

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS MATEMATICAS

Departamento de Matemática Aplicada



**CONDICIONES DE CONTORNO
NO REFLECTANTES**

**MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR**

Bárbara Tapiador Fernández

Bajo la dirección de la doctora

Ana María Carpio Rodríguez

Madrid, 2009

ISBN:978-84-692-6749-3

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

TESIS DOCTORAL

CONDICIONES DE CONTORNO
NO REFLECTANTES

Doctoranda: **Bárbara Tapiador Fernández**

Directora: **Ana María Carpio Rodríguez**

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA

2008

A mis padres.

Habría sido imposible realizar esta tesis sin la ayuda de mi directora de tesis Ana Carpio que, sin conocerme, me aceptó como alumna proponiéndome interesantes temas de investigación. Ha estado a mi disposición siempre que la he necesitado y ha sabido guiarme a lo largo de este trabajo convirtiéndolo en algo muy agradable y por supuesto interesantísimo; no podría haberlo hecho mejor. Quiero agradecerle sinceramente toda su dedicación.

Tampoco hubiera sido posible realizar esta memoria sin Antonio López, mi profesor de *Análisis Numérico de Ecuaciones Diferenciales* durante la licenciatura. Fue en sus clases donde aprendí la belleza de la Matemática Aplicada y las interesantes aportaciones que pueden hacerse a través de ella y el Análisis Numérico. Además, él fue quien me puso en contacto con Ana cuando decidí comenzar mis estudios de doctorado. Espero seguir trabajando con ellos muchos años.

También quiero agradecer a Luis Bonilla, de la Universidad Carlos III de Madrid, su apoyo por la concesión de una beca de colaboración. A través de ella pude ver montones de formas de escribir artículos, trabajos y exposiciones que seguro me han ayudado después con las mías propias.

Por supuesto no puedo olvidar a mi familia, mis padres, madres y hermanos, quienes me han dado incondicionalmente su confianza y apoyo a la hora de decidir dedicar mi esfuerzo a esto, tanto en los momentos fáciles como en los más difíciles de su desarrollo. Sin todos vosotros esta tesis no existiría.

En estas palabras de agradecimientos, tengo que acordarme también de mis amigos: de aquéllos que pertenecen al mundo de las Matemáticas, que siempre me han animado a seguir adelante, de aquéllos que no teniendo nada que ver con la Ciencia han insistido en que les explicara mi trabajo intentando, con todas sus fuerzas, comprender algo y, también de todos aquéllos que simplemente no entienden cómo se puede encontrar en las Matemáticas algo bello y apasionante y, aún así, me han apoyado.

Un agradecimiento muy especial se merece Víctor, que ha estado a mi lado animándome, apoyándome y ayudándome en todo momento con su cariño y su actitud. Espero que sigas estando ahí siempre, te quiero.

Muchas gracias a todos.

Índice general

1. Introducción	7
1.1. Condiciones transparentes y absorbentes	8
1.2. Capas perfectamente acopladas	15
1.3. Condiciones no reflectantes para dinámica molecular	17
1.4. Resultados obtenidos en esta tesis	19
2. Dinámica de burbujas en helio	23
2.1. Un modelo de cinética discreta.	27
2.2. Análisis asintótico.	33
2.2.1. Límite continuo y aproximación autosimilar.	34
2.2.2. Transformada de Laplace del sistema discreto.	38
2.3. Existencia y unicidad de soluciones.	46
2.3.1. Existencia local	47
2.3.2. Positividad	50
2.3.3. Existencia global	53
2.4. Tratamiento numérico.	54
2.4.1. Resultados teóricos.	54
2.4.2. Esquemas numéricos.	57
3. Ondas discretas unidimensionales	59
3.1. Funciones de Green	61
3.1.1. Ecuaciones de ondas discretas	61
3.1.2. Ecuaciones de Klein-Gordon discretas	63
3.1.3. Problemas con fricción	63
3.2. Condiciones de contorno exactas	66
3.3. Aproximación absorbente y resultados numéricos	69
3.3.1. Ecuación de ondas discreta	69

3.3.2.	Ecuación de Klein-Gordon discreta	71
3.3.3.	Ecuación de Frenkel-Kontorova	73
4.	Defectos en cristales	77
4.1.	Ecuación de ondas discreta en varias dimensiones	79
4.1.1.	Dimensión dos	79
4.1.2.	Dinámica no lineal de defectos	88
4.1.3.	Extensión a varias dimensiones	94
4.2.	Matrices de acoplamiento generales	96
4.2.1.	Funciones de Green	97
4.2.2.	Condiciones de contorno	98
5.	Capas perfectamente acopladas	101
5.1.	Ecuaciones de ondas discretas	102
5.1.1.	Dimensión dos	103
5.1.2.	Dimensión uno	108
5.2.	El sistema de elasticidad bidimensional	109
5.2.1.	Caso isótropo	111
5.2.2.	Caso anisótropo	113
5.3.	El sistema de elasticidad discreta	115
5.3.1.	Caso isótropo	117
5.3.2.	Caso anisótropo	118
5.3.3.	Test numérico	119
6.	Conclusiones	123
	Bibliografía	125

Capítulo 1

Introducción

En la simulación numérica de problemas de ondas en los que el dominio es no acotado o muy grande, es necesario truncar el problema a un dominio acotado de tamaño reducido sin alterar significativamente la solución. Se introduce una frontera artificial, en la cual se impone una condición artificial 'adecuada'. Las condiciones de contorno ideales han de reunir una serie de requisitos:

- El problema truncado con condiciones de contorno artificiales está bien puesto.
- La solución en el recinto truncado no sufre cambios cualitativos ni cuantitativos apreciables por la introducción de la nueva frontera.
- Se minimizan las reflexiones espúreas de ondas hacia el interior del recinto computacional que se producen por un cambio brusco en la descripción del sistema y en la ley de dispersión.
- Su cálculo no supone un incremento considerable del coste computacional.
- La discretización no se desestabiliza a tiempos largos.
- Son aplicables en casos en que los datos no tienen soporte compacto contenido en el recinto computacional sino que se extienden hasta el borde.

Este tipo de condiciones de contorno artificiales se denominan 'no reflejantes'.

El problema de suprimir reflexiones en fronteras artificiales se presenta en multitud de campos distintos. En las últimas décadas, se ha producido un progreso notable en problemas de propagación de ondas en medios continuos: elásticas, acústicas, electromagnéticas. Se recurre a tres tipos de condiciones: exactas (transparentes), locales aproximadas (absorbentes) y capas perfectamente acopladas. El diseño de condiciones de contorno no reflectantes para problemas espacialmente discretos, como los sistemas de dinámica molecular, está en sus comienzos y constituye el tema central de esta tesis.

Describimos a continuación en que consisten los tres tipos principales de condiciones no reflectantes.

1.1. Condiciones transparentes y absorbentes

Vamos a ilustrar el concepto de condición de contorno artificial en tres casos:

- La ecuación de ondas unidimensional.
- La ecuación de ondas bidimensional.
- Problemas armónicos.

Consideremos en primer lugar la ecuación de ondas unidimensional:

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = f, \tag{1.1}$$

con las condiciones iniciales:

$$u(x, 0) = u_0, \quad u_t(x, 0) = u_1.$$

Supongamos que $f = 0$ fuera de un intervalo $[0, L]$. Deseamos restringir el recinto computacional al intervalo $[0, L]$ sin generar reflexiones en las paredes artificiales hacia el interior del recinto computacional. Para ello, discriminaremos las ondas entrantes respecto de las salientes. Tenemos que

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0$$

y sabemos que la solución general de una ecuación de ondas homogénea tiene la forma:

$$u(x, t) = \varphi(x + ct) + \psi(x - ct),$$

es decir, es superposición de ondas que se propagan a la izquierda $\varphi(x + ct)$ y a la derecha $\psi(x - ct)$. Obsérvese que

$$\begin{aligned} 0 &= u_{tt} - c^2 u_{xx} = \left(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}\right)u, \\ 0 &= u_{tt} - c^2 u_{xx} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right)u. \end{aligned}$$

Las funciones $u_1 = \varphi(x + ct)$ cumplen $(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x})u_1 = 0$. Las funciones $u_2 = \varphi(x - ct)$ cumplen $(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x})u_1 = 0$.

Si vamos a restringir la computación al recinto $[0, L]$, al llegar una onda $\psi(x - ct)$ a la pared derecha $x = L$ no deseamos que rebote hacia el interior. Imponemos la condición de contorno:

$$(u_t + cu_x)|_{x=L} = 0.$$

Las funciones de la forma $\psi(x - ct)$ satisfacen esta condición y no se ven afectadas por ella. Son 'transparentes' a la condición de contorno y atraviesan la pared sin rebotar hacia adentro. Para evitar que una onda $\varphi(x + ct)$ que llegue a la pared izquierda $x = 0$ rebote contra ella, imponemos la condición:

$$(u_t - cu_x)|_{x=0} = 0.$$

Las ondas que viajan hacia la izquierda, satisfacen esta condición y no se ven afectadas por ella. Son 'transparentes' a la condición de contorno y salen por ella sin rebotar hacia adentro. Las ondas que viajan a la derecha (hacia el interior del recinto computacional) son eliminadas.

A continuación pasamos a estudiar la propagación de ondas en dos dimensiones. Expondremos las técnicas aplicadas por Madja y Engquist en [19] y [20]. Supongamos que los datos tienen soporte compacto en $x \geq 0$. Deseamos resolver

$$u_{tt} = u_{xx} + u_{yy}, \quad x \geq 0, \quad t > 0, \tag{1.2}$$

con una condición de contorno en la frontera artificial $x = 0$ que no produzca reflexiones hacia el interior del recinto computacional $x \geq 0$. Si la dinámica ondulatoria se genera dentro de esta región y fuera de él no hay mecanismos que puedan causar reflexiones hacia su interior, entonces la solución cerca de la frontera está compuesta únicamente por ondas salientes, de forma que la condición de contorno artificial ha de generar una radiación de energía que

sale del recinto. Extensiones a datos sin soporte compacto se formulan en [22]. La ecuación (1.2) admite como solución la onda plana:

$$u = e^{i(\tau x + \xi t + \omega y)}$$

para cualesquiera $\tau, \xi, \omega \in \mathbb{R}$ que cumplan la condición $\xi^2 = \tau^2 + \omega^2$. Despejando τ tendremos la expresión de las ondas que viajan hacia la izquierda (salientes) y hacia la derecha (entrantes):

$$\begin{aligned} u &= e^{i(\sqrt{\xi^2 - \omega^2}x + \xi t + \omega y)}, & (\text{saliente}) \\ u &= e^{i(-\sqrt{\xi^2 - \omega^2}x + \xi t + \omega y)}, & (\text{entrante}) \end{aligned}$$

con $\xi^2 - \omega^2 > 0$. También podemos expresar dichas ondas como:

$$\begin{aligned} u &= e^{i\xi(\sqrt{(1-\frac{\omega^2}{\xi^2})x + \frac{\omega}{\xi}y})} e^{it}, \\ u &= e^{i\xi(-\sqrt{(1-\frac{\omega^2}{\xi^2})x + \frac{\omega}{\xi}y})} e^{it}, \end{aligned}$$

donde ξ representa la frecuencia y, si $\frac{\omega}{\xi} = \sin \theta$, el ángulo de incidencia en $x = 0$ es precisamente θ . Nos interesa suprimir las ondas entrantes y que sólo atraviesen la frontera artificial las ondas salientes, para ello impondremos la condición de contorno:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} - i\xi \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\xi^2}} \right] u \Big|_{x=0} = 0. \quad (1.3)$$

Las ondas salientes son solución de esta ecuación y atraviesan la frontera sin reflejarse. Las ondas entrantes no son solución y son eliminadas por esta condición.

En general, la condición de contorno exacta no reflectante se obtiene como superposición de condiciones de contorno para estas ondas planas:

$$\mathcal{F}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) - i\xi \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\xi^2}} \mathcal{F}(u) = 0, \quad x = 0, \quad (1.4)$$

donde \mathcal{F} denota la transformada de Fourier en tiempo y espacio. (1.4) es la condición de contorno transparente para la ecuación de ondas bidimensional en la pared que estamos considerando. La implementación numérica de estas

condiciones es costosa, pues requiere la discretización de la integral en tiempo y espacio para cada nivel de tiempo y la acumulación de datos desde el instante inicial. Los esquemas resultantes se suelen desestabilizar a tiempos largos, por lo que no son muy útiles en la práctica. Además, no podemos invertir directamente la transformada de Fourier debido a la aparición de la raíz cuadrada.

Reemplazando los núcleos $\sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\xi^2}}$ por un desarrollo de Taylor o Padé para $\frac{\omega^2}{\xi^2}$ pequeño se obtienen condiciones de contorno aproximadas en las que las transformadas se pueden invertir. Son por tanto locales, aunque suelen dar lugar a problemas mal puestos y no suprimen las reflexiones en todas las direcciones (debido a la aproximación de la raíz). Listamos a continuación algunas condiciones que dan lugar a discretizaciones estables a tiempos largos [19, 23, 38]:

$$u_t - u_x = 0, \quad \text{orden uno,} \quad (1.5)$$

$$u_{tt} = u_{xt} + \frac{1}{2}u_{yy}, \quad \text{orden dos.} \quad (1.6)$$

Son las denominadas condiciones de contorno absorbentes.

