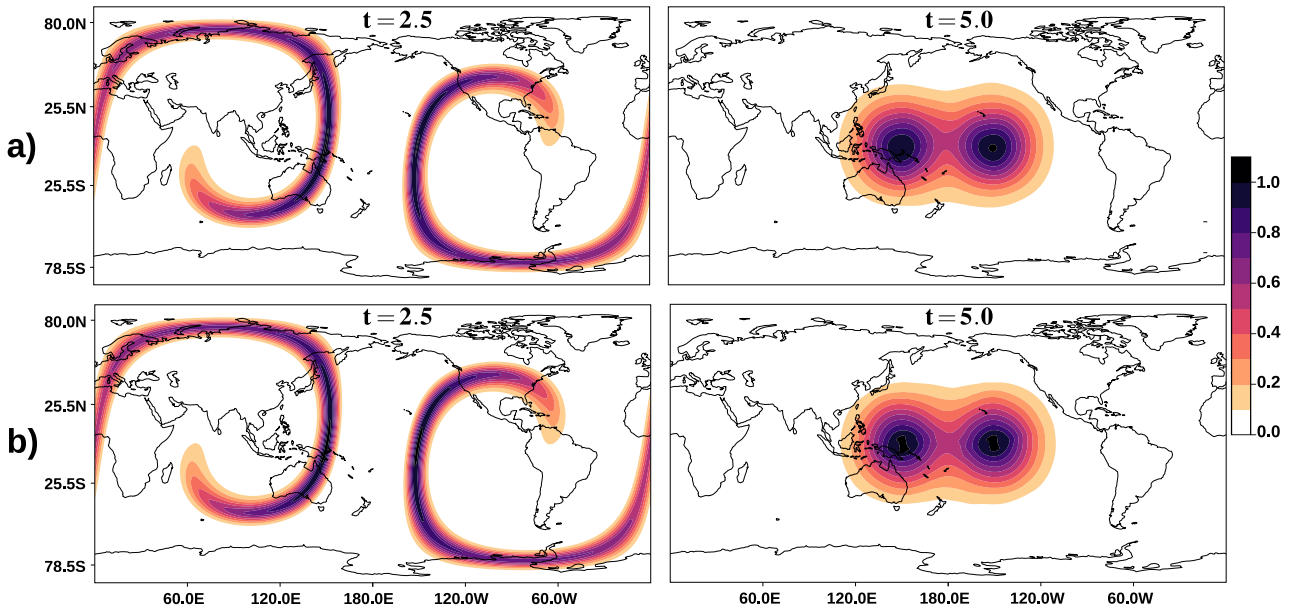


Fig. 3.10: Soluciones para $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ con CN-DIM-SPLIT (arriba) y RK2-TVD-DIM-SPLIT (abajo).

Los resultados para el caso de $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi^{\text{COS}}(\mathbf{x})$ se muestran en la figura 3.11. En este experimento, la deformación de la forma inicial es mayor para el esquema CN-DIM-SPLIT. Lo anterior se ve reflejado en los errores relativos: 7.16% para CN-DIM-SPLIT y 2.81% para RK2-TVD-DIM-SPLIT (aproximadamente 2.5 veces menor). El peor desempeño del esquema CN-DIM-SPLIT se debe a la menor suavidad de la curva $\phi^{\text{COS}}(\mathbf{x})$ en comparación con $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$. Esto hace que aparezcan armónicos de alta frecuencia que son trasladados de manera incorrecta por un esquema no monótono como CN-DIM-SPLIT [1], generando oscilaciones no deseadas en la solución.

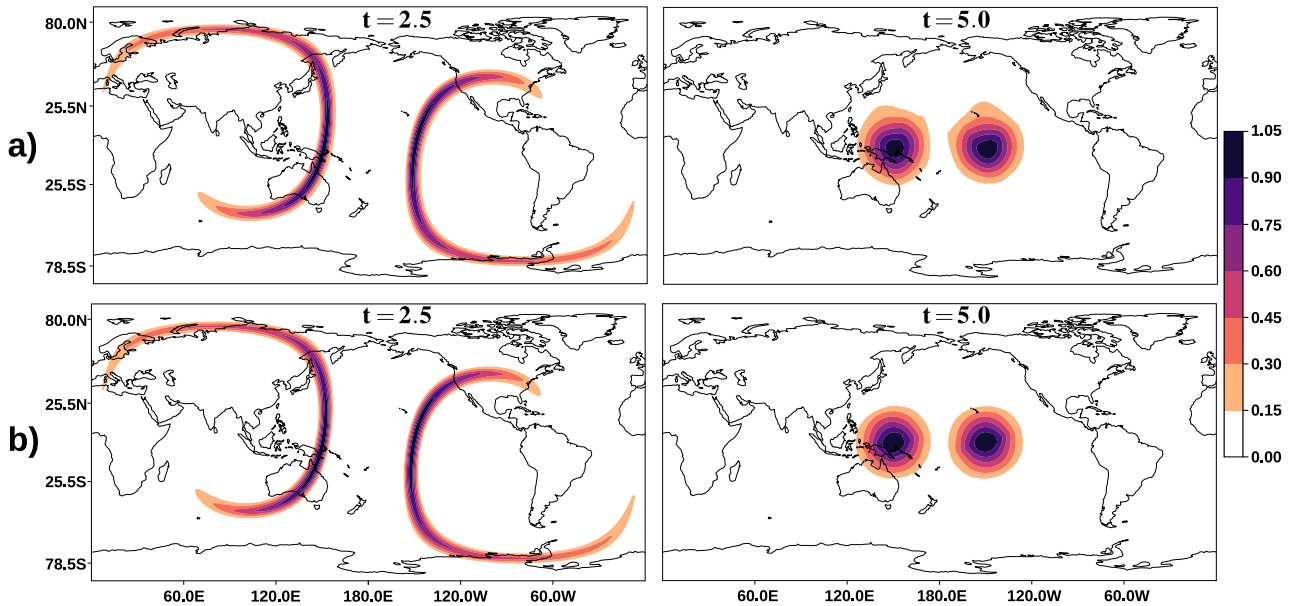


Fig. 3.11: Soluciones para $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi^{\text{COS}}(\mathbf{x})$ con CN-DIM-SPLIT (arriba) y RK2-TVD-DIM-SPLIT (abajo).

Ambos esquemas resuelven el problema de advección pura de manera satisfactoria. Sin embargo, RK2-TVD-DIM-SPLIT es más conveniente cuando se trata de problemas susceptibles de generar dispersión numérica (presencia de grandes gradientes o discontinuidades). Evidentemente, la dispersión numérica asociada al esquema CN-DIM-SPLIT puede disminuirse tanto como se quiera aumentando la resolución espacial y temporal [1]. Sin embargo, esto suele estar limitado por el poder computacional del que se disponga.

Por último, en este experimento se puede verificar que ambos esquemas conservan la masa de manera correcta. En todos los casos (combinaciones de esquema con condición inicial), la variación relativa de la masa no superó el $10^{-12}\%$.

En cuanto a la norma L_2 , el esquema CN-DIM-SPLIT mostró variaciones relativas del orden de $10^{-13}\%$; mientras que con RK2-TVD-DIM-SPLIT se obtuvo una variación de 1.16% para $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ y 0.98% para $\phi^{\text{COS}}(\mathbf{x})$. Lo anterior confirma que el esquema CN-DIM-SPLIT también conserva de

manera correcta la norma L_2 (además de la masa); mientras que RK2-TVD-DIM-SPLIT no. En general, el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT no garantiza la correcta conservación de la norma L_2 , aunque es posible mantener su variación en un rango tolerable.

3.2.2 Difusión lineal

Los próximos experimentos tienen como objetivo mostrar que el modelo AdvDiff2D resuelve el problema de difusión lineal

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f, \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}), \quad (3.9)$$

de manera satisfactoria. A diferencia del caso de advección pura, para este problema solo se usará el esquema principal CN-DIM-SPLIT.

Difusión a través del polo (exp_diff01)

Considere el caso de difusión constante $\mu = 10^{-3}$, y la condición inicial

$$\phi^0(\mathbf{x}) = \exp\{-10^3 \rho^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})\}, \quad (3.10)$$

donde $\mathbf{x}_0 = (\lambda, \vartheta) = (0.25^\circ, 6^\circ)$. La curva (3.10) consiste de una colina gaussiana muy cerca del polo norte (ver Fig. 3.12 para $t = 0$). Por lo tanto, se espera que para $t > 0$ la mancha inicial se expanda de manera uniforme y pase sobre el polo norte sin distorsión.

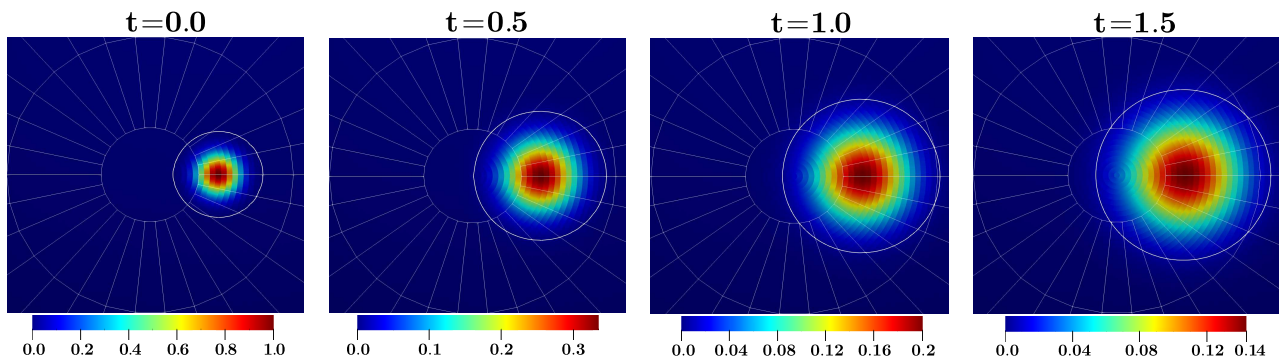


Fig. 3.12: Difusión sobre el polo norte. La isolínea $\phi = 0.01$ se muestra en color blanco.

La figura 3.12 muestra la solución numérica obtenida usando $\tau = 2.5 \times 10^{-3}$, $\Delta\lambda = \Delta\vartheta = 0.5^\circ$ y $a = 1$. Como se puede apreciar, la isolínea $\phi = 0.01$ forma una circunferencia que se expande sin que su forma se vea afectada por la presencia de la celda polar (ver Fig. 3.12). Este simple experimento sirve para comprobar que la aproximación en los polos no afecta la solución.

Difusión desde el polo (exp_diff02)

Considere $\mu(\lambda, \vartheta) = 5 \times 10^{-3}$ en cuatro sectores de ancho 30° , centrados en $\lambda_1 = 19.75^\circ$, $\lambda_2 = \lambda_1 + 180^\circ = 199.75^\circ$, $\lambda_3 = 109.75^\circ$ y $\lambda_4 = \lambda_3 + 180^\circ = 289.75^\circ$. En el resto de la esfera se considera $\mu(\lambda, \vartheta) = 0$. Como condición inicial se tiene $\phi = 100$ en la celda polar norte y cero en el resto.