Las Figuras 1.1-1.3 comparan la evolución de una onda saliente en una red con los resultados obtenidos al truncar el recinto computacional e imponer distintos tipos de condiciones de contorno. El dato inicial en todos los casos es una gaussiana centrada en el origen. En la Figura 1.1 se resuelve la ecuación de ondas en un recinto varias veces mayor que el recinto computacional elegido, $[-10, 10] \times [-10, 10]$, de modo que la solución restringida a este pequeño recinto se puede considerar exacta y es independiente de las condiciones de contorno impuestas en los bordes del recinto grande. En la Figura 1.2 se imponen condiciones de contorno periódicas en los bordes del recinto truncado. Se observan grandes reflexiones. Tan pronto la onda llega a las fronteras artificiales, la solución numérica deja de tener valor práctico alguno. En la Figura 1.3 se imponen condiciones de contorno absorbentes de tipo (1.5) en los bordes del recinto truncado. En la pared derecha el signo de u_x cambia (como ocurría en dimensión uno): $u_t + u_x = 0$. En las paredes horizontales u_y reemplaza a u_x : $u_t \pm u_y = 0$. Se observan reflexiones pequeñas. La solución dentro del recinto truncado se parece más a la solución exacta, descrita en la Figura 1.1. Si se usan condiciones absorbentes de orden más alto, como (1.6), el parecido con la solución exacta se incrementa.

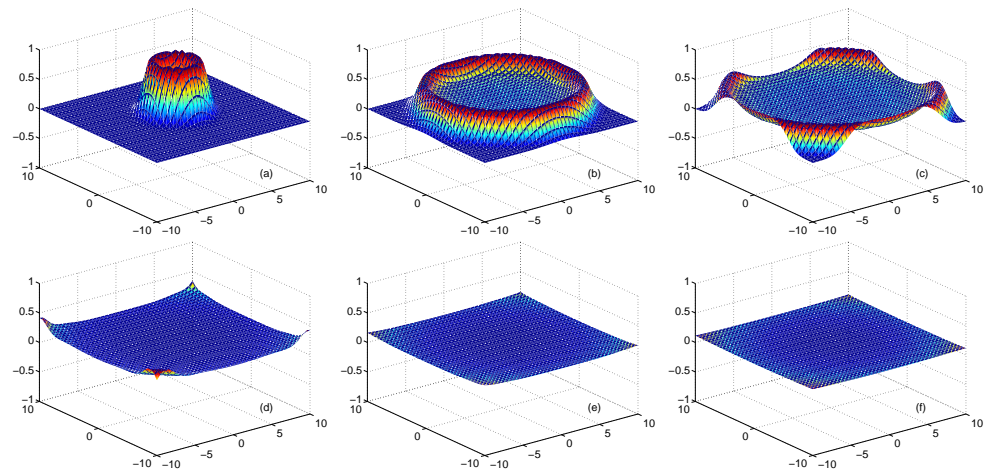


Figura 1.1: (a),(b),(c) onda saliente y (d),(e),(f) aspecto de la región a la cual se va a restringir la computación una vez ha salido esta onda de ella.

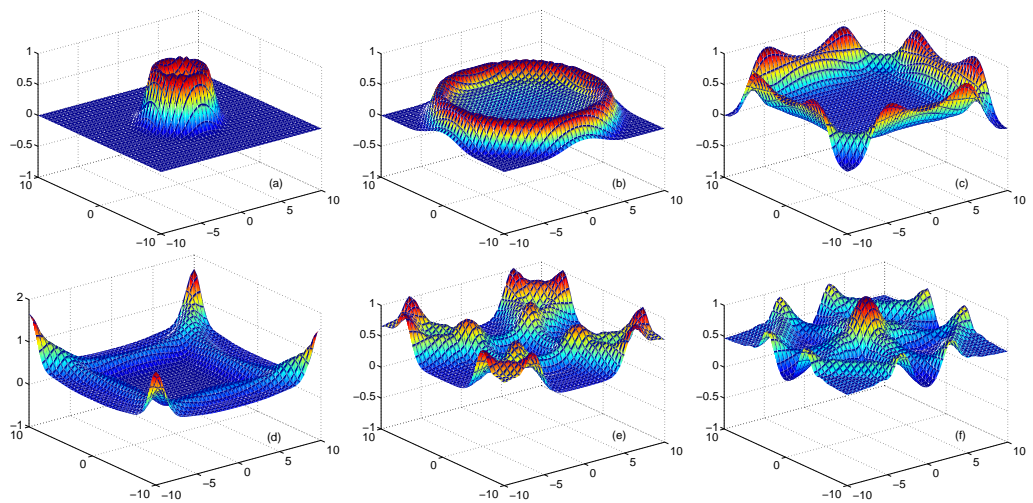


Figura 1.2: Evolución de la onda saliente cuando se colocan paredes artificiales en los bordes del recinto al cual se ha restringido la computación imponiendo en ellas condiciones periódicas. Las figuras (a)-(f) corresponden exactamente a los mismos instantes de tiempo que sus análogas en la figura 1.

Todas las condiciones no reflectantes propuestas para problemas continuos han de ser discretizadas en tiempo y espacio para su implementación

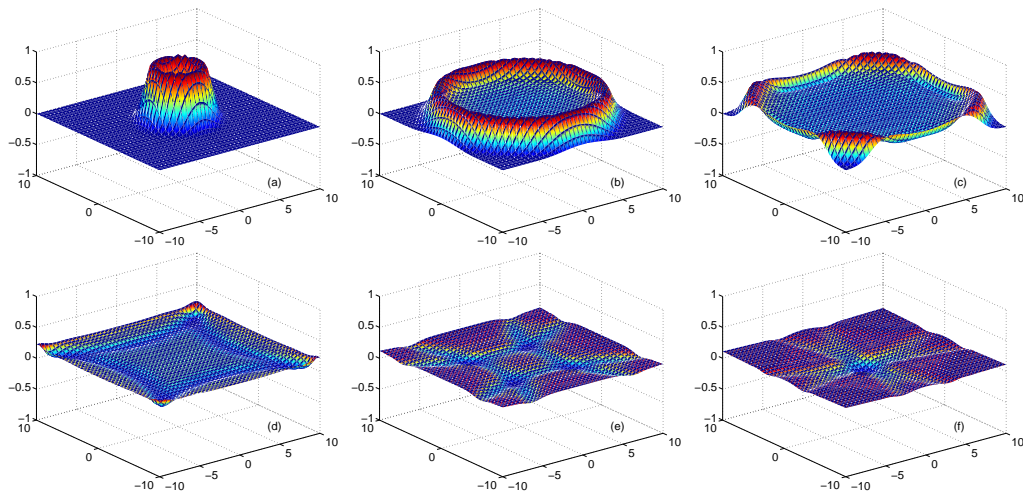


Figura 1.3: Evolución de la onda saliente cuando se colocan paredes artificiales en los bordes del recinto al cual se ha restringido la computación imponiendo en ellas condiciones absorbentes de orden bajo de tipo (1.5). Las figuras (a)-(f) corresponden exactamente a los mismos instantes de tiempo que sus análogas en las figuras 1 y 2.

numérica. En la ecuación de ondas se suele recurrir a aproximaciones en diferencias finitas. Las leyes de dispersión de los problemas continuos y sus discretizaciones son distintas, luego las ondas reflejadas en ambos son distintas. Al discretizar la ecuación y las condiciones de contorno, aparecen reflexiones en las paredes de diversa magnitud, ya que se reemplazan las ecuaciones continuas por las discretas. Las condiciones no reflectantes para el problema continuo pueden no serlo para el problema discreto. En casos muy particulares se han derivado condiciones no reflectantes directamente para el problema discretizado en tiempo y espacio. Por ejemplo, en [35] se obtienen condiciones no reflectantes para discretizaciones de ecuaciones de ondas en tres dimensiones que son difíciles de extender, no ya a otras ecuaciones, sino a otras dimensiones. Otra estrategia usada en el caso de ecuaciones de ondas consiste en buscar formas de discretizar las condiciones de contorno no reflectantes del problema continuo de forma que se minimizen las reflexiones [26] en la aproximación discreta.

Cuando la dependencia respecto al tiempo es armónica, las condiciones de contorno no reflectantes tienen una estructura un poco diferente de la que hemos descrito hasta ahora. En el estudio de la propagación de ondas

armónicas se buscan soluciones de la forma $e^{ikt}u(x)$ y la ecuación de ondas se reduce a la ecuación de Helmholtz:

$$\Delta u + k^2 u = 0, \quad x \in \mathbb{R}^2.$$

Se trata ahora de un problema elíptico en un dominio infinito. Se suele trincar los dominios infinitos a bolas. Condiciones de contorno exactas en la frontera de la bola y discretizaciones absorbentes se obtienen a partir del operador de Dirichlet-Neumann, introducido por Keller [25, 24, 29]. Elegimos un círculo Γ_R centrado en el origen con radio R suficientemente grande. El operador Dirichlet-Neumann asocia a cualquier dato Dirichlet sobre Γ_R la derivada normal de la solución del problema exterior de Dirichlet:

$$\begin{aligned} L : H^{1/2}(\Gamma_R) &\longrightarrow H^{-1/2}(\Gamma_R) \\ f &\longmapsto \partial_{\mathbf{n}} w \end{aligned}$$

siendo $w \in H_{loc}^1(\mathbb{R}^2 \setminus \overline{B}_R)$ la única solución de

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta w + kw = 0, & \text{in } \mathbb{R}^2 \setminus \overline{B}_R, \\ w = f, & \text{on } \Gamma_R, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} r^{1/2}(\partial_r w - ikw) = 0. \end{array} \right.$$

Se puede dar una expresión explícita de este operador en términos de series de funciones especiales (Hankel en dimensión dos, armónicos esféricos en dimensión tres) [29]. Truncando la serie se obtienen aproximaciones locales absorbentes.

En esta tesis vamos a considerar modelos para redes atómicas que en algunos casos se pueden considerar ecuaciones de ondas discretizadas en espacio pero no en tiempo:

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \\ M \frac{d^2 u_{n,m}}{dt^2} &= K(u_{n,m+1} + u_{n+1,m} - 4u_{n,m} + u_{n-1,m} + u_{n,m-1}), \end{aligned}$$

por ejemplo. Vamos a derivar condiciones de contorno exactas para este tipo de problemas de evolución discretos en espacio construyendo operadores discretos análogos a los operadores Dirichlet-Neumann continuos que se usan en el estudio de la propagación de ondas armónicas. El procedimiento tiene carácter general y se extiende con facilidad a problemas que involucran operadores discretos más complejos, o a problemas vectoriales.

1.2. Capas perfectamente acopladas

Las condiciones de contorno exactas (transparentes) en problemas que dependen del tiempo, involucran integrales en tiempo (lo que excluye el uso de pasos de tiempo variables) y funciones de Green (también en forma integral). Numéricamente, su uso conlleva un coste computacional grande. Aún peor, se desestabilizan fácilmente. Sus discretizaciones absorbentes son menos costosas, pero pueden ser igualmente difíciles de estabilizar y no suprimen las ondas en todas las direcciones. Una alternativa menos cara y más fácil de estabilizar son las capas perfectamente acopladas. La idea de capa perfectamente acoplada introducida para problemas continuos consiste en añadir una región fuera del recinto computacional que amortigua las ondas generadas en el borde sin que lleguen a rebotar hacia el interior. Esta idea funciona satisfactoriamente en electromagnetismo [6] y se ha extendido a problemas de fluidos y elasticidad [17].

Para diseñar estas capas, las ecuaciones de ondas se escriben como un sistema hiperbólico de primer orden [17]. Consideremos un sistema de la forma

$$\partial_t u - A\partial_x u - B\partial_y u = 0. \quad (1.7)$$

en un recinto en el que $x \leq 0$ y supongamos que queremos introducir una capa absorbente a la derecha de $x = 0$. Primeramente escribimos el sistema (1.7) de forma equivalente pero separando las componentes paralela y perpendicular a la interfaz $x = 0$:

$$u = u^{\parallel} + u^{\top}, \quad (1.8)$$

$$\partial_t u^{\top} - A\partial_x u = 0, \quad (1.9)$$

$$\partial_t u^{\parallel} - B\partial_y u = 0. \quad (1.10)$$

Ahora introducimos un factor de disipación $d(x)$ en la región $x \geq 0$ y en la dirección perpendicular a la interfaz. La ecuación (1.9) queda:

$$\partial_t u^{\top} + d(x)u^{\top} - A\partial_x u = 0. \quad (1.11)$$

Lo que buscamos es una solución del problema inicial pero que, para x mayores que cero, cumpla la ecuación amortiguada en la componente perpendicular a $x = 0$. Así buscamos una función u que satisfaga la ecuación

(1.7) para $x < 0$ y (1.8), (1.10) y (1.11) para $x > 0$. Es decir, el nuevo sistema tiene tres incógnitas (u , u^{\parallel} y u^{\top}) y sus ecuaciones son:

$$u = u^{\parallel} + u^{\top}, \quad (1.12)$$

$$\partial_t u^{\parallel} - B \partial_y u = 0, \quad \partial_t u^{\top} - A \partial_x u = 0, \quad x < 0, \quad (1.13)$$

$$\partial_t u^{\parallel} - B \partial_y u = 0, \quad \partial_t u^{\top} + d(x) u^{\top} - A \partial_x u = 0, \quad x > 0. \quad (1.14)$$

Otra forma de introducir esta misma capa absorbente es considerar siempre las ecuaciones amortiguadas extendiendo $d(x)$ por cero cuando $x < 0$. Esta es la idea que usaremos en la implementación numérica.