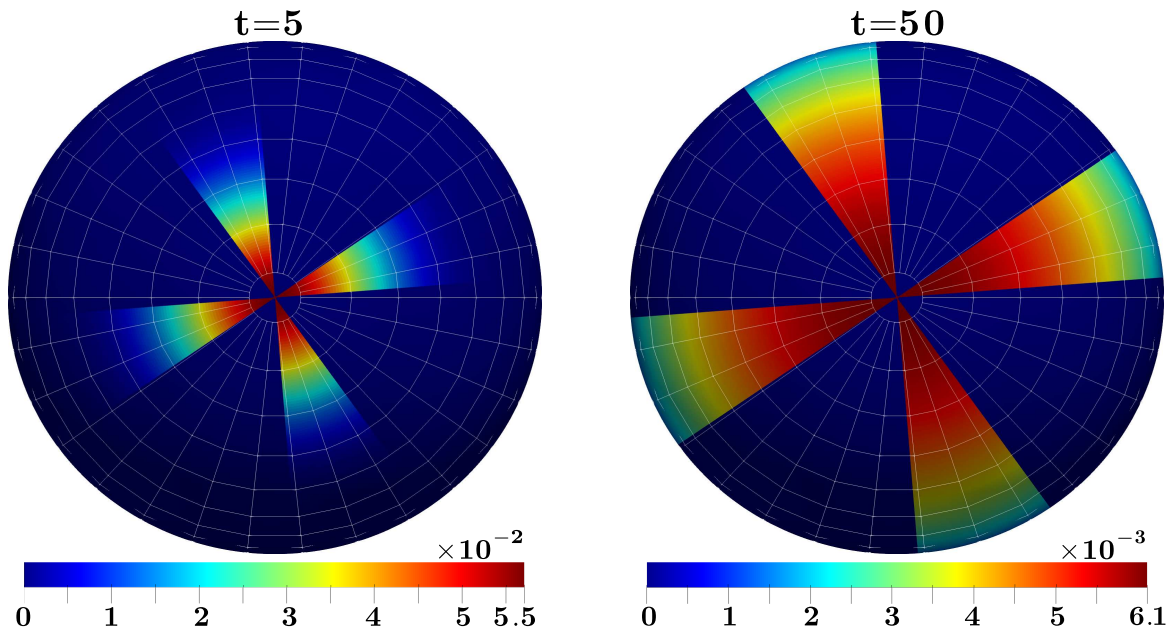


Fig. 3.13: Difusión desde el polo norte para $t = 5$ y $t = 50$.

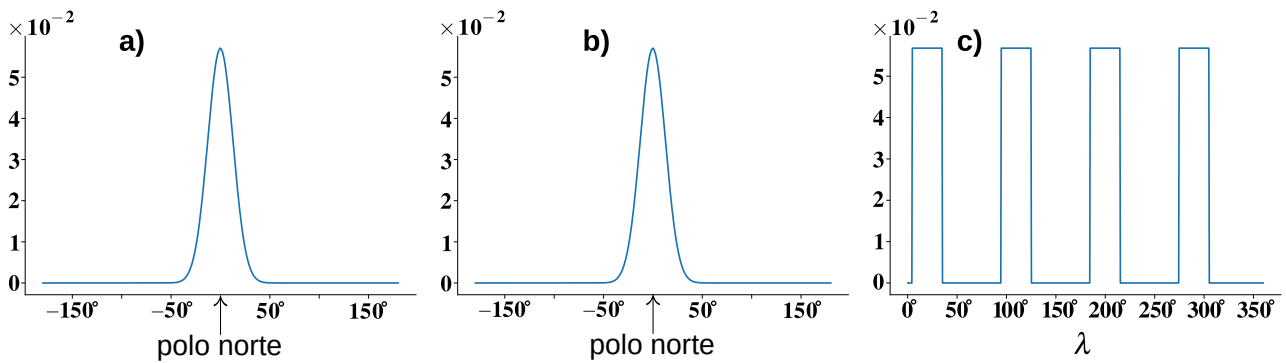


Fig. 3.14: Difusión desde el polo norte para $t = 5$; a) corte meridional para $\lambda = 19.75^\circ$; b) corte meridional para $\lambda = 109.75^\circ$; c) corte longitudinal para $\vartheta = 0.75^\circ$.

En este experimento, la difusión debe ocurrir solo en los sectores donde $\mu \neq 0$. Además, la

solución debe ser simétrica con respecto al polo norte. Lo anterior se puede verificar en la figura 3.13, donde se muestran las soluciones numéricas obtenidas para $\tau = 2.5 \times 10^{-3}$, $\Delta\lambda = \Delta\vartheta = 0.5^\circ$ y $a = 1$.

En las figuras 3.13 y 3.14ab se puede apreciar que la difusión ocurre sin distorsión alguna y de forma simétrica con respecto a la celda polar. Por lo tanto, la solución no se ve afectada por la aproximación en el polo (al igual que en el experimento anterior). En la figura 3.14c se muestra un corte longitudinal para $\vartheta = 0.75^\circ$, es decir, para las celdas contiguas al polo norte. Como se aprecia, las fronteras de los sectores con $\mu \neq 0$ actúan como una pared impermeable, haciendo que no salga sustancia hacia afuera de los sectores.

3.2.3 Difusión no lineal

Los siguientes experimentos tienen como objetivo resolver la ecuación de difusión no lineal

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} - \nabla \cdot (\mu(\mathbf{x}, t, \phi)\nabla\phi) = f(\mathbf{x}, t, \phi), \quad \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi^0(\mathbf{x}). \quad (3.11)$$

El objetivo del model AdvDiff2D es resolver el problema de advección-difusión lineal. Aún así, AdvDiff2D puede ser usado sin mayor dificultad para resolver el problema (3.11). Para esto, basta con hacer las aproximaciones de primer orden

$$\mu(\mathbf{x}, t_n, \phi(\mathbf{x}, t_n)) \approx \mu(\mathbf{x}, t_{n-1}, \phi(\mathbf{x}, t_{n-1})) \quad (3.12)$$

$$f(\mathbf{x}, t_n, \phi(\mathbf{x}, t_n)) \approx f(\mathbf{x}, t_{n-1}, \phi(\mathbf{x}, t_{n-1})), \quad (3.13)$$

en el intervalo de integración $[t_{n-1}, t_{n+1}]$. Obviamente, lo anterior reduce la aproximación temporal del modelo, desde segundo orden ($O(\tau^2)$) hasta al menos primer orden ($O(\tau)$). En caso de tener forzamiento no lineal pero difusión lineal, entonces es posible usar el algoritmo 6 (ver cap. 2, sección: *Fuentes y decaimiento exponencial*) para mantener segundo orden de aproximación temporal.

En cada uno de los experimentos que se muestran a continuación se emplea el esquema CN-DIM-SPLIT.

Regímenes de combustión Blow-up (exp_diff03)

Para el caso de $\mu = k\phi^\alpha$ y $f = q\phi^\beta$, con $\alpha, \beta > 0$, la ecuación (3.11) presenta soluciones no acotadas para un tiempo finito (regímenes blow-up). Este tipo de soluciones describen procesos de rápida compresión o acumulación de materia, así como importantes procesos en química, magnetohidrodinámica, meteorología (tornados y descargas eléctricas), ecología (crecimiento de poblaciones), neurofisiología, epidemiología (brotes de enfermedades infecciosas), economía (rápido crecimiento económico), demografía (crecimiento de la población mundial), etc. [7, 8, 14, 15, 95–99].

Para distintas combinaciones de α y β se obtienen tres regímenes de combustión distintos (asumiremos que ϕ representa la temperatura):

- Régimen HS (High Swirl Combustion): $\beta < \alpha + 1$. Rápido aumento de la temperatura y del área de combustión.
- Régimen LS (Low Swirl Combustion): $\beta > \alpha + 1$. Rápido aumento de la temperatura y disminución del área de combustión.
- Régimen intermedio S: $\beta = \alpha + 1$. Rápido aumento de la temperatura y área de combustión constante.

Los tres casos anteriores fueron modelados satisfactoriamente usando AdvDiff2D. En cada experimento se usó $\Delta\lambda = \Delta\vartheta = 0.5^\circ$ y $\tau = 10^{-3}$. Para los regímenes HS y S se tomó como condición inicial $\phi^0(\mathbf{x}) = \exp\{-10\rho^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})\}$, mientras que para LS se usó $\phi^0(\mathbf{x}) = \exp\{-2\rho^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})\}$ (en aras de visualizar mejor la disminución del área inicial).

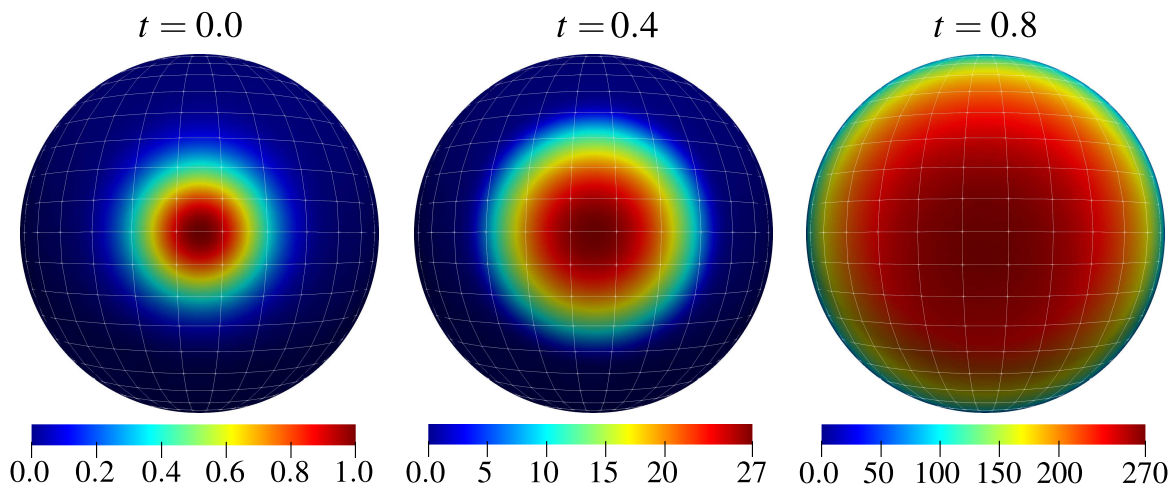


Fig. 3.15: Régimen de combustión HS ($\alpha = \beta = 1$, $k = 10^{-2}$, $q = 10$).

En las figuras 3.15, 3.16 y 3.17 se aprecia claramente que la solución numérica coincide con el comportamiento esperado para cada régimen. Para HS (Fig. 3.15), el área de combustión aumenta hasta prácticamente cubrir la mitad de la esfera en solo 0.8 unidades de tiempo; mientras que para LS (Fig. 3.16), el área inicial se reduce bruscamente para $t = 0.27$. Por último, para el régimen intermedio S (Fig. 3.17), el área de combustión se mantiene aproximadamente constante. En los tres casos el valor de ϕ aumenta con rapidez.

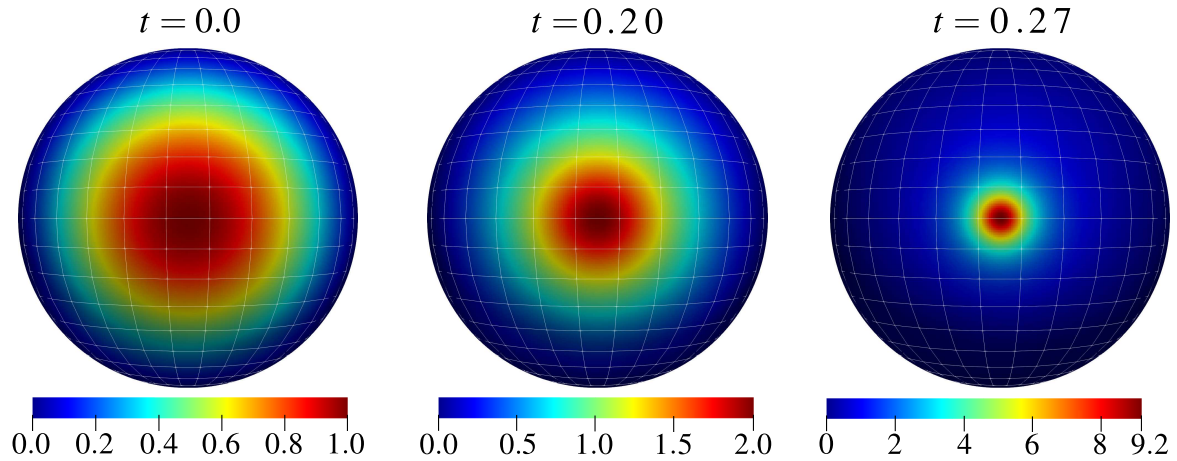


Fig. 3.16: Régimen de combustión LS ($\alpha = 1$, $\beta = 3$, $k = 10^{-2}$, $q = 2$).