Como hicimos al estudiar las condiciones transparentes en la sección anterior, analizamos las soluciones de tipo onda plana del sistema. Por un lado, vemos que las funciones de la forma:

$$v = v_0 e^{-i(k_x x + k_y y - \omega t)},$$

con $k = (k_x, k_y)$ la dirección de propagación de la onda, son soluciones particulares de (1.7). Por otro lado, buscamos funciones de la forma

$$\begin{aligned} u &= u^{\parallel} + u^{\top}, \\ u^{\parallel} &= u_0^{\parallel} e^{-i(k_x x'(x) + k_y y - \omega t)}, \\ u^{\top} &= u_0^{\top} e^{-i(k_x x'(x) + k_y y - \omega t)}, \end{aligned}$$

con $x'(x) = x - i\omega \int_0^x d(s) ds$, que sean solución de (1.14). Al imponer que se cumplan dichas ecuaciones concluimos:

$$a^{\parallel} + a^{\top} = v_0, \quad a^{\parallel} = B v_0 \frac{k_y}{\omega}, \quad a^{\top} = A v_0 \frac{k_x}{\omega}.$$

Finalmente resulta:

$$u = v_0 e^{-i(k_x x + k_y y - \omega t)} e^{-\frac{k_x}{\omega} \int_0^x d(s) ds} \quad (1.15)$$

con lo que u coincide con v cuando $x \leq 0$ pero se amortigua cuando $x > 0$ con coeficiente $\|u\| = \|v\| e^{-\frac{k_x}{\omega} \int_0^x d(s) ds}$. Los dos sistemas se acoplan 'perfectamente' en la región $x \leq 0$ y no hay reflexiones en la pared [17].

En la práctica es preciso introducir otra frontera artificial dentro de la capa acoplada infinita, a una cierta distancia de la primera pared y se imponen en ella condiciones de contorno nulas. Esta segunda frontera produce una reflexión pero como dentro de la capa acoplada las ondas decaen

exponencialmente el coeficiente de reflexión decae rápido. Se incrementa el recinto computacional con esta región entre dos fronteras. Para que el coste sea menor que el generado por el cálculo de integrales en el borde es preciso que la franja a añadir se pueda elegir suficientemente estrecha. Por otra parte, al implementar el método hay que discretizar las ecuaciones. Las leyes de dispersión de los problemas discretizados no son las mismas que las de los problemas continuos y tampoco las ondas planas, por lo que al discretizar las capas pueden producirse reflexiones incontroladas y este método no siempre funciona en la práctica [5]. No hay estudios de capas perfectamente acopladas diseñadas directamente para problemas discretizados o discretos, que es uno de los temas que se abordan en esta tesis.

1.3. Condiciones no reflectantes para dinámica molecular

Las simulaciones de dinámica molecular se han convertido en una herramienta esencial para investigar los procesos que ocurren a escala atómica en los sólidos cristalinos. En casos sencillos, el sistema de ecuaciones a resolver toma la forma

$$u_i'' = \sum_{i < j} V(|u_i - u_j|),$$

siendo u_i el desplazamiento de átomo i . En cada instante de tiempo, es preciso evaluar tantas funciones como átomos y sumarlas. El elevado coste de estas evaluaciones obliga a desarrollar estrategias para reducir el tamaño de los recintos computacionales sin alterar excesivamente los resultados de la simulación.

Consideremos por ejemplo un nanocristal en el cual defectos y dislocaciones están concentrados en una pequeña región. Tal es el caso en los experimentos de nanoindentación para estudiar los mecanismos de plasticidad incipiente en metales. En ellos, las dislocaciones se acumulan en torno a la punta del indentador. Parece razonable truncar el recinto computacional a una cierta distancia del indentador. Dentro del recinto, se lleva a cabo una simulación de dinámica molecular en la que se tiene en cuenta el medio circundante de forma adecuada. Es frecuente el recurso a condiciones de contorno periódicas, que sólo tienen sentido en las direcciones perpendiculares a la dirección de indentación y que en realidad implican que se está simulan-

do una colección de indentaciones espaciadas periódicamente, que ocurren simultáneamente. En la dirección en la que avanza el indentador estas condiciones carecen de sentido.

En la práctica, es conveniente situar la frontera suficientemente lejos del defecto para que las ecuaciones de movimiento puedan linearizarse, convirtiendo el problema inicial de dinámica molecular en otro de elasticidad discreta. En esta frontera se puede optar por imponer una condición de contorno artificial que reproduzca adecuadamente la respuesta del medio exterior o por acoplar la simulación de dinámica molecular con métodos sin malla o elementos finitos. En ambos casos, las condiciones de contorno o de transmisión impuestas han de minimizar las reflexiones espúreas de ondas elásticas hacia el interior del recinto computacional que se producen por un cambio brusco en la descripción del sistema en la frontera o interfaz artificial. Tales reflexiones se han observado en estudios atomísticos de dinámica de dislocaciones [34] o fisuras [1] y al diseñar esquemas multiescala híbridos [8], véase la figura 1.4.

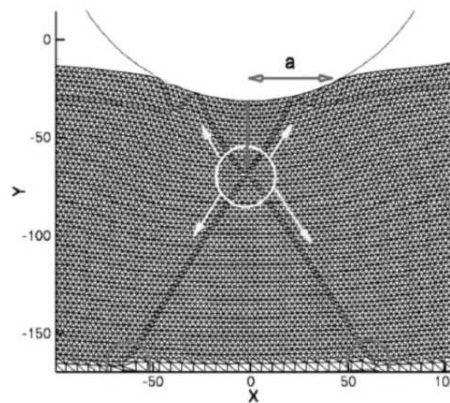


Fig. 7 Initial homogenous nucleation of two edge dislocation dipoles at a depth of approximately $0.86 a$, where a is the half-width of the contact area between the substrate and indenter. The temperature of atomistic region is 10 K and the indenter velocity is 0.05 \AA/ps .

Figura 1.4: Figura que ilustra la formación de defectos y su llegada a las paredes de un recinto computacional en una simulación atomística, tomada de [37].

Para paliar el efecto de las reflexiones en las paredes donde cambia la descripción, en [9] se introducen condiciones dependientes del tiempo

que acoplan simulaciones atomísticas con una descripción lineal del entorno circundante. La respuesta del medio exterior se reproduce mediante una ecuación de Langevin generalizada [2] que promedia las velocidades medias en el recinto computacional con un núcleo de convolución. Para calcular el núcleo que aparece en la integral se realiza una simulación en un recinto más grande. Otras opciones para minimizar reflexiones consisten en incorporar términos de fricción ad hoc [27], en utilizar acoplamientos aproximados [33] o en recurrir a estrategias de optimización [28]. Una revisión de los problemas derivados de las reflexiones y las estrategias ensayadas para reducirlos puede encontrarse en [37].

En esta tesis exploramos otras dos opciones: el diseño de condiciones exactas obtenidas usando las funciones de Green del problema linealizado discreto y la construcción de capas perfectamente acopladas discretas.

1.4. Resultados obtenidos en esta tesis

El objetivo principal de este trabajo es desarrollar condiciones de contorno no reflectantes en dos casos concretos. Por un lado estudiaremos el crecimiento de burbujas de helio en plutonio, donde se produce un proceso de agregación molecular, y por otro trataremos la dinámica de defectos en nanocristales.

En el capítulo 2 consideramos modelos de crecimiento de burbujas en plutonio. Estos modelos vienen dados por un sistema infinito de ecuaciones diferenciales acopladas entre sí mediante una restricción algebraica. Conseguimos reducir el sistema infinito a una sola ecuación para una de las incógnitas. Técnicamente, es un ejemplo extremo de reducción de un problema con infinitas variables a otro equivalente para un número finito de ellas. Dejando aparte esta cuestión técnica, el capítulo tiene un valor añadido por su aportación al desarrollo y análisis de modelos para el crecimiento de burbujas en materiales radiactivos. Corregimos un modelo propuesto en los National Lawrence Livermore Laboratories de modo que las soluciones pasan a reproducir adecuadamente el comportamiento cualitativo correcto de los frentes de onda que describen la evolución temporal de las densidades de burbujas de distintos tamaños. El modelo propuesto se reformula reduciéndolo a una ecuación integrodiferencial. Esto permite obtener expresiones analíticas para la densidad de burbujas, útiles en el estudio de su comportamiento cuali-

tativo y cuantitativo, y de su dependencia de los parámetros del problema [12, 16]. Damos además una serie de resultados que garantizan que los diferentes modelos obtenidos están bien puestos.

Con vistas a la simulación del comportamiento de defectos en modelos atómicos, deducimos condiciones de contorno no reflectantes para problemas de ondas y de elasticidad discretos. En el capítulo 3 consideramos cadenas atómicas unidimensionales. Cuando la interacción entre los átomos se restringe a los vecinos próximos y es linealizable, su evolución se rige por modelos con estructura de ecuaciones de ondas o de Klein-Gordon discretas. Construimos condiciones de contorno artificiales exactas para cadenas finitas a partir de las funciones de Green del problema de valores iniciales para una cadena infinita. Imponiendo estas condiciones en los bordes de la cadena (las paredes artificiales), su evolución con el tiempo es la misma que se observa al calcular la evolución de la cadena completa. Estas condiciones involucran integrales en tiempo, que han de ser discretizadas para la resolución numérica de las ecuaciones que gobiernan la evolución de la cadena truncada. Introducimos una estrategia de discretización que proporciona condiciones de contorno aproximadas absorbentes y testamos su eficiencia en problemas lineales y no lineales [13, 14]. En problemas no lineales que son linealizables en la zona donde se imponen las condiciones de contorno artificiales, los resultados son tan buenos como en los problemas lineales. En modelos no linealizables como el estudio de la propagación de frentes en modelos de Frenkel-Kontorova, los resultados son malos tan pronto los frentes llegan a las paredes artificiales.

El capítulo 4 extiende las ideas desarrolladas en el capítulo 3 a redes atómicas en dos o más dimensiones. Nos centramos en retículos cristalinos en los cuales los átomos forman una red cúbica simple y están gobernados por interacciones de vecinos próximos. Cuando no hay defectos o están concentrados lejos de la región en la que se van a colocar paredes artificiales para reducir el recinto computacional, se pueden linealizar las ecuaciones que rigen la evolución de los átomos, dando lugar a ecuaciones de ondas o de elasticidad discretas. En primer lugar consideramos modelos con estructura de ecuación de ondas discreta en dimensión 2. Posteriormente, extendemos los resultados a dimensión 3 y a modelos vectoriales de elasticidad discreta [14]. Se obtienen condiciones de contorno exactas para semiespacios (cristales semi-infinitos). Cuando se consideran 'cajas' (cristales finitos en forma de rectángulo o cubo), en cada pared de la caja se impone la condición obtenida

para el semiespacio que delimita. En el problema truncado resultante, las condiciones de contorno dejan de ser exactas en las esquinas en las que se unen paredes distintas. Se producen reflexiones en las esquinas, aunque este efecto decrece al aumentar el tamaño del recinto computacional. Las reflexiones generadas por 'el efecto esquina' unidas a las generadas al discretizar las integrales en tiempo que aparecen en las condiciones de contorno hacen que los resultados de los ensayos numéricos no sean tan buenos como en el caso unidimensional. Por otra parte, en problemas bi y tridimensionales, el coste computacional asociado al uso de condiciones de contorno integrodiferenciales es excesivo. Hemos llevado a cabo algunos ensayos en modelos sencillos de dinámica de defectos según los cuales estas condiciones parecen fallar cuando los defectos llegan a los bordes, caso en el que las ecuaciones no son linealizables en la pared artificial. Sin embargo, estas condiciones tienen la ventaja de que se pueden usar no sólo para truncar el recinto computacional sino para acoplarlo a otro tipo de ecuaciones en el exterior y quizás este hecho permita mejorar los resultados obtenidos hasta la fecha.

En el capítulo 5 exploramos una vía alternativa, que consiste en diseñar capas perfectamente acopladas aproximadas. En lugar de buscar condiciones de contorno que imponer en los bordes del retículo computacional, se modifican las ecuaciones en una franja que rodea el recinto. En esta franja se introducen términos adicionales en las ecuaciones que tienen un efecto amortiguador de las ondas dentro de ella. En el borde de la franja se imponen condiciones de contorno nulas. Los términos amortiguadores adicionales se eligen inspirándose en las construcciones de capas perfectamente acopladas para problemas de ondas y de elasticidad. Los resultados en varias dimensiones y en problemas no lineales mejoran notablemente con esta estrategia [14, 15], en el sentido de que las reflexiones son casi inapreciables y el coste computacional es bajo.

Las distintas estrategias numéricas propuestas a lo largo de la tesis se han implementado y testado en una serie de códigos disponibles en la dirección: <http://www.mat.ucm.es/~acarpio/barbara.html>
En esta dirección se encuentran también figuras de mayor tamaño.