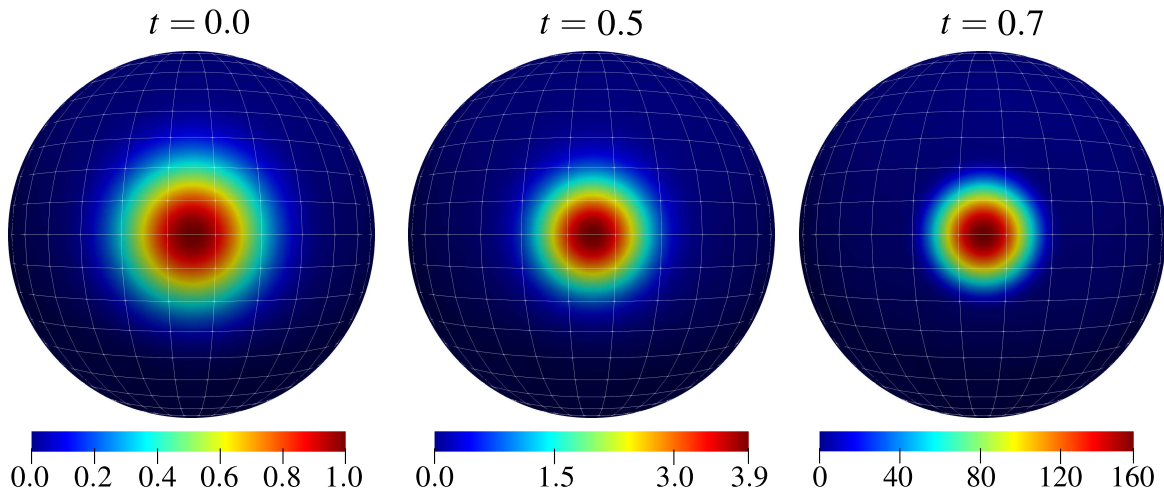


Fig. 3.17: Régimen de combustión S ($\alpha = 1$, $\beta = 2$, $k = 10^{-2}$, $q = 2$).

Difusión lineal y forzamiento no lineal (exp_diff04)

En este experimento consideraremos $\mu = \text{Const.}$ (difusión lineal) y $f = \alpha\phi - \beta\phi^3$ (forzamiento no lineal). En este caso, la ecuación (3.11) describe una serie de problemas de combustión no lineal.

Para $\alpha = \beta = 1$, tenemos que el término f será positivo (fuente) para $\phi < 1$ y negativo (sumidero) para $\phi > 1$. Por lo tanto, la solución final convergerá a $\phi \equiv 1$ independientemente de la condición inicial, dando lugar a un proceso de auto-organización.

La figura 3.18 muestra la solución numérica obtenida usando $\phi^0(\mathbf{x}) = \exp\{-10\rho^2(\mathbf{x}_0, \mathbf{x})\}$, $\mathbf{x}_0 = (90.25^\circ, 90^\circ)$, $\Delta\lambda = \Delta\vartheta = 0.5^\circ$ y $\tau = 2.5 \times 10^{-3}$. Se puede observar una onda de amplitud constante

(igual a 1) que se propaga uniformemente en todas direcciones, hasta cubrir la mayor parte de la esfera para $t = 12.5$. Lo anterior puede observarse de manera más clara en la figura 3.19.

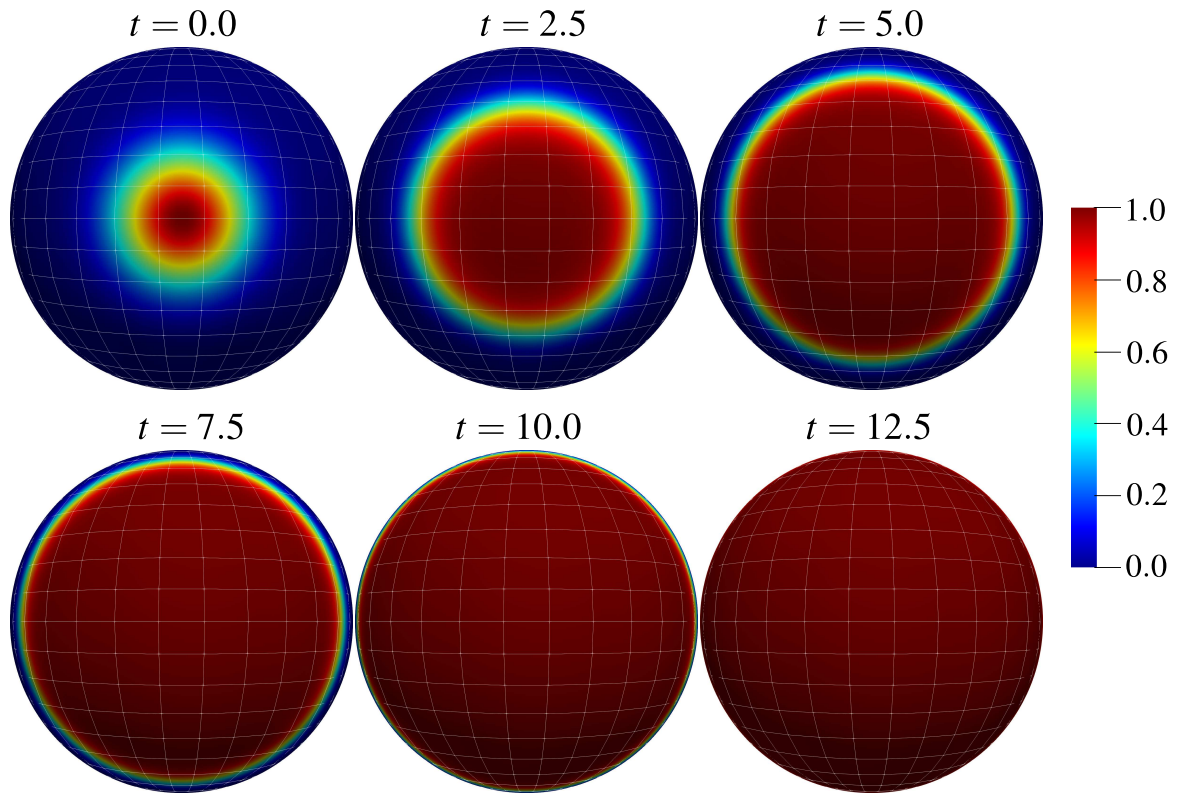


Fig. 3.18: Solución numérica (exp_diff04).

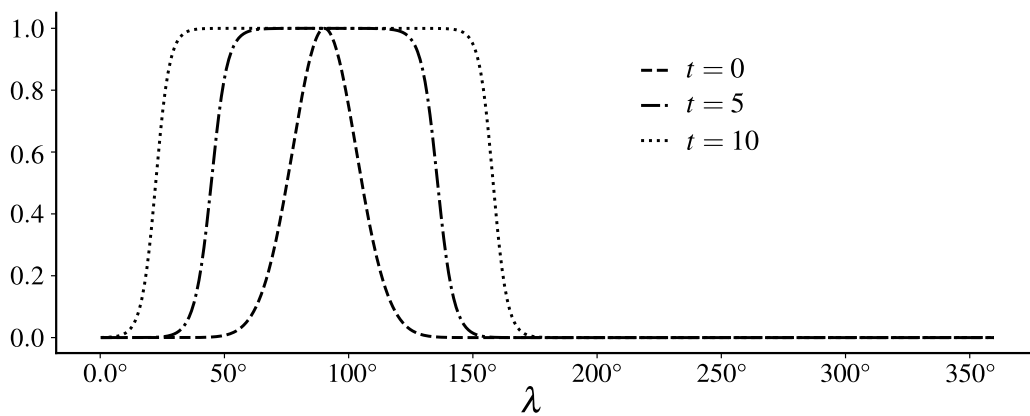


Fig. 3.19: Solución numérica (exp_diff04). Corte longitudinal ($\vartheta = \text{Const.} = 90^\circ$) para $t = 0$, $t = 5$ y $t = 10$.

Gray-Scott (exp_diff05)

Consideremos el modelo de Gray-Scott, que consiste de dos especies químicas (u y v) que interactúan de forma no lineal entre ellas:

$$u_t = \mu \nabla^2 u - uv^2 + \omega(1 - u) \quad (3.14)$$

$$v_t = \chi \nabla^2 v + uv^2 - (\omega + \kappa)v. \quad (3.15)$$

El modelo anterior ha sido ampliamente estudiado debido a la variedad de patrones visuales que exhiben sus soluciones para valores específicos de los parámetros: μ , χ , ω y κ [100]. Desde el punto de vista numérico, este problema es mucho más complicado que los anteriores, pues involucra a dos especies (en lugar de solo una) que interactúan de forma no lineal.

Para resolver el problema anterior con AdvDiff2D basta con escribir

$$u_t = \mu \nabla^2 u - \sigma_u u + f_u \quad (3.16)$$

$$v_t = \chi \nabla^2 v - \sigma_v v + f_v, \quad (3.17)$$

donde $\sigma_u = \omega + v^2$, $f_u = \omega$, $\sigma_v = \omega + \kappa$, $f_v = uv^2$, y en cada intervalo de integración $[t_{n-1}, t_{n+1}]$ hacer las aproximaciones de primer orden:

$$\sigma_u(v_n, t_n) \approx \sigma_u(v_{n-1}, t_{n-1}); \quad f_v(u_n, v_n, t_n) \approx f_v(u_{n-1}, v_{n-1}, t_{n-1}). \quad (3.18)$$

De esta forma, es posible usar el esquema CN-DIM-SPLIT para resolver los problemas (3.16) y (3.17) de manera independiente.

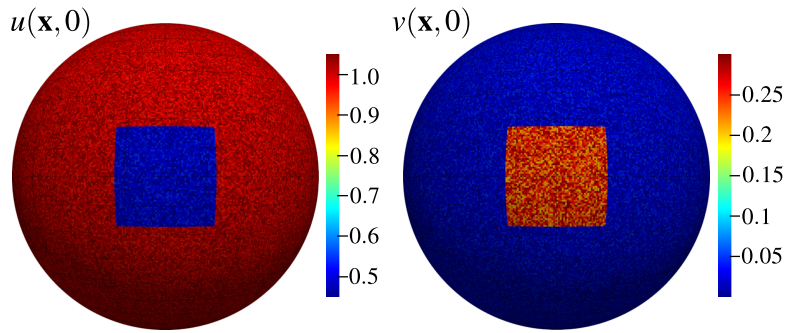
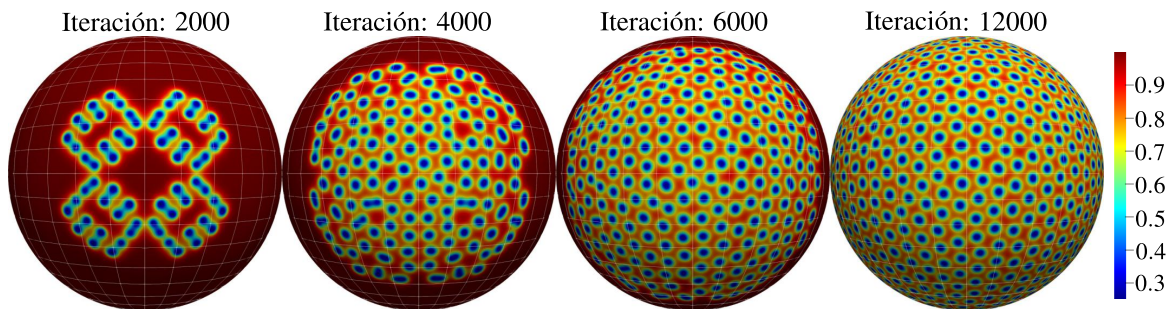
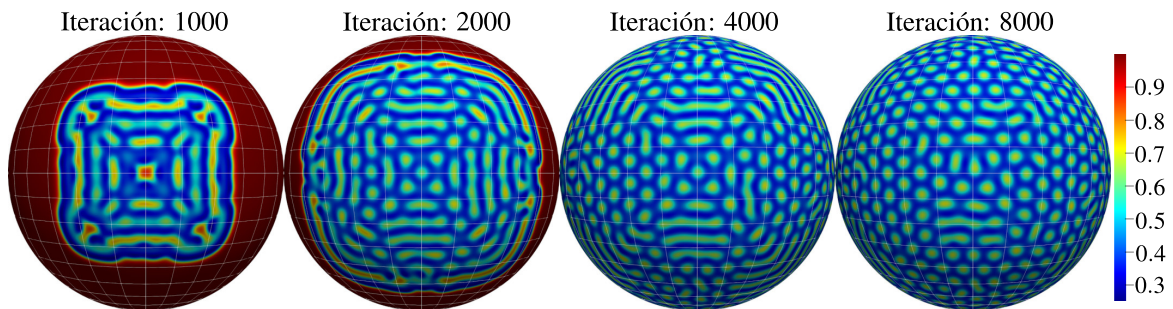
Con estas simples modificaciones, se usó el modelo AdvDiff2D para obtener de manera satisfactoria algunos de los patrones de Gray-Scott. En todos los casos se partió de la condición inicial mostrada en la figura 3.20, que viene dada por:

$$u(\mathbf{x}, 0) = \begin{cases} 0.5 + \text{rand}(0.05) & \text{para } \mathbf{x} \in G \\ 1.0 + \text{rand}(0.05) & \text{para } \mathbf{x} \notin G \end{cases} \quad (3.19)$$

$$v(\mathbf{x}, 0) = \begin{cases} 0.25 + \text{rand}(0.05) & \text{para } \mathbf{x} \in G \\ 0.0 + \text{rand}(0.05) & \text{para } \mathbf{x} \notin G \end{cases}, \quad (3.20)$$

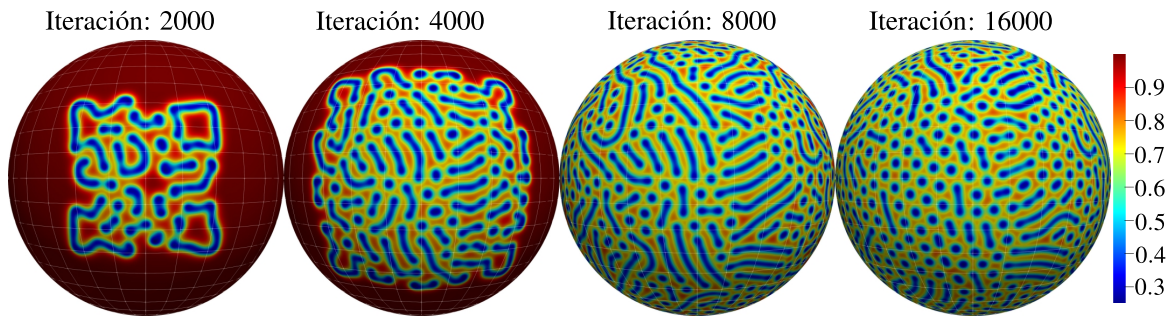
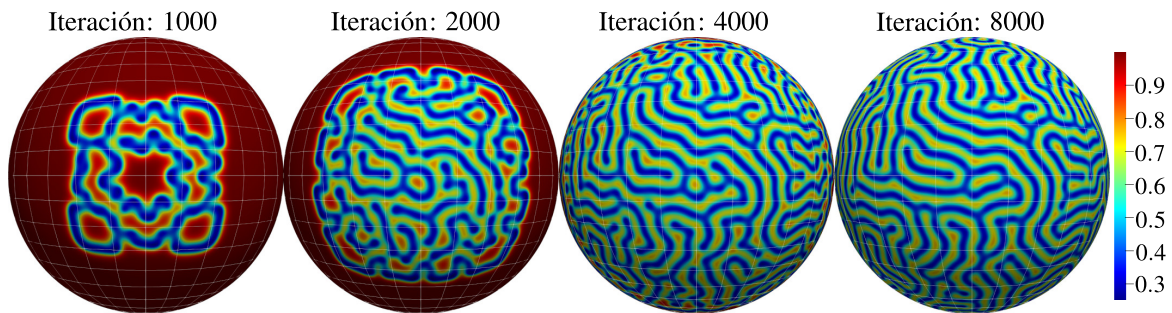
donde G es una región cuadrada de ancho 30° , centrada en el punto $(90^\circ, 90^\circ)$, y $\text{rand}(0.05)$ es un generador de números aleatorios en el intervalo $[0, 0.05]$.

Las figuras 3.21, 3.22, 3.22, 3.23 y 3.24 muestran los distintos patrones obtenidos (solo se graficó $u(\mathbf{x}, t)$) mateniendo constantes $\mu = 0.16$ y $\chi = 0.08$, y variando los parámetros ω y κ . En

Fig. 3.20: Condición inicial para $u(\mathbf{x},0)$ y $v(\mathbf{x},0)$.Fig. 3.21: Resultado para $\omega = 0.026$ y $\kappa = 0.061$.Fig. 3.22: Resultado para $\omega = 0.030$ y $\kappa = 0.055$.

todos los casos se usó $a = 114.59$, $\tau = 0.5$ y $\Delta\vartheta = \Delta\lambda = 0.5^\circ$.

Cabe destacar, que no es necesario hacer ninguna modificación especial en el código fuente de AdvDiff2D en aras de aplicarlo al problema de Gray-Scott. De hecho, es muy sencillo resolver problemas que involucren un número arbitrario de especies, siempre que el poder computacional disponible lo permita. Cuando el número de especies es muy elevado, lo mejor es emplear un cluster especializado que implemente el estándar MPI [20]. En este sentido, AdvDiff2D también facilita mucho las cosas. Por ejemplo, supongamos que queremos resolver el problema de Gray-Scott

Fig. 3.23: Resultado para $\omega = 0.030$ y $\kappa = 0.029$.Fig. 3.24: Resultado para $\omega = 0.029$ y $\kappa = 0.057$.

usando un cluster MPI con al menos dos nodos. El nodo 1, podría *encargarse* del problema correspondiente a $u(\mathbf{x}, t)$, mientras que el nodo 2, del problema correspondiente a $v(\mathbf{x}, t)$. De esta forma, ambos nodos solo tendrían que sincronizarse al inicio de cada intervalo $[t_{n-1}, t_{n+1}]$, para calcular las aproximaciones (3.18). Los cálculos en cada nodo se harían usando la implementación actual de AdvDiff2D, sin prácticamente ningún cambio¹.

3.2.4 Advección-difusión

Los resultados que se muestran a continuación corresponden a un experimento similar al mostrado en [101] (sec. 3.4). Sin embargo, en este caso, en lugar del esquema CN-DIM-SPLIT usamos RK2-TVD-DIM-SPLIT, que es una mejor opción para problemas predominantemente advectivos. La idea aquí es emplear AdvDiff2D para resolver un problema de advección-difusión sobre la superficie del globo terráqueo, usando un campo de viento real.

Para obtener el vector \mathbf{U} se usó el valor del viento promedio en 500hPa para el mes de enero del 2020. Estos datos se obtuvieron del reanálisis ERA5 (<https://cds.climate.copernicus.eu>).

¹Solo sería necesario agregar la sincronización entre nodos. La paralelización de los cálculos en AdvDiff2D se lleva a cabo usando OpenMP [19], que es compatible con MPI.

Como es de esperar, el campo de viento del reanálisis es divergente, por lo que fue necesario procesarlo (como se explica en el anexo A.1) para eliminar la parte divergente. La figura 3.25 muestra el campo de viento original (reanálisis) y el procesado (solo la parte no divergente). Como se aprecia, las diferencias entre ambos campos son apenas perceptibles.

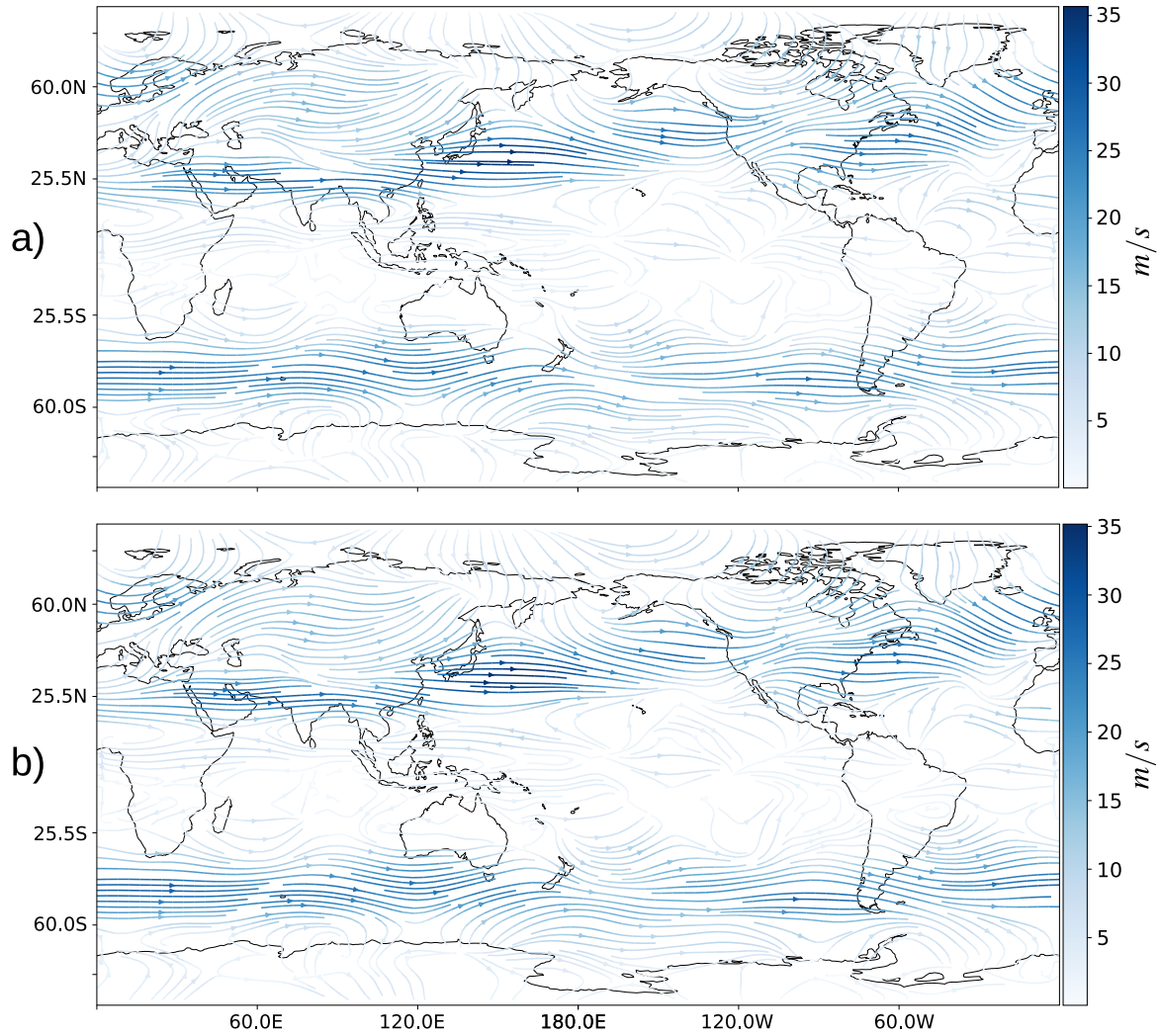


Fig. 3.25: Campo de viento. a) reanálisis; b) parte no divergente.

Para este experimento consideramos 18 fuentes puntuales distribuidas sobre el globo, de forma tal que la emisión ocurra solo en el primer día, es decir:

$$f(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{18} f_i(\mathbf{x}, t); \quad f_i(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} q_i & \text{para } \mathbf{x} = \mathbf{x}_i \text{ y } t \leq 24\text{h} \\ 0 & \text{para } \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_i \text{ o } t > 24\text{h} \end{cases} \quad (3.21)$$

Las tasas de emisión q_i y las coordenadas \mathbf{x}_i son completamente arbitrarias. Las fuentes $f_i(\mathbf{x}, t)$ pueden representar la emisión de cualquier contaminante pasivo en la atmósfera o bien alguna magnitud física como la humedad. Como condición inicial se tomó $\phi(\mathbf{x}, 0) = \text{Const.} = 0.1$.