Capítulo 2

Dinámica de burbujas en helio

La nucleación y el crecimiento de burbujas en materiales radiactivos es un fenómeno que ha atraído gran atención recientemente debido a su impacto potencial en la contaminación medioambiental y en el diseño de procedimientos más eficientes para extraer energía en reactores nucleares. En este capítulo, nos centramos en el crecimiento de burbujas de helio en desechos radiactivos (plutonio). Los residuos radiactivos sólidos generados por las centrales nucleares se suelen introducir en contenedores metálicos que aíslan la radiación. A continuación, estos contenedores se entierran en cementerios subterráneos o submarinos. Con el paso de los años, se generan burbujas de helio cerca de las paredes de los contenedores. El incremento de volumen y presión asociado a este fenómeno puede terminar dañando las paredes de los contenedores, dando lugar a graves problemas de contaminación radiactiva. Un fenómeno similar tiene lugar en las cabezas nucleares almacenadas en los arsenales diseminados por el planeta. La generación y acumulación de burbujas se observa también en la pasta radiactiva que se procesa en los reactores nucleares, afectando el rendimiento energético del proceso. Si se pudiera controlar la población de burbujas que se forma, se podría mejorar el rendimiento energético de los reactores. Obviamente, las condiciones (temperatura...) que rodean el proceso de nucleación y crecimiento de burbujas en ambos casos son muy distintas.

Los mecanismos que dan lugar a la nucleación de burbujas en plutonio se describen en [39]. Como resultado del alpha-decaimiento, hay una etapa transitoria inicial en la cual la autoirradiación produce dislocaciones que tienden a saturarse aproximadamente en dos años. Las partículas alpha se convierten en átomos de helio que reposan sobre los huecos desocupados producidos

durante el decaimiento, véase la figura 2.1. Si entendemos por monómero un átomo de helio y por k -compuesto (o k -burbuja) una burbuja formada por k átomos, se observa que los átomos de helio se difunden en el medio hasta encontrar otro monómero al que se unen formando un dímero o hasta encontrar un k -compuesto para formar una burbuja de $k + 1$ átomos. Estas burbujas no pierden átomos debido a las altas fuerzas de atracción que existen entre ellos, sólo pueden ganarlos. Estamos ante un ejemplo de agregación molecular irreversible: un agregado formado por k monómeros absorbe un nuevo monómero, pero no puede perder ninguno, de modo que no es posible disminuir el tamaño por pérdidas de masa. Numerosos modelos cinéticos simples describen este fenómeno en contextos variados: coagulación de coloides, fagocitosis de leucocitos y el ya mencionado crecimiento de burbujas de helio en plutonio, entre otras.

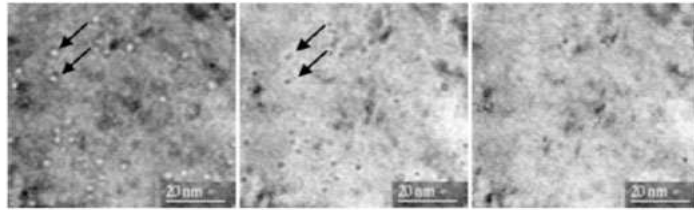


Figure 1. TEM images of 42-year-old Pu alloy. (a) The $-1.4 \mu\text{m}$ under-focus bright-field TEM micrograph shows a high number density of very small helium bubbles as a dark fringe surrounding a light dot. (b) The $+1.4 \mu\text{m}$ over-focus image reveals the bubbles as light fringes surrounding a dark dot. (c) The in-focus image does not reveal the presence of bubbles due to the absence of a strain field.

Figura 2.1: Imagen captada mediante un microscopio electrónico que muestra varias burbujas de helio generadas en una pasta de plutonio, tomada de [39].

Las figuras 2.2 (a) y (b) ilustran la evolución de la distribución de tamaños de burbujas en una muestra con una diferencia de 20 años. Se observa la presencia de un tamaño preferencial. También se aprecia la aparente

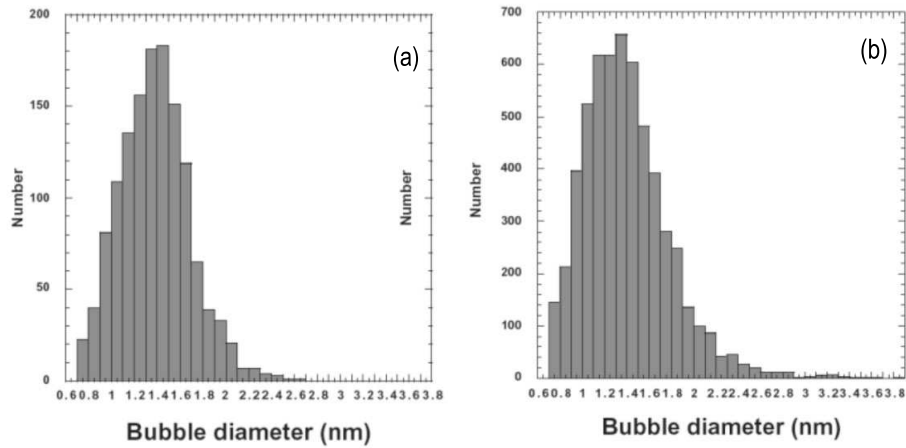


Figura 2.2: (a) Histograma que ilustra la distribución de burbujas de distintos tamaños transcurridos unos veinte años. (b) Histograma para la misma muestra, transcurridos veinte años más. Ambas figuras proceden de [39].

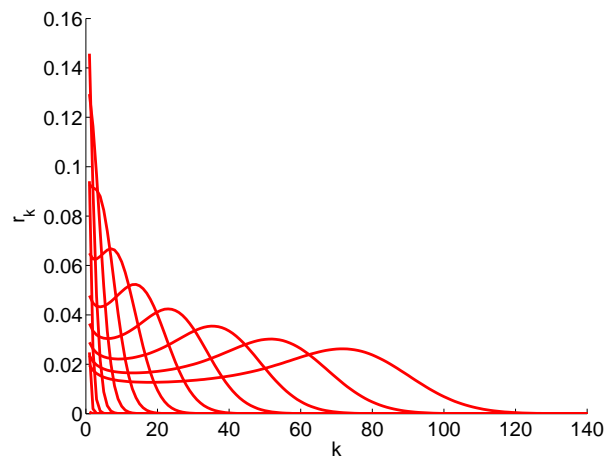


Figura 2.3: Distribución del número de burbujas en función del número de átomos k , según el modelo propuesto en [39]. Se han superpuesto las distribuciones obtenidas para una secuencia de tiempos creciente.

existencia de un tamaño máximo, en el sentido de que no se llegan a formar burbujas de mayor tamaño. Para un tamaño fijo, el número de burbujas crece con el tiempo. El modelo introducido en [39] se analiza en [7]. Este

modelo genera una distribución de tamaños que evoluciona como se indica en la figura 2.3. El comportamiento cualitativo no es correcto. No se aprecia un tamaño máximo, ni un tamaño preferencial a medida que el tiempo crece. Además, para cada tamaño fijado, el número de burbujas alcanza un pico, y luego decrece en lugar de seguir creciendo. Un modelo razonable ha de reproducir correctamente el comportamiento cualitativo de la distribución de tamaños observada experimentalmente. La primera labor que hemos desarrollado en este capítulo ha sido proponer una corrección para el modelo de Schaldach y Wolfer. Se trata de reemplazar un coeficiente de difusión constante con el tamaño por otro que decrece con el tamaño de las burbujas. Al estar las burbujas sumergidas en una matriz de plutonio, parece lógico suponer que cuanto mayor sea su tamaño, más difícil les resultará migrar dentro del material.

El capítulo está organizado como sigue. En la sección 2.1. se presenta la modificación del modelo propuesto en [39]. Su estructura matemática es la de un sistema infinito de ecuaciones diferenciales no lineales fuertemente acopladas mediante una restricción algebraica no local. Los diferentes coeficientes de difusión que hemos analizado toman valores prácticamente constantes para tamaños pequeños y se desvanecen para tamaños grandes. Según lo rápida que es la transición del valor constante a cero, se obtienen perfiles para la distribución de tamaños con el comportamiento cualitativo correcto o no.

La sección 2.2 se dedica a desarrollar herramientas analíticas para extraer información sobre las soluciones del sistema. Mostramos en primer lugar que la estrategia usual de tomar un límite continuo no proporciona resultados útiles. La ecuación continua resultante es una ley de conservación cuyas soluciones significativas desarrollan singularidades. Tras ello, recurrimos a un cambio de variable propuesto en [7] para transformar parte del sistema en un sistema lineal. Tomando la transformada de Laplace de la parte lineal e invirtiéndola, se expresa el número de k -burbujas en función del número de monómeros. Usando estas expresiones, el sistema se reduce a una ecuación integrodiferencial para la evolución del número de monómeros con el tiempo. En lugar de recurrir a un complejo procedimiento de capas acopladas para reconstruir asintóticamente la distribución de tamaños (como se hace en [7]), observamos que ciertos núcleos presentes en la formulación integrodiferencial se pueden aproximar por familias de gaussianas. Ajustando estas gaussianas, se obtienen reconstrucciones razonables de la evolución del número de burbujas con el tiempo en función de los parámetros.

En la sección 2.3 se dan resultados que garantizan que estos modelos están bien puestos: la solución es única, global y no negativa. Para ello es preciso combinar la información proporcionada por las distintas formulaciones equivalentes obtenidas en la sección 2.2. Concluimos el capítulo con algunos comentarios sobre el tratamiento numérico de los distintos modelos propuestos, en particular de la reformulación integrodiferencial, en la sección 2.4.

2.1. Un modelo de cinética discreta.

Un modelo cinético simple para describir el crecimiento de burbujas de helio en plutonio es el propuesto por Schaldach y Wolfer en [39]. En este modelo se considera que la densidad inicial de átomos de helio es nula y que existe una fuente productora de los mismos que representaremos mediante una función g . Las ecuaciones que rigen dicho modelo consisten en:

$$\dot{\rho}_k = 4\pi D \rho_1 a_{k-1} \rho_{k-1} - 4\pi D \rho_1 a_k \rho_k, \quad k \geq 3, \quad (2.1)$$

$$\dot{\rho}_2 = 8\pi D \rho_1^2 a_1 - 4\pi D \rho_1 \rho_2 a_2, \quad (2.2)$$

$$\rho_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k \rho_k = \int_0^{\tilde{t}} g(t') dt', \quad (2.3)$$

donde $\dot{\rho}_k = \frac{d\rho_k}{dt}$, siendo ρ_k la densidad de k -burbujas con radio crítico a_k . Esto quiere decir que cuando el centro de un monómero y una k -burbuja distan menos de a_k el monómero es absorbido, formándose una $k + 1$ -burbuja. ρ_1 representa el número de monómeros (burbujas de un átomo) por unidad de volumen. D es el coeficiente de difusión, constante en este modelo. En las ecuaciones (2.1) y (2.2) se ve reflejada la tasa de creación de k -burbujas. La densidad de k -burbujas aumenta de forma proporcional al número de $(k - 1)$ -burbujas que captan átomos de helio sueltos y decrece de forma proporcional al número de k -burbujas que captan un átomo y se convierten en $(k + 1)$ -burbujas. La ecuación (2.3) indica que el número total de átomos de helio distribuidos entre los distintos tipos de burbuja es igual al número total de átomos creados por la fuente g . Actúa como una condición de contorno para el sistema (2.1)-(2.2), que permite calcular ρ_1 en función de $\rho_k, k > 1$, y cerrar el sistema. El modelo postula que el radio crítico antes mencionado se comporta como $a_k = a_1 k^{1/3}$. Por simplicidad, se toma la función fuente como $g(t) = 1$. Si realizamos un cambio de variables para conseguir un sistema

adimensional [7]:

$$t = \tilde{t}\sqrt{4\pi Da_1 g}, \quad c = \rho_1 \sqrt{\frac{4\pi Da_1}{g}}, \quad r_k = \rho_k \sqrt{\frac{4\pi Da_1}{g}}, \quad (2.4)$$

el modelo (2.1), (2.2) y (2.3) queda:

$$\frac{dr_k}{dt} = (k-1)^{1/3} cr_{k-1} - k^{1/3} cr_k, \quad k \geq 3, \quad (2.5)$$

$$\frac{dr_2}{dt} = 2c^2 - 2^{1/3} cr_2, \quad (2.6)$$

$$c = t - \sum_{k=2}^{\infty} kr_k, \quad (2.7)$$

con las condiciones iniciales:

$$c(0) = 0, \quad r_k(0) = 0, \quad k \geq 2. \quad (2.8)$$

La variable c mide la cantidad de monómeros. A pesar de que las condiciones iniciales son nulas, las soluciones son positivas debido a la presencia de una fuente generadora de átomos. Es un modelo discreto 'convectivo' o 'de transporte'. Es de esperar que las primeras densidades no nulas correspondan a la densidad de átomos y k -burbujas con k pequeño. Con el tiempo las densidades de burbujas con cada vez más átomos se harían positivas. En función del tamaño de las burbujas k , las soluciones tendrían para tiempos pequeños la estructura de un frente de onda que se propaga en la dirección de k creciente, con velocidad finita. Esta observación permite proponer una estrategia para aproximar numéricamente las soluciones de (2.5)-(2.8). Suponiendo que el número de burbujas r_k sea nulo para tamaños k mayores que un cierto K durante suficiente tiempo, el sistema se trunca automáticamente a un sistema finito de ecuaciones diferenciales para r_k , $k \leq K$, que se puede resolver con métodos Runge-Kutta. La presencia de la restricción algebraica (2.7) puede dar al problema un carácter rígido, por lo que es conveniente reemplazarla por una ecuación diferencial:

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 + cM_{\frac{1}{3}} = 1, \quad (2.9)$$

donde,

$$M_{\mu} = \sum_{k=2}^{\infty} k^{1/3} r_k, \quad \mu \geq 0. \quad (2.10)$$

Esta ecuación se obtiene derivando la restricción algebraica respecto a t para eliminarlo.