Las figuras 3.26, 3.27 y 3.28 muestran los resultados obtenidos para distintos momentos dentro de un plazo de 30 días. Como se aprecia, hasta el primer día (Fig. 3.26), la pluma se mantiene *atada* a la fuente de emisión y el transporte ocurre según las líneas de flujo mostradas en la figura 3.25. También se aprecia que las mayores concentraciones se ubican en áreas de viento débil o calma, lo que es un resultado esperado.

A partir del primer día, las plumas se *desprenden* de las fuentes emisoras, desplazándose zonalmente por el efecto de la advección. También las áreas de contaminación crecen debido al efecto de la difusión (ver figuras 3.27 y 3.28). Finalmente, para el día 30, se observan regiones muy grandes de contaminación (Fig. 3.28) y concentraciones mucho menores que las del día 1 (Fig. 3.26a).

En este experimento se usó una resolución espacial de 0.25° y un paso temporal de $\tau = 6$ minutos, para un valor de $\text{CFL} = \text{Const.} = 0.63$. En contraste, en el experimento mostrado en [101] (para condiciones similares), fue necesario usar $\tau = 50$ segundos, en aras de disminuir a niveles tolerables la dispersión numérica producida por el esquema CN-DIM-SPLIT. Lo anterior confirma que el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT es más adecuado para problemas predominantemente advectivos, permitiendo escoger un paso temporal más grande (dentro de la región de estabilidad) sin generar dispersión numérica.

Por último, también es interesante considerar el caso de advección pura. La figura 3.29 muestra la solución obtenida para $t = 30$ días, pero considerando $\mu = 0$. Como se observa, los resultados mostrados en las figuras 3.28 y 3.29 son muy similares, excepto que las concentraciones son más grandes y las áreas de contaminación más pequeñas que para el caso de advección pura (Fig. 3.29). Lo anterior está acorde con lo esperado y demuestra que el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT es la opción recomendada para este tipo de problemas.

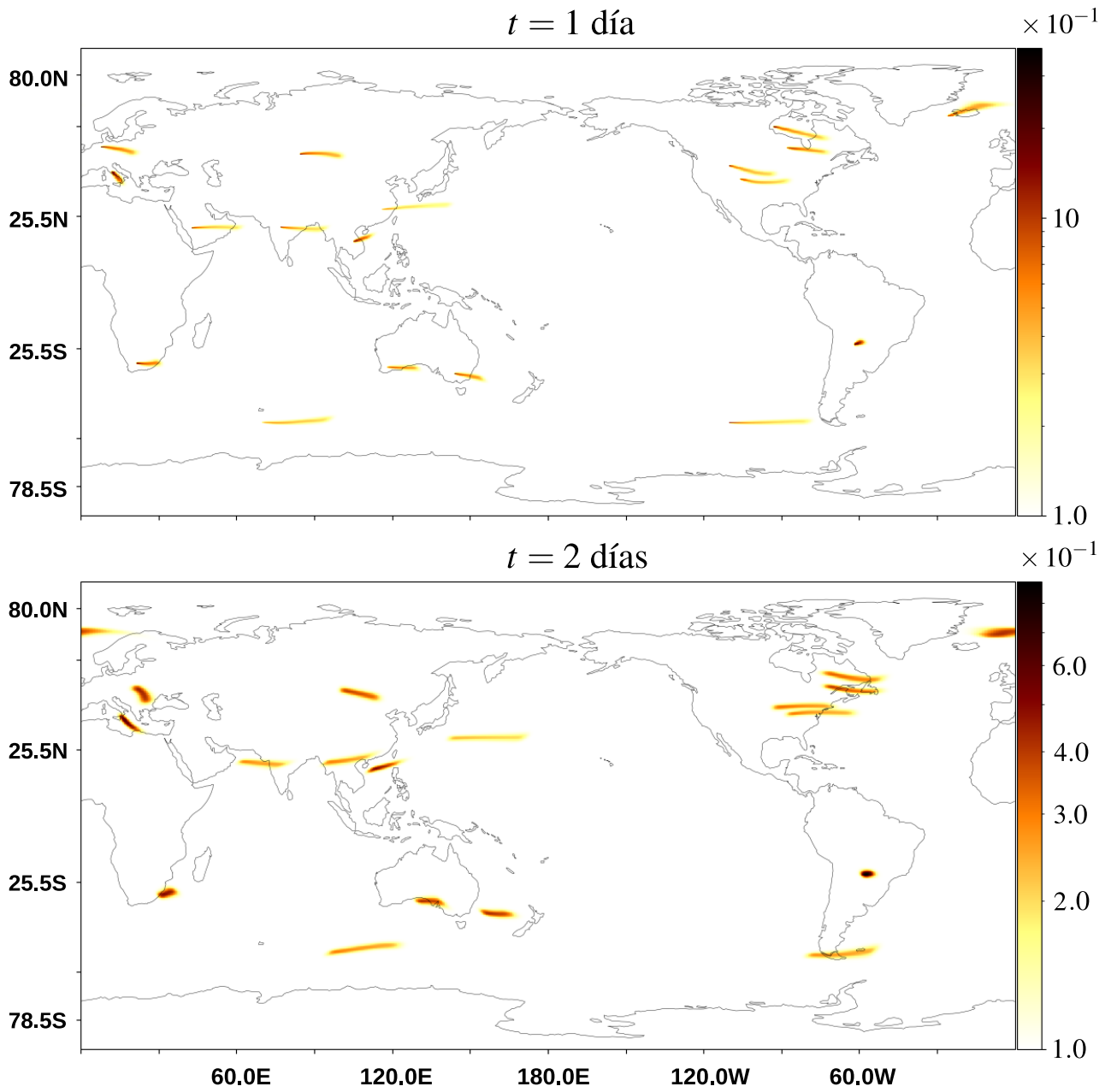


Fig. 3.26: Advección-difusión sobre el globo terráqueo para $t = 1$ día y $t = 2$ días

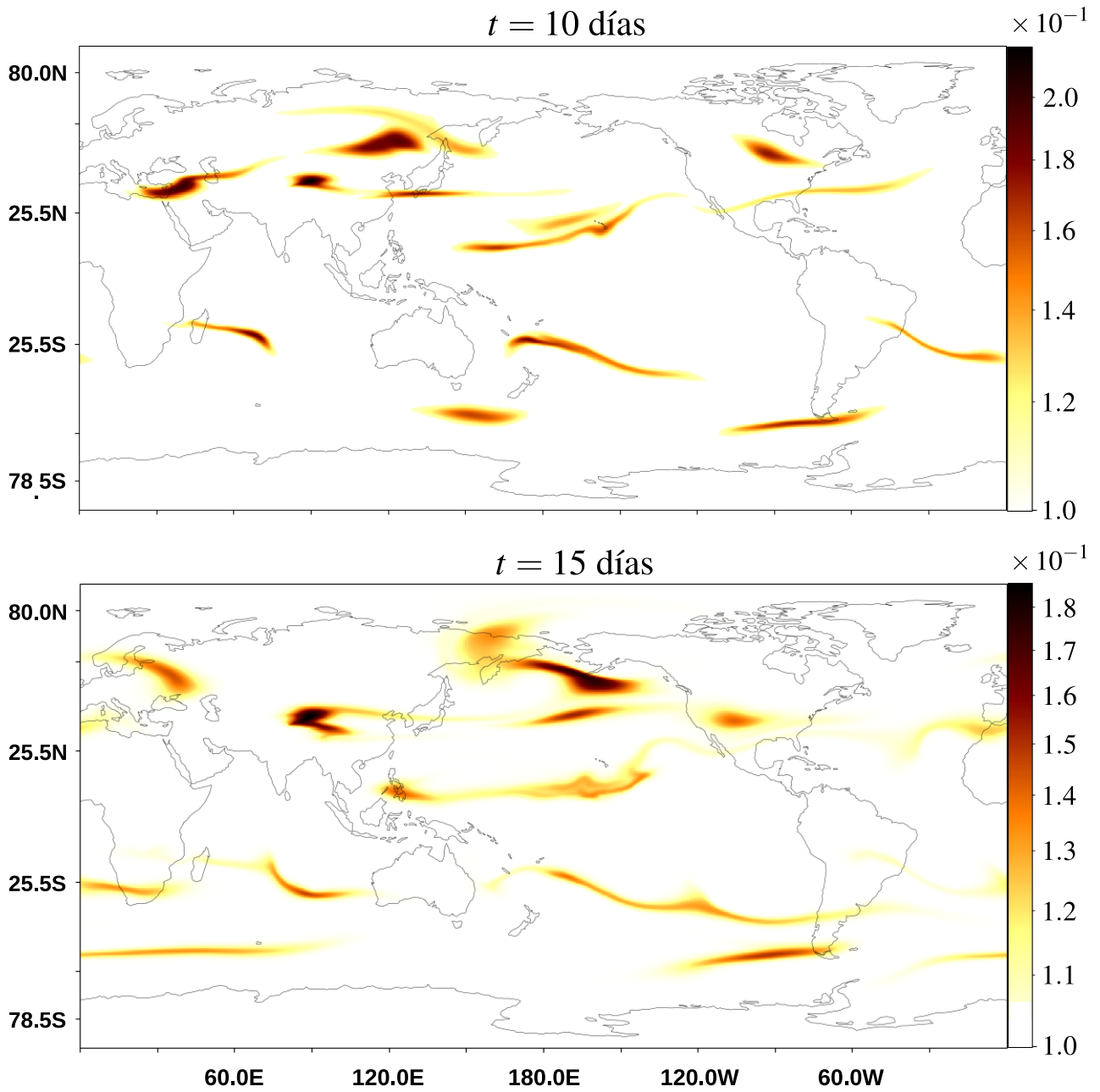


Fig. 3.27: Advección-difusión sobre el globo terráqueo para $t = 10$ día y $t = 15$ días.

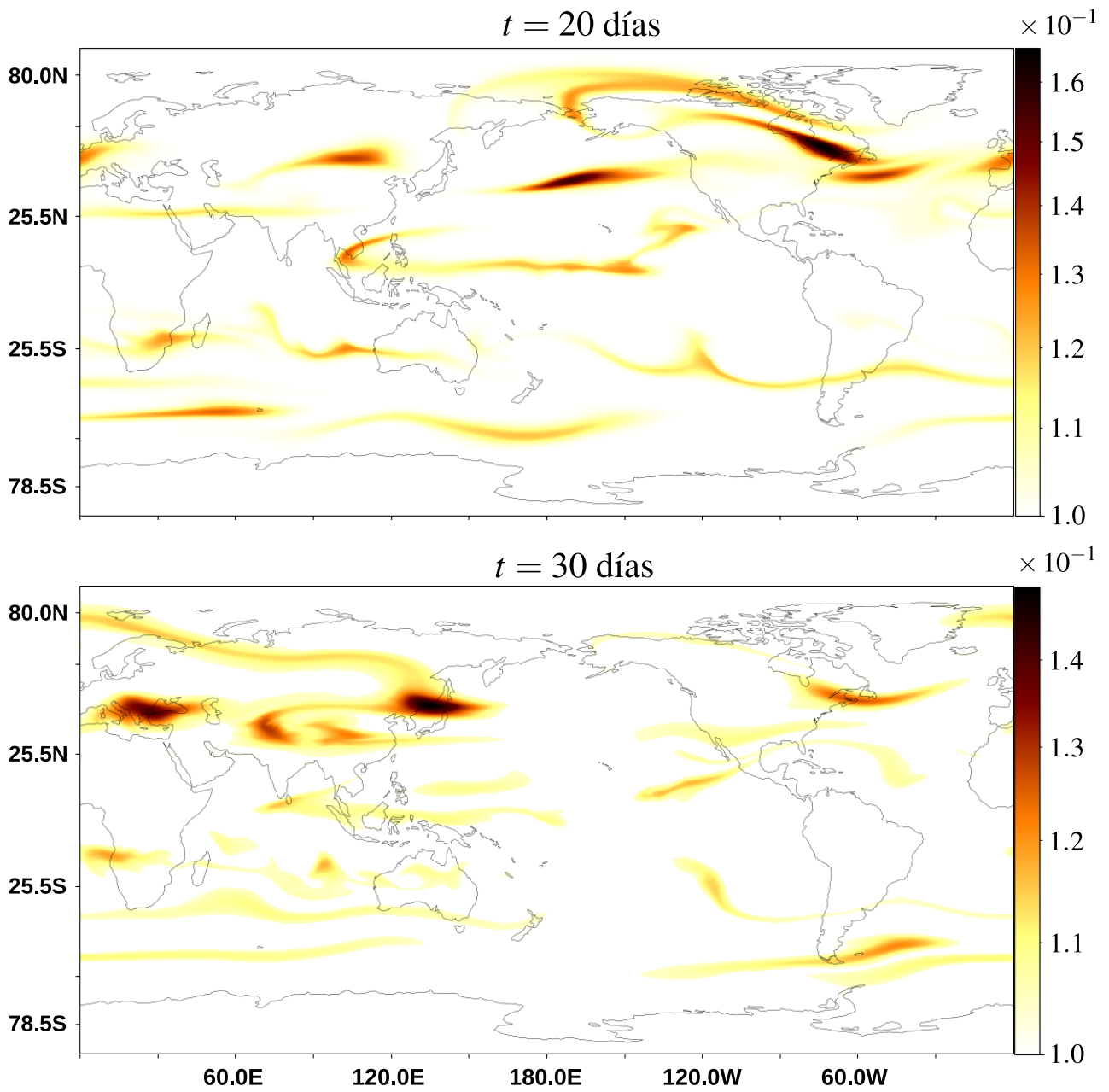


Fig. 3.28: Advección-difusión sobre el globo terráqueo para $t = 20$ día y $t = 30$ días.

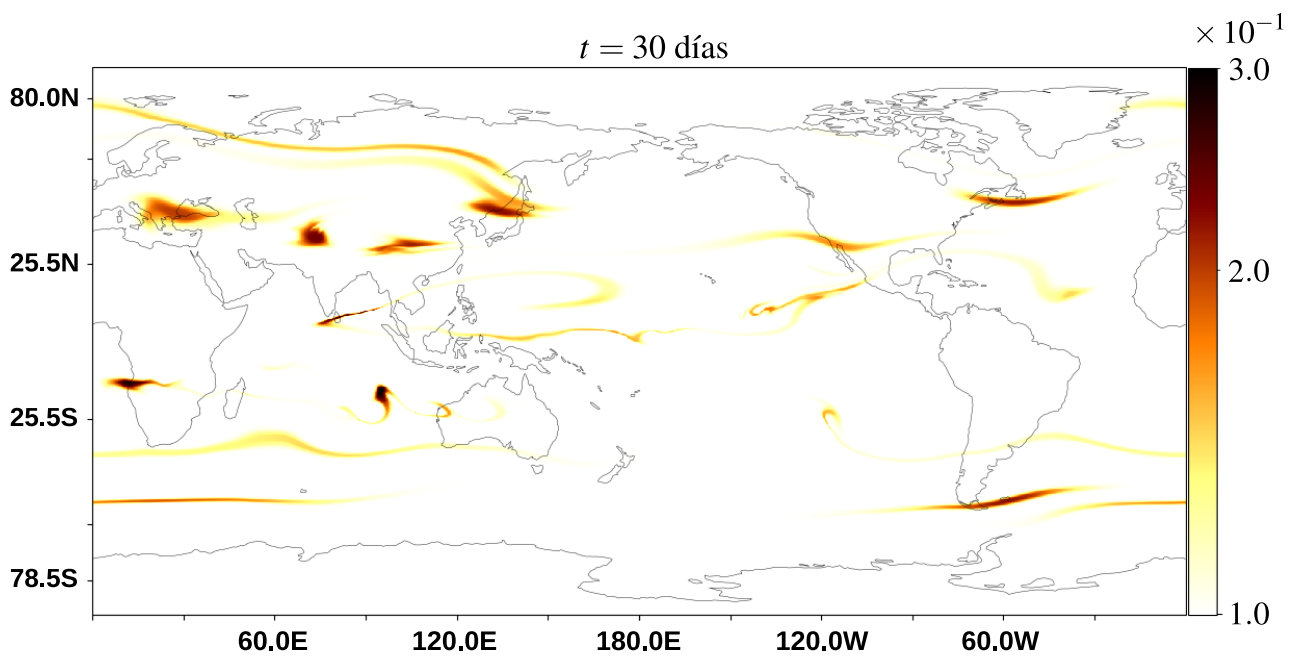


Fig. 3.29: Advección pura sobre el globo terráqueo para $t = 30$ días.

Conclusiones

En este trabajo se presentó el modelo bidimensional AdvDiff2D, cuyo objetivo es resolver la ecuación de advección-difusión sobre la superficie de una esfera. AdvDiff2D cuenta con dos esquemas de integración numérica. El esquema principal (CN-DIM-SPLIT), es implícito (y directo), incondicionalmente estable y preserva de manera correcta la masa y la norma L_2 de la solución. El segundo esquema (RK2-TVD-DIM-SPLIT) es directo, condicionalmente estable y monótono, por lo que es más apropiado para casos de advección pura. Ambos esquemas fueron descritos con detalle, y se discutieron cada una de sus propiedades. Finalmente, las capacidades del modelo fueron puestas a prueba mediante una serie de experimentos numéricos, con diferentes niveles de complejidad. Las principales conclusiones de este trabajo son las siguientes:

- La implementación lograda (usando Fortran 90 y OpenMP) es eficiente. La paralelización de los cálculos funciona de manera correcta para ambos esquemas, siendo CN-DIM-SPLIT ligeramente más rápido que RK2-TVD-DIM-SPLIT. Lo anterior permite que AdvDiff2D pueda ejecutarse en cualquier equipo personal de cómputo, incluso para altas resoluciones.
- El modelo AdvDiff2D es capaz de resolver de manera satisfactoria un amplio número de problemas de advección-difusión. Estos incluyen desde problemas lineales de advección y difusión puras, hasta problemas más complejos de difusión no lineal o que incluyan más de una variable ($\vec{\phi} = \{\phi_1, \dots, \phi_n\}$).
- Los resultados de los experimentos numéricos muestran que el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT es preferible para problemas predominantemente advectivos, mientras que CN-DIM-SPLIT es el más adecuado para el resto de los casos. Lo anterior le da flexibilidad a AdvDiff2D para adaptarse a un amplio espectro de situaciones.

Como trabajo futuro se propone publicar los resultados correspondientes al esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT y continuar añadiendo nuevas características al modelo. En concreto, se trabajará en la versión tridimensional del modelo (AdvDiff3D), así como en la paralelización de los cálculos a gran escala usando MPI.

Bibliografía

- [1] Y. N. Skiba, “A non-iterative implicit algorithm for the solution of advection–diffusion equation on a sphere,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 78, no. 5, pp. 257–282, 2015.
- [2] R. C. Cruz-Rodríguez, Y. N. Skiba, and D. M. Filatov, “An implicit direct unconditionally stable numerical algorithm for the solution of advection-diffusion equation on a sphere,” *Applied Numerical Mathematics*, vol. 142, pp. 1–15, 2019.
- [3] J. Pudykiewicz, “A predictive atmospheric tracer model,” *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, vol. 68, no. 2, pp. 213–225, 1990.
- [4] D. L. Williamson and P. J. Rasch, “Two-dimensional semi-lagrangian transport with shape-preserving interpolation,” *Monthly Weather Review*, vol. 117, no. 1, pp. 102–129, 1989.
- [5] P. J. Rasch and D. L. Williamson, “Computational aspects of moisture transport in global models of the atmosphere,” *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 116, no. 495, pp. 1071–1090, 1990.
- [6] H. Ritchie, “Application of a semi-lagrangian integration scheme to the moisture equation in a regional forecast model,” *Monthly Weather Review*, vol. 113, no. 4, pp. 424–435, 1985.
- [7] R. Tyson, L. Stern, and R. J. LeVeque, “Fractional step methods applied to a chemotaxis model,” *Journal of Mathematical Biology*, vol. 41, no. 5, pp. 455–475, 2000.
- [8] M. Kuhn, G. Latu, N. Crouseilles, and S. Genaud, “Parallelization of an advection-diffusion problem arising in edge plasma physics using hybrid mpi/openmp programming,” in *European Conference on Parallel Processing*, pp. 545–557, Springer, 2015.
- [9] J. Pétri, “A spectral method in space and time to solve the advection-diffusion and wave equations in a bounded domain,” *arXiv preprint arXiv:1401.1373*, 2014.
- [10] B. Bermúdez and L. Juárez, “Numerical solution of an advection-diffusion equation,” *Información Tecnológica*, vol. 25, no. 1, pp. 151–160, 2014.

- [11] C. Ollivier-Gooch and M. Van Altena, “A high-order-accurate unstructured mesh finite-volume scheme for the advection–diffusion equation,” *Journal of Computational Physics*, vol. 181, no. 2, pp. 729–752, 2002.
- [12] J. A. Pudykiewicz, “Numerical solution of the reaction–advection–diffusion equation on the sphere,” *Journal of Computational Physics*, vol. 213, no. 1, pp. 358–390, 2006.
- [13] Q. Zhang, H. Johansen, and P. Colella, “A fourth-order accurate finite-volume method with structured adaptive mesh refinement for solving the advection-diffusion equation,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 34, no. 2, pp. B179–B201, 2012.
- [14] Y. N. Skiba and D. M. Filatov, “An efficient numerical method for the solution of nonlinear diffusion equations on a sphere,” in *Advances in Mathematics Research* (A. R. Baswell, ed.), vol. 18, pp. 271–298, Nova Science Publishers, New York, 2013.
- [15] Y. N. Skiba and D. M. Filatov, “Numerical modelling of nonlinear diffusion phenomena on a sphere,” in *Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications* (N. Pina, J. Kacprzyk, and J. Filipe, eds.), vol. 197 of *Advances in Intelligent Systems and Computing*, pp. 57–70, Springer-Verlag, Berlin, 2013.
- [16] C. Landsberg and A. Voigt, “A multigrid finite element method for reaction-diffusion systems on surfaces,” *Computing and Visualization in Science*, vol. 13, no. 4, pp. 177–185, 2010.
- [17] E. S. Oran and J. P. Boris, *Numerical simulation of reactive flow*. Cambridge University Press, 2005.
- [18] W. Hundsdorfer and J. G. Verwer, *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, vol. 33 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [19] L. Dagum and R. Menon, “Openmp: An industry-standard api for shared-memory programming,” *Computing in Science & Engineering*, no. 1, pp. 46–55, 1998.
- [20] D. W. Walker and J. J. Dongarra, “Mpi: a standard message passing interface,” *Supercomputer*, vol. 12, pp. 56–68, 1996.
- [21] A. Jeffrey and H. H. Dai, *Handbook of mathematical formulas and integrals*. Elsevier, 2008.
- [22] B. Cushman-Roisin and J.-M. Beckers, *Introduction to geophysical fluid dynamics: physical and numerical aspects*. Academic Press, 2011.
- [23] R. B. Rood, “Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models,” *Reviews of Geophysics*, vol. 25, no. 1, pp. 71–100, 1987.