Resolviendo el problema (2.5)-(2.6)-(2.9)-(2.8), truncado a $k \leq K$, mediante un método Runge-Kutta de paso variable (como el RKF45) se calculan las distribuciones adimensionales de burbujas de tamaño k , $r_k(t)$. La figura 2.3 representa la evolución con el tiempo del número de burbujas en función del tamaño. Como se puede observar el tamaño de las burbujas crece sin límite, mientras que las medidas experimentales (véase la figura 2.2) indican la existencia de un tamaño máximo por debajo del cual crece el número de burbujas. Nos encontramos así con la necesidad de modificar ligeramente el modelo presentado, para ver reflejada en el nuevo esta observación experimental.

En el modelo anterior el coeficiente de difusión D era constante y en el proceso de adimensionalización desaparecía de las ecuaciones. Ahora consideraremos un coeficiente de difusión variable con el tamaño del compuesto, de la forma $D_0 D(k)$, donde D_0 tiene dimensiones pero $D(k)$ no. Consideramos tres posibilidades distintas. La primera viene dada por:

$$D(k) = (\arctan(K_c - k) + \frac{\pi}{2}) \frac{1}{\pi}, \quad (2.11)$$

donde K_c representará un tamaño crítico aproximado. La segunda es:

$$D(k) = (\tanh(K_c - k) + 1) \frac{1}{2}, \quad (2.12)$$

y la tercera consiste en una función polinómica definida a trozos:

$$D(k) = \begin{cases} 1, & \text{si } k \leq M_1, \\ \frac{(k-M_2)^2(3M_1-M_2-2k)}{(M_1-M_2)^3}, & \text{si } M_1 \leq k \leq M_2, \\ 0, & \text{si } k \geq M_2, \end{cases} \quad (2.13)$$

donde M_1 indica el tamaño a partir del cual el número de burbujas empieza a crecer y M_2 el tamaño máximo aproximado que alcanzan.

Con cualquiera de estos coeficientes, las ecuaciones (2.1), (2.2) y (2.3) se transforman en:

$$\dot{\rho}_k = 4\pi D_0 D(k-1) \rho_1 a_{k-1} \rho_{k-1} - 4\pi D_0 D(k) \rho_1 a_k \rho_k, \quad k \geq 3, \quad (2.14)$$

$$\dot{\rho}_2 = 8\pi D_0 D(1) \rho_1^2 a_1 - 4\pi D_0 D(2) \rho_1 \rho_2 a_2, \quad (2.15)$$

$$\rho_1 + \sum_{k=2}^{\infty} k \rho_k = \int_0^{\tilde{t}} g(t') dt'. \quad (2.16)$$

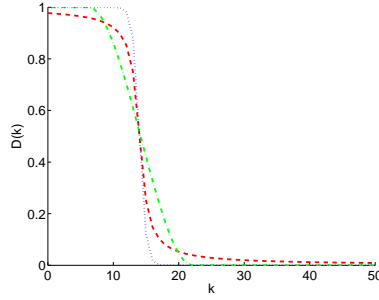


Figura 2.4: Comparación de los tres coeficientes variables en estudio: $D(k) = \arctan((K_c - k) + \frac{\pi}{2})\frac{1}{\pi}$ (línea discontinua), $D(k) = (\tanh(K_c - k) + 1)\frac{1}{2}$ (línea punteada), $D(k)$ polinómica (línea de punto-guión).

Adimensionalizando las ecuaciones anteriores tenemos:

$$\frac{dr_k}{dt} = (k-1)^{1/3}D(k-1)cr_{k-1} - k^{1/3}D(k)cr_k, \quad k \geq 3, \quad (2.17)$$

$$\frac{dr_2}{dt} = 2c^2D(1) - 2^{1/3}D(2)cr_2, \quad (2.18)$$

$$c = t - \sum_{k=2}^{\infty} kr_k, \quad (2.19)$$

donde (2.19) se puede reemplazar por

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2D(1) + cM_{\frac{1}{3}} = 1, \quad (2.20)$$

con $M_{\frac{1}{3}}$ definido en (2.21):

$$M_{\mu} = \sum_{k=2}^{\infty} k^{1/3}D(k)r_k, \quad \mu \geq 0. \quad (2.21)$$

Obsérvese que el cambio de variable $s = \int_0^t c(t')dt'$ suprime la no lineal-

idad en las ecuaciones para r_k , $k > 1$:

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{1/3}D(k-1)r_{k-1} - k^{1/3}D(k)r_k, \quad k \geq 3, \quad (2.22)$$

$$\frac{dr_2}{ds} = 2cD(1) - 2^{1/3}D(2)r_2, \quad (2.23)$$

$$c = t - \sum_{k=2}^{\infty} kr_k, \quad (2.24)$$

$$\frac{dt}{ds} = \frac{1}{c}, \quad (2.25)$$

con las condiciones iniciales:

$$c(0) = 0, \quad r_k(0) = 0, \quad k \geq 2. \quad (2.26)$$

Como antes, (2.24) se reemplaza a efectos numéricos por

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2D(1) + cM_{\frac{1}{3}} = 1, \quad (2.27)$$

con $M_{\frac{1}{3}}$ definido en (2.21). Nótese que el cambio de variable genera una singularidad en $s = 0$.

En la práctica se resuelve numéricamente el sistema no lineal en función de la variable temporal t , con lo que obtenemos $r_k(t)$ y $c(t)$. Conocida $c(t)$, (2.25) nos proporciona $s(t)$, con lo que podemos obtener $r_k(s)$ y $c(s)$ cuando sea preciso.

La formulación en la variable s es útil para el estudio analítico del problema. De entrada, obtenemos algunas leyes de balance. Integrando (2.22)-(2.23) respecto a k y sumando obtenemos:

$$\frac{dM_0}{ds} = 2cD(1). \quad (2.28)$$

Integrando (2.24) respecto a k , derivando el resultado respecto a s y usando (2.27), resulta además que

$$\frac{dM_1}{ds} = 4cD(1) + M_{\frac{1}{3}}. \quad (2.29)$$

La alternancia entre las variables t y s será útil en la siguiente sección. Los resultados numéricos que mostramos en esta sección usan la variable temporal

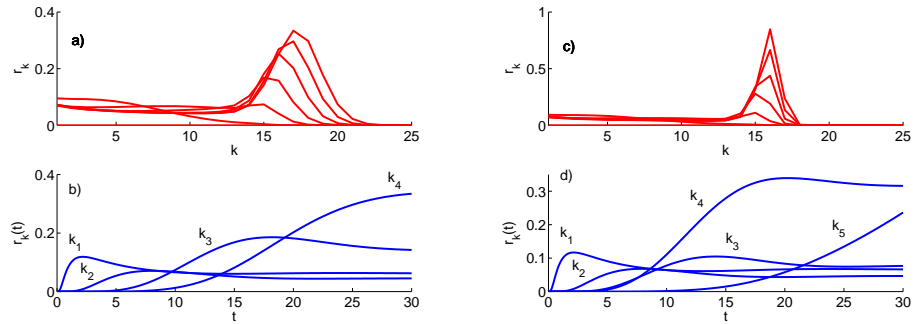


Figura 2.5: a) Número de burbujas r_k en función del tamaño de las burbujas k , con coeficiente de difusión (2.11). Se han superpuesto los perfiles en una secuencia de tiempos creciente. b) Número de burbujas $r_k(t)$ en función del tiempo t , para $k_1 = 2$, $k_2 = 8$, $k_3 = 15$, $k_4 = 17$ y con coeficiente de difusión (2.11). c) y d) Figuras análogas con coeficiente de difusión (2.12)

t , si bien nos limitamos a ilustrar la distribución del número de burbujas en función de k a tiempos fijos.

Al resolver numéricamente las ecuaciones anteriores eligiendo como función D la definida en (2.11) obtenemos la gráfica mostrada en la figura 2.5 a) y b). Podemos observar que el número de burbujas va aumentando conforme el tamaño se aproxima a un valor crítico de k , pero no parece que la distribución de tamaños se estanque en un valor máximo. Las otras dos expresiones sugeridas para D sí que dan lugar a tamaños máximos.

Al resolver numéricamente las ecuaciones (2.14), (2.15), (2.16) usando la expresión (2.12) de D observamos un tamaño crítico para k que las burbujas no rebasan. Por debajo de dicho tamaño, el número de burbujas con k átomos, aumenta continuamente, véase la figura 2.5 c) y d). Esta misma observación podemos hacerla si representamos la solución obtenida usando para D la expresión (2.13), como se ve en la figura 2.6 a) y b). De esta manera, los nuevos modelos dados por (2.14), (2.15) y (2.16) se ajustan más a las observaciones experimentales, en especial, el segundo y el tercero.

Por último, en la figura 2.6 c), comparamos la concentración de monómeros c usando las distintas definiciones del coeficiente de difusión.

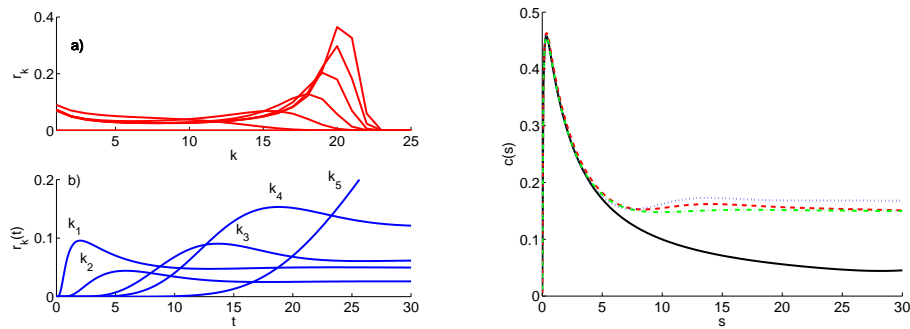


Figura 2.6: a) Número de burbujas r_k en función del tamaño de las burbujas k , con coeficiente de difusión (2.13). Se han superpuesto los perfiles en una secuencia de tiempos creciente. b) Número de burbujas $r_k(t)$ en función del tiempo t , para $k_1 = 2$, $k_2 = 8$, $k_3 = 16$, $k_4 = 18$, $k_5 = 21$ y con coeficiente de difusión (2.13). c) Concentración de monómeros, con D constante (curva continua), con D de la forma (2.11) (curva discontinua), con D definido por (2.12) (curva punteada) y con D como en (2.13) (curva de punto-guión).

2.2. Análisis asintótico.

Pretendemos, ahora, obtener una solución explícita aproximada de las ecuaciones (2.22), (2.23), (2.24) y (2.25). Para ello consideraremos sucesivamente estrategias diversas.

En primer lugar, analizamos el límite continuo cuando $k \rightarrow 0$, que nos proporciona una ecuación en derivadas parciales de tipo ley de conservación para la distribución $r(k, s)$ complementada con una restricción integral que incorpora la fuente $g(t) = 1$ y una condición de contorno en términos de c . Las aproximaciones obtenidas a partir de este límite continuo se construyen a partir de soluciones autosimilares aproximadas que explotan en sus extremos y resultan ser bastante pobres. Esto indica que se debieran incorporar derivadas de orden superior en la aproximación pero la ecuación resultante carece entonces de soluciones con una expresión analítica sencilla, con lo cual se ha de resolver numéricamente el modelo resultante y no se gana nada respecto al modelo discreto.

Tras ello, retornamos al modelo discreto y observamos que, tomando la transformada de Laplace respecto a la variable s , conseguimos expresar las distribuciones de tamaños $r_k(s)$, $k \geq 2$, como convolución de la distribución de monómeros $r_1(s) = c(s)$. Los núcleos de convolución dependen de k

y se calculan invirtiendo la transformada de Laplace de funciones con una expresión analítica conocida. La estructura de esos núcleos permite aproximarlos por deltas de Dirac centradas en torno a su media. A partir de ahí, conseguimos desacoplar el sistema discreto y obtener una ecuación integrodiferencial para la evolución de la población de monómeros, con lo que se cierra la aproximación. Si aproximamos los núcleos por una familia de gaussianas, en lugar de deltas de Dirac, la calidad de la aproximación de los perfiles r_k mejora notablemente.

Parte del análisis llevado a cabo en esta sección sigue la línea del análisis realizado en [7] para el modelo de Schaldach y Wolfer [39], pero hay que resolver las dificultades derivadas de que en nuestro caso aparece un coeficiente $D(k)$ variable. La observación de que se pueden aproximar con cierta precisión los perfiles r_k usando las expresiones obtenidas al invertir la transformada de Laplace y aproximando los núcleos por una familia de gaussianas es completamente original.