- [24] A. Fick, “V. on liquid diffusion,” *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 10, no. 63, pp. 30–39, 1855.
- [25] M. Sofiev *et al.*, “Turbulent diffusion and turbulent thermal diffusion of aerosols in stratified atmospheric flows,” *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, vol. 114, no. D18, 2009.
- [26] T. Shimazaki, “Effective eddy diffusion coefficient and atmospheric composition in the lower thermosphere,” *Journal of Atmospheric and Terrestrial Physics*, vol. 33, no. 9, pp. 1383–1401, 1971.
- [27] R. Roper and J. Brosnahan, “Imaging doppler interferometry and the measurement of atmospheric turbulence,” *Radio Science*, vol. 32, no. 3, pp. 1137–1148, 1997.
- [28] A. D. Polyanin and V. E. Nazaikinskii, *Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists*. Chapman and Hall/CRC, 2015.
- [29] A. Kolmogorov and S. Fomin, *Elements of Functions Theory and Functional Analysis*. Nauka Publishers, 1976.
- [30] O. A. Ladyzhenskaya, *The boundary value problems of mathematical physics*, vol. 49. Springer Science & Business Media, 2013.
- [31] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education, 2007.
- [32] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy, “Über die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik,” *Mathematische Annalen*, vol. 100, no. 1, pp. 32–74, 1928.
- [33] S. K. Lele, “Compact finite difference schemes with spectral-like resolution,” *Journal of Computational Physics*, vol. 103, no. 1, pp. 16–42, 1992.
- [34] M. F. Dixon and K. Tan, “Distributed solution of high-order compact difference schemes for multidimensional convection-diffusion equations,” in *International Conference on Computational Science and Its Applications*, pp. 226–235, Springer, 2003.
- [35] P. NA, “A map projection system suitable for large-scale numerical weather prediction,” *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II*, vol. 35, pp. 262–267, 1957.
- [36] R. Sadourny, “Conservative finite-difference approximations of the primitive equations on quasi-uniform spherical grids,” *Monthly Weather Review*, vol. 100, no. 2, pp. 136–144, 1972.
- [37] R. Sadourny, A. Arakawa, and Y. Mintz, *Integration of the nondivergent barotropic vorticity equation with an icosahedral-hexagonal grid for the sphere*. Citeseer, 1968.
- [38] Y. Kurihara, “Numerical integration of the primitive equations on a spherical grid,” *Mon. Wea. Rev.*, vol. 93, no. 7, pp. 399–415, 1965.

- [39] P. N. Swarztrauber, “Multiprocessor ffts,” *Parallel Computing*, vol. 5, no. 1-2, pp. 197–210, 1987.
- [40] R. Buizza, “The new 80-km high-resolution ecmwf eps,” *ECMWF Newsletter*, vol. 90, pp. 2–9, 2001.
- [41] M. Hortal and A. Simmons, “Use of reduced gaussian grids in spectral models,” *Monthly Weather Review*, vol. 119, no. 4, pp. 1057–1074, 1991.
- [42] J. Hack and R. Jakob, “Description of a global shallow water model based on the spectral transform method, near technical note,” tech. rep., NCAR/TN-343+ STR, 1992.
- [43] I. T. Foster and P. H. Worley, “Parallel algorithms for the spectral transform method,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 18, no. 3, pp. 806–837, 1997.
- [44] C. Temperton, “Can spectral methods on the sphere live forever,” in *Proceedings ECMWF Workshop on Developments in Numerical Methods for very High Resolution Global Methods*, pp. 161–166, 2000.
- [45] S. R. M. Barros, D. Dent, L. Isaksen, G. Robinson, G. Mozdzyński, and F. Wollenweber, “The ifs model: A parallel production weather code,” *Parallel Computing*, vol. 21, no. 10, pp. 1621–1638, 1995.
- [46] J. Côté *et al.*, “The operational cmc–mrb global environmental multiscale (gem) model. part i: Design considerations and formulation,” *Monthly Weather Review*, vol. 126, no. 6, pp. 1373–1395, 1998.
- [47] H. Ritchie *et al.*, “Implementation of the semi-lagrangian method in a high-resolution version of the ecmwf forecast model,” *Monthly Weather Review*, vol. 123, no. 2, pp. 489–514, 1995.
- [48] T Davies *et al.*, “A new dynamical core for the met office’s global and regional modelling of the atmosphere,” *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A journal of the atmospheric sciences, applied meteorology and physical oceanography*, vol. 131, no. 608, pp. 1759–1782, 2005.
- [49] R. D. Nair and B. Machenhauer, “The mass-conservative cell-integrated semi-lagrangian advection scheme on the sphere,” *Monthly Weather Review*, vol. 130, no. 3, pp. 649–667, 2002.
- [50] D. Chen *et al.*, “New generation of multi-scale nwp system (grapes): general scientific design,” *Chinese Science Bulletin*, vol. 53, no. 22, pp. 3433–3445, 2008.
- [51] R. Bubnová *et al.*, “Integration of the fully elastic equations cast in the hydrostatic pressure terrain-following coordinate in the framework of the arpege/aladin nwp system,” *Monthly Weather Review*, vol. 123, no. 2, pp. 515–535, 1995.

- [52] M. Tolstykh, “Semi-lagrangian high-resolution model of the atmosphere for numerical weather prediction,” *Russian Meteorology and Hydrology*, no. 4, pp. 1–9, 2001.
- [53] M. Nakagawa, “Outline of the high resolution global model at the japan meteorological agency,” *RSMC Tokyo-Typhoon Center Technical Review*, vol. 11, pp. 1–13, 2009.
- [54] R. J. LeVeque, “Large time step shock-capturing techniques for scalar conservation laws,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 19, no. 6, pp. 1091–1109, 1982.
- [55] Y. Brenier, “Averaged multivalued solutions for scalar conservation laws,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 21, no. 6, pp. 1013–1037, 1984.
- [56] A. C. Petersen *et al.*, “An evaluation and intercomparison of four new advection schemes for use in global chemistry models,” *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, vol. 103, no. D15, pp. 19253–19269, 1998.
- [57] A. Priestley, “A quasi-conservative version of the semi-lagrangian advection scheme,” *Monthly Weather Review*, vol. 121, no. 2, pp. 621–629, 1993.
- [58] J. Bates, S. Moorthi, and R. Higgins, “A global multilevel atmospheric model using a vector semi-lagrangian finite-difference scheme. part i: Adiabatic formulation,” *Monthly weather review*, vol. 121, no. 1, pp. 244–263, 1993.
- [59] D. L. Williamson and P. J. Rasch, “Water vapor transport in the ncar ccm2,” *Tellus A*, vol. 46, no. 1, pp. 34–51, 1994.
- [60] J. P. Boris and D. L. Book, “Flux-corrected transport. i. shasta, a fluid transport algorithm that works,” *Journal of Computational Physics*, vol. 11, no. 1, pp. 38–69, 1973.
- [61] J. P. Boris and D. Book, “Solution of continuity equations by the method of flux-corrected transport,” *Controlled Fusion*, pp. 85–129, 1976.
- [62] B. Van Leer, “Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity,” in *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, pp. 163–168, Springer, 1973.
- [63] B. Van Leer, “Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme,” *Journal of Computational Physics*, vol. 14, no. 4, pp. 361–370, 1974.
- [64] B. Van Leer, “Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection,” *Journal of Computational Physics*, vol. 23, no. 3, pp. 276–299, 1977.
- [65] A. Harten, “High resolution schemes for hyperbolic conservation laws,” *Journal of Computational Physics*, vol. 135, no. 2, pp. 260–278, 1997.

- [66] P. K. Sweby, “High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 21, no. 5, pp. 995–1011, 1984.
- [67] P. L. Roe, “Some contributions to the modelling of discontinuous flows,” *Large-Scale Computations in Fluid Mechanics*, pp. 163–193, 1985.
- [68] S. Osher and S. Chakravarthy, “High resolution schemes and the entropy condition,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 21, no. 5, pp. 955–984, 1984.
- [69] P. J. Rasch, “Conservative shape-preserving two-dimensional transport on a spherical reduced grid,” *Monthly Weather Review*, vol. 122, no. 6, pp. 1337–1350, 1994.
- [70] D. Majewski *et al.*, “The operational global icosahedral–hexagonal gridpoint model gme: Description and high-resolution tests,” *Monthly Weather Review*, vol. 130, no. 2, pp. 319–338, 2002.
- [71] F. X. Giraldo and T. E. Rosmond, “A scalable spectral element eulerian atmospheric model (see-am) for nwp: Dynamical core tests,” *Monthly Weather Review*, vol. 132, no. 1, pp. 133–153, 2004.
- [72] M. Rančić, R. Purser, and F. Mesinger, “A global shallow-water model using an expanded spherical cube: Gnomonic versus conformal coordinates,” *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 122, no. 532, pp. 959–982, 1996.
- [73] L. M. Harris, P. H. Lauritzen, and R. Mittal, “A flux-form version of the conservative semi-lagrangian multi-tracer transport scheme (cslam) on the cubed sphere grid,” *Journal of Computational Physics*, vol. 230, no. 4, pp. 1215–1237, 2011.
- [74] A. Staniforth and J. Thuburn, “Horizontal grids for global weather and climate prediction models: a review,” *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 138, no. 662, pp. 1–26, 2012.
- [75] G. Strang, “On the Construction and Comparison of Difference Schemes,” *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 5, no. 3, pp. 506–517, 1968.
- [76] G. I. Marchuk, *Methods of Numerical Mathematics*. Springer, New York, 1982.
- [77] J. Crank and P. Nicolson, “A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type,” *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 43, no. 01, pp. 50–67, 1947.
- [78] P. D. Lax and R. D. Richtmyer, “Survey of the stability of linear finite difference equations,” *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 9, no. 2, pp. 267–293, 1956.

- [79] L. H. Thomas, “Elliptic problems in linear difference equations over a network,” *Watson Sci. Comput. Lab. Rept., Columbia University, New York*, vol. 1, 1949.
- [80] J. Sherman and W. J. Morrison, “Adjustment of an inverse matrix corresponding to changes in the elements of a given column or a given row of the original matrix,” *Annals of Mathematical Statistics*, vol. 20, no. 4, pp. 620–624, 1949.
- [81] J. Sherman and W. J. Morrison, “Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix,” *The Annals of Mathematical Statistics*, vol. 21, no. 1, pp. 124–127, 1950.
- [82] W. H. Press *et al.*, *Numerical recipes 3rd edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007.
- [83] G. D. Van Albada, B. Van Leer, and W. Roberts, “A comparative computational methods in cosmic gas dynamics,” *Astron. Astrophys.*, vol. 108, pp. 76–84, 1982.
- [84] B. P. Leonard, “Simple high-accuracy resolution program for convective modelling of discontinuities,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 8, no. 10, pp. 1291–1318, 1988.
- [85] F.-S. Lien and M. Leschziner, “Upstream monotonic interpolation for scalar transport with application to complex turbulent flows,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 19, no. 6, pp. 527–548, 1994.
- [86] S. Prabhakaran and L. J. T. Doss, “Total variation diminishing finite volume schemes for one dimensional advection-diffusion equation and the relationship between flux limiter and mesh parameters,” *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, vol. 101, no. 2, pp. 233–250, 2015.
- [87] P. Virtanen *et al.*, “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python,” *Nature Methods*, vol. 17, pp. 261–272, 2020.
- [88] J. D. Hunter, “Matplotlib: A 2d graphics environment,” *Computing in Science & Engineering*, vol. 9, no. 3, pp. 90–95, 2007.
- [89] Met Office, *Cartopy: a cartographic python library with a matplotlib interface*. Exeter, Devon, 2010 - 2015.
- [90] Y. N. Skiba and R. C. Cruz-Rodríguez, “Application of splitting algorithm for solving advection-diffusion equation on a sphere,” in *Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2018*, pp. 285–290, Springer, 2019.

- [91] Y. Skiba, D. Filatov, and R. C. Cruz-Rodríguez, “Direct implicit schemes for problems of linear advection-diffusion and nonlinear diffusion on a sphere,” in *Horizons in World Physics* (A. Reimer, ed.), vol. 302, ch. 8, pp. 197–243, New York, USA: Nova Science Publishers, Inc., 01 2020.
- [92] R. D. Nair and P. H. Lauritzen, “A class of deformational flow test cases for linear transport problems on the sphere,” *Journal of Computational Physics*, vol. 229, no. 23, pp. 8868–8887, 2010.
- [93] D. L. Williamson *et al.*, “A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry,” *Journal of Computational Physics*, vol. 102, no. 1, pp. 211–224, 1992.
- [94] P. H. Lauritzen *et al.*, “A standard test case suite for two-dimensional linear transport on the sphere,” *Geoscientific Model Development*, vol. 5, no. 3, pp. 887–901, 2012.
- [95] A. A. Samarskii, “Non linear effects of blow up and localization processes in burning problems,” in *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics* (C. M. Brauner and C. Schmidt-Laine, eds.), pp. 217–231, Martinus Nijhoff Publishers, Belgium, 1988.
- [96] I. M. Makarov, ed., *Blow-up regimes. Evolution of an idea: Laws of coevolution of complex structures (Cybernetics: unlimited possibilities and potential limitations)*. Nauka, Moscow, 1999.
- [97] S. P. Kurdyumov, *Regimes with Blow-up*. Fizmatlit, Moscow, 2006.
- [98] Y. N. Skiba and D. M. Filatov, “Modelling of combustion and diverse blow-up regimes in a spherical shell,” in *Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2016* (P. Quintela *et al.*, eds.), vol. 26, pp. 729–735, Springer, Heidelberg, 2017.
- [99] P. V. Trusov, ed., *Introduction to Mathematical Modelling*. Logos, Moscow, 2004.
- [100] J. S. McGough and K. Riley, “Pattern formation in the gray–scott model,” *Nonlinear Analysis: Real World Applications*, vol. 5, no. 1, pp. 105–121, 2004.
- [101] Y. N. Skiba, R. C. Cruz-Rodríguez, and D. M. Filatov, “Solution of the linear and nonlinear advection–diffusion problems on a sphere,” *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, vol. 36, no. 6, pp. 1922–1937, 2020.
- [102] M. Campisi, “On the mechanical foundations of thermodynamics: The generalized Helmholtz theorem,” *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, vol. 36, no. 2, pp. 275–290, 2005.

Anexos A

A.1 Viento no divergente a partir de observaciones reales

Consideremos el campo de viento \mathbf{V} , que en general es divergente ($\text{div}\mathbf{V} \neq 0$). \mathbf{V} puede ser obtenido a partir de observaciones reales, reanálisis o de cualquier otra fuente.

Según el teorema de Helmholtz [102], \mathbf{V} puede ser escrito como

$$\mathbf{V} = -\nabla \cdot \Phi + \nabla \times \mathbf{A}, \quad (\text{A.1})$$

donde los términos $-\nabla \cdot \Phi$ y $\nabla \times \mathbf{A}$ representan las partes divergente y no divergente del vector \mathbf{V} . Aplicando el operador ∇ en ambos lados de la ecuación anterior se obtiene que

$$\begin{aligned} \text{div}\mathbf{V} &= -\nabla^2 \cdot \Phi + \text{div}\{\nabla \times \mathbf{A}\}, \\ \text{div}\mathbf{V} &= -\nabla^2 \cdot \Phi. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

El término Φ puede ser obtenido resolviendo el correspondiente problema elíptico (A.2). Finalmente, usando la ecuación (A.1) se llega a:

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} + \nabla \cdot \Phi, \quad (\text{A.3})$$

donde el vector $\mathbf{U} = \nabla \times \mathbf{A}$ es no divergente por definición.

A.2 RK2-TVD-DIM-SPLIT con distintas funciones limitadoras

Las figuras A.2, A.3 y A.4 muestran los resultados obtenidos al usar el esquema RK2-TVD-DIM-SPLIT con las distintas funciones limitadoras de la tabla 2.1. Este experimento coincide con *exp_adv03* (ver: *Advección con viento variable (exp_adv03)*, sección 3.2.1). La figuras A.2 y A.3 corresponden a los resultados obtenidos con las condiciones iniciales $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ y $\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x})$, mientras que la figura A.4 corresponde a la condición inicial:

$$\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{para } r_i \leq 1/2, |\lambda - \lambda_i| \geq 1/12; i = 0, 1 \\ 1 & \text{para } r_0 \leq 1/2, |\lambda - \lambda_0| < 1/12, \vartheta_1 - \vartheta < -5/24 \\ 1 & \text{para } r_1 \leq 1/2, |\lambda - \lambda_1| < 1/12, \vartheta_2 - \vartheta > 5/24 \\ 0.1 & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (\text{A.4})$$

donde $r_i = \rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$, $\mathbf{x}_0 = (150^\circ, 90^\circ)$ y $\mathbf{x}_1 = (210^\circ, 90^\circ)$ (ver Fig. A.1).

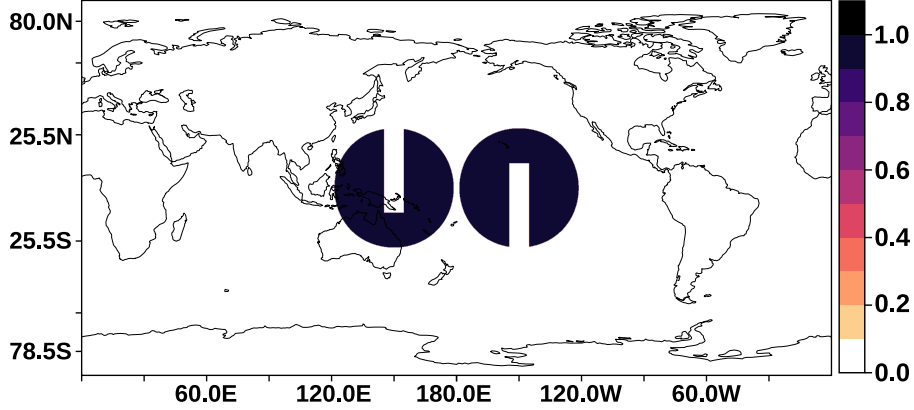


Fig. A.1: Condición inicial $\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x})$.

Note que $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x}) \in C^\infty$, $\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x}) \in C^1$, mientras que $\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x})$ es una función discontinua. Las figuras A.2 y A.3 muestran que la función limitadora QUICK obtiene los mejores resultados para $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$ y $\phi^{\text{cos}}(\mathbf{x})$, tanto en el error de la solución como en la preservación de la norma L_2 . Por otra parte, SUPERBEE es la mejor opción para la condición inicial discontinua $\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x})$.

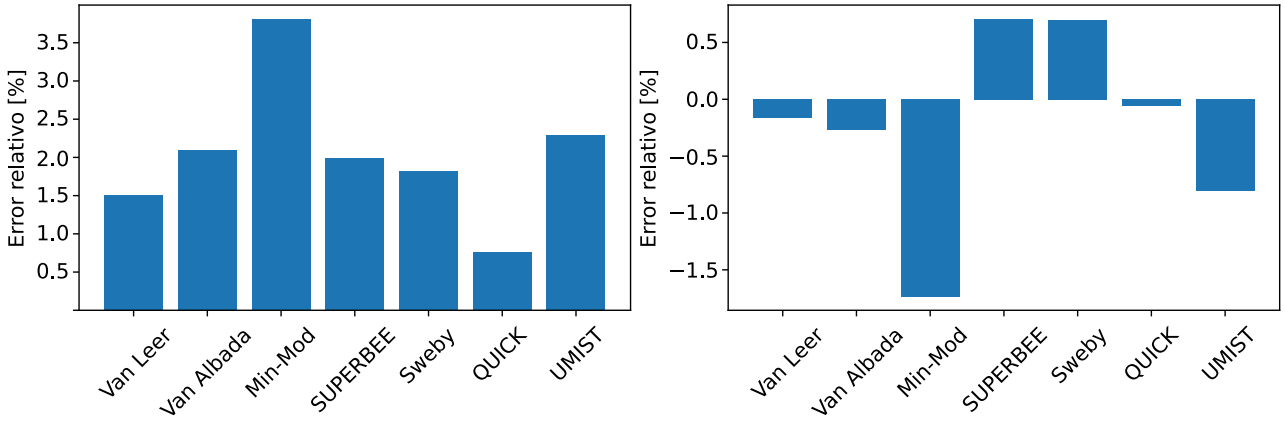


Fig. A.2: Resultados para $\phi^{\text{gauss}}(\mathbf{x})$, a) error en la solución, b) error en la norma L_2 .

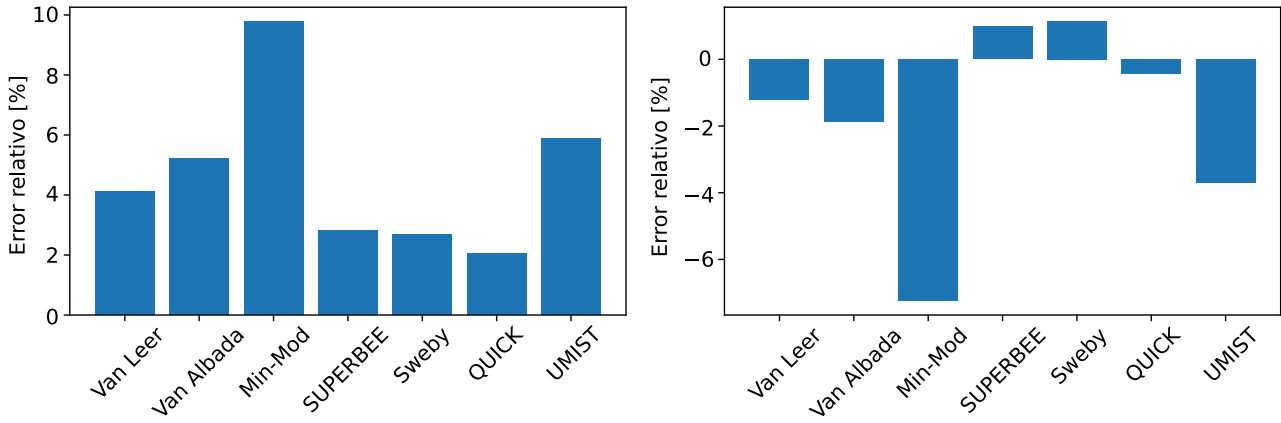


Fig. A.3: Resultados para $\phi^{\cos}(\mathbf{x})$, a) error en la solución, b) error en la norma L_2 .

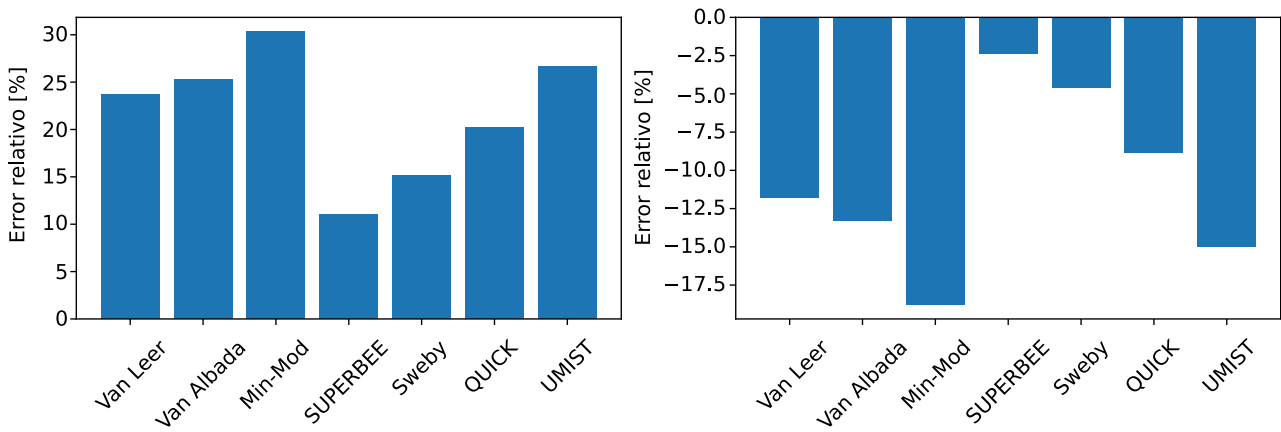


Fig. A.4: Resultados para $\phi^{\text{cylinders}}(\mathbf{x})$, a) error en la solución, b) error en la norma L_2 .