2.2.1. Límite continuo y aproximación autosimilar.

Suponemos que $r_k(s) = r(k, s)$ es función de una variable continua s y otra variable continua k . Haciendo un desarrollo de Taylor de primer orden en la variable k , aproximamos (2.22) por

$$\frac{\partial r}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial k}(k^{\frac{1}{3}}D(k)r) = 0, \quad (2.30)$$

cometiendo un error de orden $\frac{\partial^2}{\partial k^2}(k^{\frac{1}{3}}D(k)r)$. La ecuación (2.24) se transforma en

$$\int_0^\infty kr(k, s)dk = t, \quad (2.31)$$

englobando la variable $c = r_1$, que reaparece individualmente en forma de condición de contorno. Integrando (2.30) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial s} \int_0^\infty r(k, s)dk = \lim_{k \rightarrow 0}(k^{\frac{1}{3}}D(k)r)$$

ya que D y r se anulan para k grande. Usando la versión continua de (2.28) la condición de contorno resulta ser

$$\lim_{k \rightarrow 0}(k^{\frac{1}{3}}D(k)r) = 2D(1)c. \quad (2.32)$$

Una vez determinado el problema continuo, estudiamos la estructura de sus soluciones. Multiplicando (2.30) por $k^{\frac{1}{3}}D(k)$ tenemos

$$\frac{\partial(k^{\frac{1}{3}}D(k)r)}{\partial s} + k^{\frac{1}{3}}D(k)\frac{\partial}{\partial k}(k^{\frac{1}{3}}D(k)r) = \frac{\partial v}{\partial s} + k^{\frac{1}{3}}D(k)\frac{\partial v}{\partial k} = 0,$$

siendo $v = k^{\frac{1}{3}}D(k)r$. El método de las características nos dice que $v(k, s)$ es constante a lo largo de las curvas características $s - a(k)$, con

$$\frac{da}{dk} = \frac{1}{k^{1/3}D(k)}.$$

Por tanto, $v(k, s) = v(s - a(k))$ y las soluciones de (2.30) tienen la forma

$$r(k, s) = \frac{v(s - a(k))}{k^{1/3}D(k)}.$$

La condición de contorno (2.32) nos dice que $v(0, s) = v(s - a(0)) = 2D(1)c(s)$. Podemos tomar $a(0) = 0$ y $v(s) = 2D(1)c(s)$, con lo que

$$r(k, s) = \frac{2D(1)c(s - a(k))}{k^{1/3}D(k)}.$$

Como c sólo está definido para $s > 0$, conviene introducir una función de Heaviside θ que trunque esta expresión si $s < a(k)$. Las soluciones de (2.30)-(2.32) son pues de la forma:

$$r(k, s) = \frac{2D(1)c(s - a(k))\theta(s - a(k))}{k^{\frac{1}{3}}D(k)}, \quad (2.33)$$

con

$$a(k) = \int_0^k \frac{d\tilde{k}}{\tilde{k}^{\frac{1}{3}}D(\tilde{k})}, \quad (2.34)$$

y $\theta(x) = 1$ si $x > 0$ y $\theta(x) = 0$ si $x < 0$. Para conocer completamente la solución hemos de hallar c tal que $c(0) = 0$ a partir de la restricción integral usando (2.33). Con el cambio de variable $s' = s - a(k)$, $ds' = \frac{dk}{k^{\frac{1}{3}}D(k)}$ y $k = a^{-1}(s - s')$

$$t = \int_0^\infty kr(k, s)dk = 2D(1) \int_0^s a^{-1}(s - s')c(s')ds',$$

o, equivalentemente, si derivamos respecto a s

$$1 = 2D(1)c(s) \int_0^s (a^{-1}(s-s'))^{1/3} D(a^{-1}(s-s'))c(s')ds'.$$

Nótese que a^{-1} se puede calcular resolviendo la ecuación

$$\frac{da^{-1}(k)}{dk} = \frac{1}{\frac{da}{dk}(a^{-1}(k))} = (a^{-1}(k))^{1/3} D(a^{-1}(k))$$

partiendo de $a^{-1}(0) = 0$. Esta fórmula es poco práctica por la compleja expresión de a . Sólo cuando $D(k) = D$ es constante se simplifica y permite calcular c , ya que $a(k) = \frac{3}{2D}k^{2/3}$ y $a^{-1}(k) = (\frac{2D}{3})k^{3/2}$.

En la figura 2.7 podemos comparar la evolución de las funciones $a(k)$ en cada caso. Para ello hemos usado una aproximación numérica de cuarto orden con el fin de calcular las integrales correspondientes. Para el comportamiento del modelo es muy importante el comportamiento de la función $a(k)$ asociada. Como vemos, en el caso D polinómica, $a(k)$ explota en tiempo finito ya que el denominador se anula en tiempo finito. Cuando D se genera con una tangente hiperbólica, no hay explosión en tiempo finito, ya que el denominador no se anula. No obstante alcanza valores grandes rápidamente y se alcanza el infinito numérico en tiempo finito y breve. En el caso de la arcotangente, el crecimiento es más suave. El crecimiento rápido de a se corresponde con distribuciones que parecen estancarse en un tamaño máximo. El crecimiento lento da lugar a distribuciones en las cuales el tamaño de las burbujas crece sin cesar.

Las soluciones que hemos obtenido para el problema continuo no son del todo explícitas pues c no lo es. Nos preguntamos si se puede hallar alguna solución particular relevante. Observamos que si D es constante, es posible hallar una solución autosimilar,

$$r(k, s) = \frac{R_0 D^{-1/2}}{k^{1/3}(s - \frac{3}{2}k^{2/3})^{3/4}} \theta(s - \frac{3}{2}k^{2/3}) = \frac{R_0 s^{-5/4} \xi^{-1/3}}{(1 - \frac{3}{2}\xi^{2/3})^{3/4}} \quad (2.35)$$

$$c(s) = \frac{1}{2} R_0 D^{-1/2} s^{-3/4} \quad (2.36)$$

$$s = (\frac{7}{8} R_0 D^{-1/2} t)^{4/7} \quad (2.37)$$

aunque no se cumple la restricción $c(0) = 0$. Las variables de similaridad que dejan invariante (2.30) son $\xi = ks^{-3/2}$ y $\rho = s^{5/4}r$. La expresión para c sale

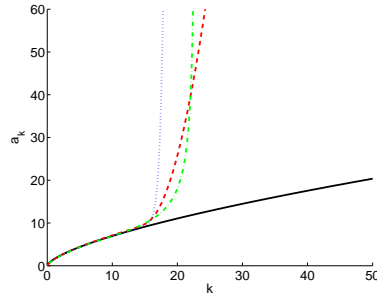


Figura 2.7: Funciones a_k , frente al tamaño de las burbujas k , para el modelo (2.1), (2.2), (2.3) (línea continua); para el modelo (2.14), (2.15), (2.16) con coeficiente de difusión (2.11) (línea discontinua), con coeficiente de difusión (2.12) (línea punteada) y con coeficiente de difusión (2.13) (línea de punto-guión).

de $r(\xi, s)$ y la condición de contorno (2.32), mientras que R_0 se determina a partir de la restricción integral: $R_0 = \frac{(27\pi)^{\frac{1}{4}}}{\Gamma(\frac{1}{4})} \approx 0,837042$. Esta solución tiene dos singularidades integrables, en $s = 0$ y en $s = \frac{3}{2}k^{2/3}$, para cada s fijo.

Cuando D no es constante, esto no es posible, ya que no hay reescalamientos que dejen invariante (2.30). En nuestro caso, D es aproximadamente constante en una región, lo cual sugiere expresiones aproximadas para las soluciones, construidas modificando la solución autosimilar. Basta utilizar (2.36)-(2.37) en conjunción con (2.33)-(2.34). La diferencia reside en que usamos el $a(k)$ correspondiente a D variable.

En la figura 2.8, podemos comparar la solución numérica del problema discreto inicial con la solución aproximada del problema continuo, en cada uno de los tres casos. En todos ellos las soluciones aproximadas explotan cerca de los tamaños en los que las soluciones numéricas se hacen cero. En los casos en los que el coeficiente de difusión es polinómico o tangente hiperbólica, el hecho anterior describe en cierto modo el comportamiento asintótico de las soluciones, hay un tamaño máximo que se alcanza a partir de cierto instante y el número de burbujas de dicho tamaño aumenta a medida que lo hace el tiempo. En el caso de la arcotangente o la difusión constante esto no sucede por lo que la singularidad carece de sentido alguno.

En todo caso, el perfil de c que estamos usando no parece aceptable debido a sus singularidades y es preciso buscar otras aproximaciones que reproduzcan c de forma aceptable.

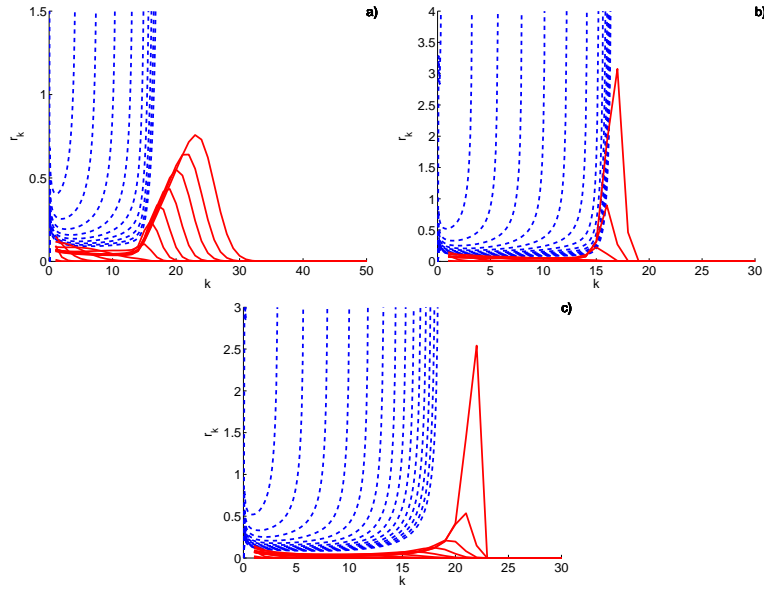


Figura 2.8: Funciones de distribución r_k obtenidas a partir del modelo discreto (línea continua) y soluciones del modelo continuo (línea discontinua). a) con coeficiente de difusión (2.11), b) con coeficiente de difusión (2.12), c) con coeficiente de difusión (2.13).

2.2.2. Transformada de Laplace del sistema discreto.

Dado que no es posible resolver de forma exacta el problema continuo y que en cualquier caso hemos de buscar aproximaciones que ensamblen soluciones en las tres regiones de D (etapa inicial constante, transición, zona nula), trataremos de solucionar de manera exacta las ecuaciones discretas (2.22), (2.23):

$$\frac{dr_2}{ds} = 2cD(1) - 2^{1/3}D(2)r_2,$$

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{1/3}D(k-1)r_{k-1} - k^{1/3}D(k)r_k, \quad k \geq 3.$$

Si tomamos transformadas de Laplace en estas ecuaciones nos queda:

$$\hat{r}_2(\sigma) = \frac{2D(1)}{\sigma + 2^{1/3}D(2)}\hat{c}, \quad (2.38)$$

$$\hat{r}_k(\sigma) = \frac{(k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)}{\sigma + k^{\frac{1}{3}}D(k)}\hat{r}_{k-1}, \quad k \geq 3. \quad (2.39)$$

De aquí obtenemos:

$$2^{\frac{1}{3}}D(2)\hat{r}_2(\sigma) = \frac{2D(1)}{1 + \sigma 2^{\frac{-1}{3}}D(2)^{-1}}\hat{c}, \quad (2.40)$$

$$k^{\frac{1}{3}}D(k)\hat{r}_k(\sigma) = \frac{(k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)}{1 + \sigma k^{\frac{-1}{3}}D(k)^{-1}}\hat{r}_{k-1}, \quad k \geq 3. \quad (2.41)$$

Iterando podemos expresar las transformadas de Laplace mediante la fórmula:

$$k^{\frac{1}{3}}D(k)\hat{r}_k = 2\hat{c}D(1)\hat{R}_k, \quad (2.42)$$

donde

$$\hat{R}_k(\sigma) = \prod_{j=2}^k \frac{1}{1 + \sigma j^{\frac{-1}{3}}D(j)^{-1}}. \quad (2.43)$$

Usando la fórmula de la transformada de Laplace inversa:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{s_1+i\infty}^{s_1-i\infty} e^{st} \hat{f}(s) ds,$$

en (2.42), podemos expresar las soluciones r_k en función de las R_k (transformadas inversas de \hat{R}_k), quedando:

$$r_k = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}}D(k)}c * R_k, \quad k \geq 3,$$

de donde deducimos:

$$r_k(s) = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}}D(k)} \int_0^s R_k(s-s')c(s')ds', \quad k \geq 2 \quad (2.44)$$

con

$$R_k(t) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{-iL}^{iL} e^{st} \hat{R}_k(s) ds = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-L}^L e^{its} \hat{R}_k(is) ds. \quad (2.45)$$

Podemos calcular numéricamente, tanto las funciones R_k , como las integrales necesarias para conseguir el valor de r_k , las soluciones de nuestro

problema. En la figura 2.9, comparamos los resultados obtenidos al calcular las soluciones del sistema original con las predichas por la fórmula (2.44), para cada una de las definiciones del coeficiente de difusión $D(k)$. En todas ellas se han usado los valores de $c(s)$ obtenidos resolviendo el sistema discreto. Se observa una excelente aproximación. Vamos a obtener ahora una ecuación desacoplada para c que evite tener que resolver el sistema discreto.

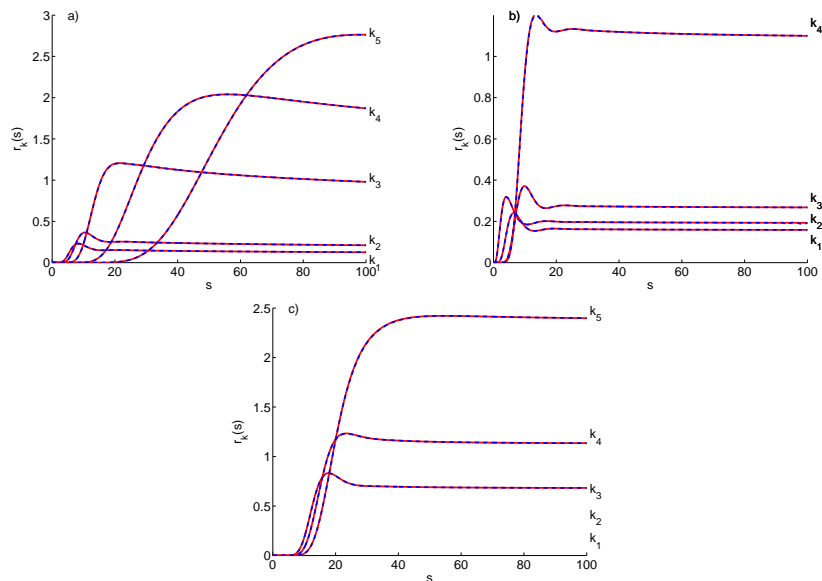


Figura 2.9: Funciones $r_k(s)$, para $k_1 = 12$, $k_2 = 15$, $k_3 = 18$, $k_4 = 21$ y $k_5 = 24$, obtenidas a partir del problema inicial (línea continua) y soluciones predichas por (2.44) (línea discontinua): a) con coeficiente de difusión (2.11), b) con coeficiente de difusión (2.12), c) con coeficiente de difusión (2.13).

Insertando en la definición de $M_{\frac{1}{3}}$ la fórmula (2.44) y sustituyendo en (2.27) obtenemos la siguiente ecuación integrodiferencial para la concentración de monómeros c , que debe ser resuelta usando la condición inicial $c(0) = 0$:

$$c \frac{dc}{ds} + 4D(1)c^2 + 2D(1)c \int_0^s \left[\sum_{k=2}^{\infty} R_k(s-s') \right] c(s') ds' = 1. \quad (2.46)$$

Las fórmulas (2.44) junto con la ecuación (2.46) nos dan una reformulación exacta del sistema infinito de ecuaciones diferenciales acopladas (2.22)-(2.23)

y (2.27). La ecuación integrodiferencial para c es exacta pero muy costosa de resolver, pues el núcleo integral lo forma una serie infinita de inversas de Laplace de (2.43) que han de calcularse numéricamente. Podemos obtener ecuaciones aproximadas menos costosas proponiendo expresiones aproximadas para los núcleos R_k .

En los tres casos de coeficiente de difusión variable, la figura 2.10 indica que las funciones R_k tienen simplemente forma de funciones delta centradas en torno a su media $a(k)$. Por tanto, r_k será:

$$r_k(s) = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}}D(k)} \int_0^s \delta(s - s' - a(k))c(s')ds' = \frac{2D(1)}{k^{\frac{1}{3}}D(k)}c(s - a(k))\theta(s - a(k)). \quad (2.47)$$

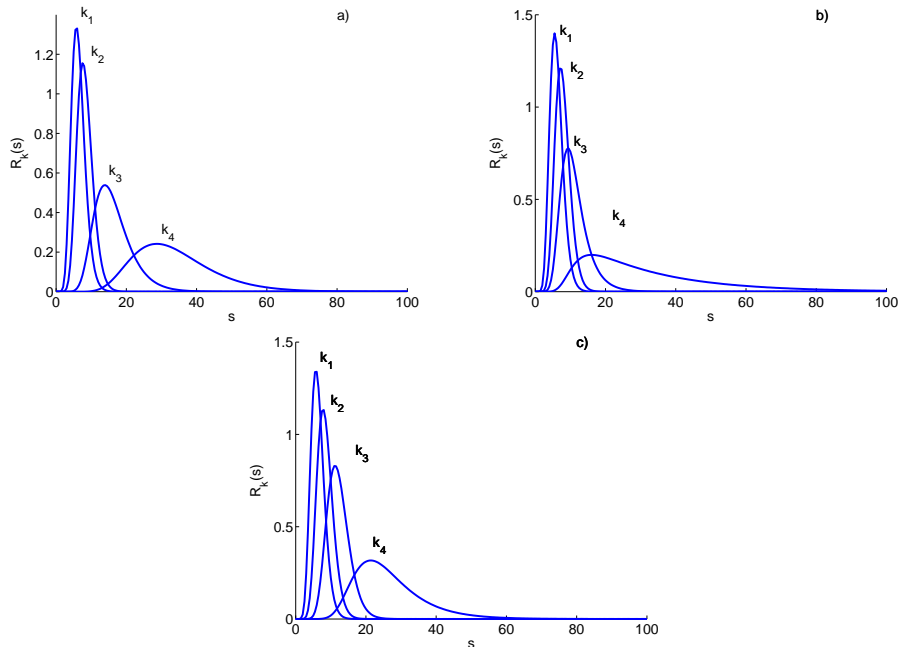


Figura 2.10: Aproximación de las funciones R_k , para $k_1 = 12$, $k_2 = 15$, $k_3 = 18$, $k_4 = 21$: a) con coeficiente de difusión (2.11), b) con coeficiente de difusión (2.12), c) con coeficiente de difusión (2.13).

Nótese que ésta es exactamente la estructura que habíamos propuesto para las distribuciones $r(k, s)$ en la Sección 3.1 usando el método de características. Vamos a calcular una aproximación de c mucho mejor que la propuesta en esa sección. Combinada con la expresión exacta (2.44) que hemos

obtenido para las distribuciones r_k , da una buena aproximación a la solución del sistema de partida. Combinada con (2.47), la aproximación de las funciones $r_k(t)$ no es muy buena pues está descentrada. La aproximación mejora corrigiendo la aproximación propuesta para los núcleos. Se puede proponer, por ejemplo, núcleos con estructura de función gaussiana.

Comencemos por obtener la ecuación aproximada para c con núcleos tipo delta. Introduciendo la expresión de r_k en la fórmula (2.27) tenemos:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 D(1) + 2D(1)c \sum_{k=2}^{\infty} c(s - a(k)) = 1$$

Aproximamos la suma por una integral y efectuamos de nuevo el cambio de variable $s' = s - a(k)$, $k = a^{-1}(s - s')$, $dk = -(a^{-1})'(s - s')ds'$

$$\int_{0 < a(k) < s} c(s - a(k)) dk = \int_0^s (a^{-1})'(s - s') c(s') ds'$$

Como $(a^{-1})' = (a^{-1})^{1/3} D(a^{-1})$ deducimos que la concentración de monómeros debe satisfacer la siguiente ecuación integro-diferencial:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 D(1) + 2D(1)c \int_0^s (a^{-1}(s - s'))^{1/3} D(a^{-1}(s - s')) c(s') ds' = 1 \quad (2.48)$$

y escribiéndolo en la variable t , llegamos a las ecuaciones:

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 D(1) - 1 = \quad (2.49)$$

$$-2D(1)c \int_0^t (a^{-1}(s(t) - s(t')))^{1/3} D(a^{-1}(s(t) - s(t'))) [c(t')]^2 dt', \quad (2.50)$$

$$\frac{ds}{dt} = c. \quad (2.51)$$

La figura 2.11 compara los valores de $c(s)$ obtenidos a partir del sistema discreto y de la aproximación (2.48) para los distintos coeficientes de difusión. Los perfiles de $r_k(s)$ se aproximan por (2.47). Se obtienen mejores perfiles con mejores aproximaciones de R_k .

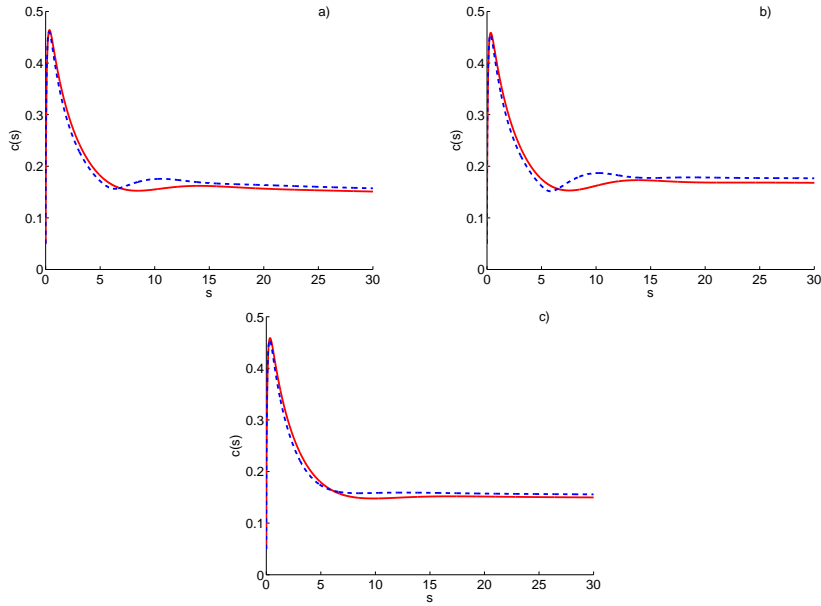


Figura 2.11: c calculada numéricamente a partir del sistema discreto (línea continua) y a partir de la ecuación (2.46) (línea discontinua): a) con coeficiente de difusión (2.11), b) con coeficiente de difusión (2.12), c) con coeficiente de difusión (2.13).

Como hemos observado, la aproximación de las funciones R_k por medio de deltas nos proporciona una buena aproximación de la concentración de monómeros c , sin embargo no podemos decir lo mismo de la aproximación de las soluciones r_k . Es por ello, que proponemos una expresión de las R_k por medio de gaussianas, la cual ofrece un mejor resultado para las r_k como podemos ver en la figura 2.12. Las gaussianas utilizadas dependen del coeficiente de difusión y tratamos que se ajusten lo más posible a las R_k , en especial para valores de k grandes (alrededor de 20), pues estos son los tamaños próximos al tamaño límite del modelo. Se trata de funciones de la forma:

$$R(k, s) = \frac{e^{-\frac{(\beta s - e(k))^2}{4\alpha(k)k}}}{(4\pi\alpha(k)k)^{\frac{1}{2}}}$$

donde, $\beta = \frac{1}{6}$. En el caso de coeficiente de difusión (2.11) tomamos:

$$e(k) = -0,00028a(k)^2 + 0,187356a(k) - 0,754826,$$

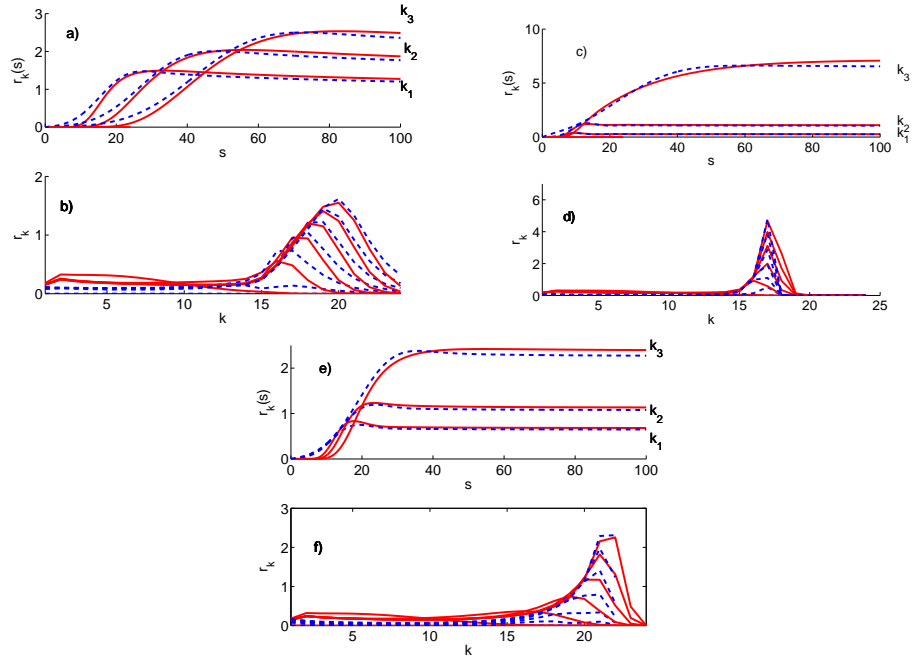


Figura 2.12: a) Soluciones r_k , para $k_1 = 19$, $k_2 = 21$, $k_3 = 23$, usando una aproximación gaussiana para las R_k (línea discontinua) y solución exacta (línea continua). b) Soluciones frente al tamaño de la burbuja, exactas (línea continua) y usando la aproximación gaussiana (línea discontinua), con coeficiente de difusión (2.11). c) y d) Análogas con coeficiente de difusión (2.12). e) y f) Análogas con coeficiente de difusión (2.13)

$$\alpha(k) = 0,002075k^2 - 0,06215k + 0,466775,$$

cuando D viene expresado por (2.12) las funciones e y α consisten en:

$$e(k) = 0,005622a(k)^2 - 0,007263a(k) + 0,836313,$$

$$\alpha(k) = 0,0491k^2 - 1,5175k + 11,7187$$

y, por último, para D como en (2.13) debemos tomar:

$$e(k) = 0,001649a(k)^2 + 0,102867a(k) + 0,278822,$$

$$\alpha(k) = 0,0088k^2 - 0,3365k + 3,2254.$$

En el caso D constante, la figura 2.13 parece sugerir que existen ciertos valores S_k de manera que las funciones R_k tienen forma de delta hasta dicho valor y son constantes a partir de él, es decir, son funciones continuas de la forma:

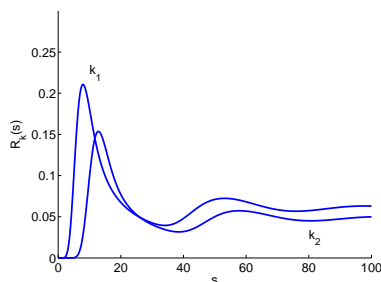


Figura 2.13: Aproximación de las funciones R_k , con coeficiente de difusión constante, para $k_1 = 12$ y $k_2 = 24$.

$$R_k(s) = \begin{cases} \delta(s - a(k)), & \text{si } s \leq S_k, \\ C_k, & \text{si } s > S_k. \end{cases} \quad (2.52)$$

Utilizando esta expresión para R_k podemos expresar r_k como:

$$r_k(s) = \begin{cases} \frac{2}{k^{\frac{1}{3}}} \int_0^s \delta(s - s' - a(k))c(s')ds', & \text{si } s \leq S_k, \\ \frac{2}{k^{\frac{1}{3}}} [\int_0^{S_k} \delta(s - s' - a(k))c(s')ds' + C_k \int_{S_k}^s c(s')ds'], & \text{si } s > S_k \end{cases} \quad (2.53)$$

En el caso en que $s \leq S_k$, sustituyendo (2.53) en (2.27) obtenemos:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 + 2c \sum_{k=2}^{\infty} \int_0^s \delta(s - s' - a(k))c(s')ds' = 1. \quad (2.54)$$

Procediendo análogamente a como se hace en [7] podemos aproximar $a(k)$ de la siguiente forma:

$$a(k) = \sum_{j=2}^k j^{-\frac{1}{3}} \sim \frac{3}{2}k^{\frac{2}{3}} - 3. \quad (2.55)$$

Usamos, ahora, esta expresión de a en el cálculo de la integral que aparece en (2.54). Haciendo el cambio de variable $s' = s - a(k)$ y escribiendo todo en

función de la variable t encontramos una ecuación integro-diferencial para la concentración de monómeros c :

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 + 2\sqrt{\frac{2}{3}}c \int_0^t (s(t) - s(t') + 3)^{\frac{1}{2}} [c(s(t'))]^2 dt' = 1 \quad (2.56)$$

Para el caso en que $s > S_k$, operando de la misma manera pero con la expresión correspondiente en (2.53) concluimos que se cumple:

$$c \frac{dc}{ds} + 4c^2 + 2c \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^{S_k} (s - s' + 3)^{\frac{1}{2}} c(s') ds' + C_k \int_{S_k}^s c(s') ds' \right] = 1,$$

en función de t :

$$\frac{dc}{dt} + 4c^2 + 2c \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \int_0^{T_k} (s(t) - s(t') + 3)^{\frac{1}{2}} [c(s(t'))]^2 dt' + C_k \int_{T_k}^t [c(s(t'))]^2 dt' \right] = 1, \quad (2.57)$$

donde T_k cumple que $s(T_k) = S_k$.

2.3. Existencia y unicidad de soluciones.

En esta sección justificaremos la existencia y unicidad de solución de nuestro problema. Para ello podemos seguir dos estrategias:

- Reescribir el problema como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, derivando la ley de conservación para r_1 .
- Recurrir a la formulación obtenida mediante transformadas de Laplace, para asegurar la existencia de una solución, c , de la ecuación integro-diferencial (2.46) y después obtener r_k mediante la formula (2.44).

En cualquiera de los casos se recurre a los resultados teóricos existentes, acerca de solución de sistemas de ecuaciones diferenciales en espacios de dimensión infinita ℓ^∞ o de solución de ecuaciones integro-diferenciales respectivamente.

Utilizaremos el sistema diferencial infinito para establecer existencia local. A continuación, la formulación integro-diferencial nos permite establecer la positividad de c , lo que garantiza que el cambio de variable de t a s está bien definido pues s es una función creciente de t . Finalmente, recurrimos al sistema diferencial en la variable s para establecer existencia global.

2.3.1. Existencia local

Vamos a obtener en primer lugar un resultado de existencia y unicidad local en el tiempo. Trabajando con la variable s tendríamos un problema lineal para $r_k(s)$, $k > 1$, pero parte de datos iniciales singulares. Conviene recurrir a la formulación original en la variable t , que es no lineal. Una vez establecida la existencia local, podemos utilizar la formulación lineal en la variable s para garantizar existencia global.

El problema del que partíamos era:

$$\frac{dr_k}{dt} = (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)r_1r_{k-1} - k^{\frac{1}{3}}D(k)r_1r_k, \quad k \geq 3, \quad (2.58)$$

$$\frac{dr_2}{dt} = 2D(1)r_1^2 - 2^{\frac{1}{3}}D(2)r_1r_2, \quad (2.59)$$

$$r_1 + \sum_{k=2}^{\infty} kr_k = \int_0^{\tilde{t}} g(t')dt' = t. \quad (2.60)$$

Derivando en función de t , la condición integral que da la última ecuación queda:

$$\frac{dr_1}{dt} = 1 - \sum_{k=2}^{\infty} k \frac{dr_k}{dt}, \quad (2.61)$$

e introduciendo en ella las ecuaciones (2.58) y (2.59) tenemos:

$$\frac{dr_1}{dt} = 1 - 4D(1)r_1r_1 - \sum_{k=3}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)r_1r_k. \quad (2.62)$$

Podemos ahora expresar de forma matricial nuestro sistema de infinitas ecuaciones diferenciales dadas por (2.58), (2.59) y (2.62) de manera que tenemos el siguiente problema de valor inicial:

$$Y' = F(t, Y), \quad Y(t_0) = Y_0$$

con $Y = (r_1, \dots, r_k, \dots)^T$, $t_0 = 0$, $Y_0 = \bar{0}$ y $F(t, Y) = r_1AY + G(t)$, siendo:

$$G(t) = (1, 0, \dots, 0, \dots)^T.$$

y

$$A = \begin{pmatrix} -4D(1) & -2^{\frac{1}{3}}D(2) & -3^{\frac{1}{3}}D(3) & \cdot & \cdot & -k^{\frac{1}{3}}D(k) & \cdot & \cdot & \cdot \\ 2D(1) & -2^{\frac{1}{3}}D(2) & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 2^{\frac{1}{3}}D(2) & -3^{\frac{1}{3}}D(3) & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1) & -k^{\frac{1}{3}}D(k) & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}.$$

Con el fin de asegurar la existencia y unicidad del problema anterior, tratamos de aplicar el siguiente teorema para espacios en dimensión infinita (véase [21]):

Teorema: Sea $y_0 \in Y$, Y Banach, sea B una bola cerrada en él con centro en $y_0 = 0$ y radio $\rho \geq 0$ y sea $f : [t_0, t_0 + \alpha] \times B \rightarrow Y$ una función continua tal que:

- $\|f(t, Y)\| \leq M$ para todo $(t, y) \in [t_0, t_0 + \alpha] \times B$.
- $\|f(t, y) - f(t, z)\| \leq g(t, \|y - z\|)$ cuando $(t, y), (t, z) \in (t_0, t_0 + \alpha] \times B$, donde g satisface la Propiedad 1, con $\beta = 2\rho$.

Entonces si $\eta = \min(\alpha, \frac{\rho}{M})$, el problema de valor inicial $y' = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$, tiene solución única para $t \in [t_0, t_0 + \eta]$.

La Propiedad 1 consiste en lo siguiente:

Propiedad 1: $g : (t_0, t_0 + \alpha] \times [0, \beta] \rightarrow [0, \infty)$ es una función continua que cumple:

- $g(t, 0) = 0$ para todo $t \in (t_0, t_0 + \alpha]$.
- Para cada $t_1 \in (t_0, t_0 + \alpha]$, $\chi = 0$ es la única solución de $x' = g(t, x)$ en $(t_0, t_1]$ tal que $\chi(t_0+) = 0$ y que $\lim_{t \rightarrow t_0+} \frac{\chi(t)}{t-t_0} = 0$.

Volviendo a nuestro problema, comprobamos que se cumplen todas las hipótesis del teorema anterior:

1) *Continuidad:*

$$F : [0, \alpha] \times B_{l^\infty}(\bar{0}, \rho) \longrightarrow l^\infty, \text{ es continua.}$$

2) *Acotación:*

$$\begin{aligned} \|F(t, r_1, \dots, r_k, \dots)\| &= \sup \left(|1 - 4D(1)r_1^2(t) - \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)r_1(t)r_k(t)|, \right. \\ &\quad |2D(1)r_1^2(t) - 2^{\frac{1}{3}}D(2)r_1(t)r_2(t)|, \dots, \\ &\quad \left. |(k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)r_1(t)r_{k-1}(t) - k^{\frac{1}{3}}D(k)r_1(t)r_k(t)|, \dots \right) \\ &\leq \sup \left(1 + 4D(1)\|Y\|^2 + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)\|Y\|^2, (2D(1) + 2^{\frac{1}{3}}D(2))\|Y\|^2, \right. \\ &\quad \left. \dots, ((k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1) + k^{\frac{1}{3}}D(k))\|Y\|^2, \dots \right) \\ &\leq 1 + C_0(D)\|Y\|^2 \leq 1 + C_0(D)\rho = M. \end{aligned}$$

3) *Condición de Lipschitz local:*

$$\begin{aligned} \|F(t, Y) - F(t, Z)\| &= \|F(t, r_1, \dots, r_k, \dots) - F(t, s_1, \dots, s_k, \dots)\| \\ &\leq \sup \left(4D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)|, \right. \\ &\quad 2D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + 2^{\frac{1}{3}}D(2)|r_1(t)r_2(t) - s_1(t)s_2(t)|, \\ &\quad \dots, (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)|r_1(t)r_{k-1}(t) - s_1(t)s_{k-1}(t)| + \\ &\quad \left. k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)|, \dots \right). \end{aligned}$$

Acotamos los tres tipos de términos por separado:

$$\begin{aligned} &4D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)| \\ &= 4D(1)|r_1(t) + s_1(t)||r_1(t) - s_1(t)| \\ &+ \sum_{k=2}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - r_k(t)s_1(t) + r_k(t)s_1(t) - s_1(t)s_k(t)| \\ &\leq C_1\rho\|Y - Z\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 2D(1)|r_1^2(t) - s_1^2(t)| + 2^{\frac{1}{3}}D(2)|r_1(t)r_2(t) - s_1(t)s_2(t)| \\
& \quad = 2D(1)|r_1(t) + s_1(t)||r_1(t) - s_1(t)| \\
& + 2^{\frac{1}{3}}D(2)|r_1(t)r_2(t) - r_2(t)s_1(t) + r_2(t)s_1(t) - s_1(t)s_2(t)| \\
& \quad \leq C_2\rho\|Y - Z\|
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)|r_1(t)r_{k-1}(t) - s_1(t)s_{k-1}(t)| \\
& \quad + k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - s_1(t)s_k(t)| = \\
& (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)|r_1(t)r_{k-1}(t) - r_{k-1}(t)s_1(t) + r_{k-1}(t)s_1(t) - s_1(t)s_{k-1}(t)| \\
& \quad + k^{\frac{1}{3}}D(k)|r_1(t)r_k(t) - r_k(t)s_1(t) + r_k(t)s_1(t) - s_1(t)s_k(t)| \\
& \quad \leq C_3\rho\|Y - Z\|
\end{aligned}$$

Llamando $C = \max(C_1, C_2, C_3)$ y

$$G(t, \|Y - Z\|) = \rho C \|Y - Z\|,$$

tenemos que

$$\|F(t, Y) - F(t, Z)\| \leq G(t, \|Y - Z\|),$$

para todo, $(t, Y), (t, Z) \in (0, \alpha) \times B_{l^\infty}(\bar{0}, \rho)$. Además, la función G cumple la Propiedad 1, con lo que podemos aplicar el teorema.

Teorema 2.1. *Existe una única solución del problema (2.58), (2.59), (2.60), con condiciones iniciales $c(0) = 0$ y $r_k(0) = 0, k \geq 2$, definida hasta un tiempo $\eta = \frac{\rho}{M}$.*

2.3.2. Positividad

La ecuación (2.62) y el hecho de partir de datos iniciales nulos garantizan que $c = r_1$ es positiva durante un cierto tiempo. Si para algún tiempo posterior $c(t_0) = 0$, (2.62) implica que $\frac{dc}{dt}(t_0) = 1$. Una función positiva no puede anularse con derivada positiva, luego $c > 0$ para todo $t > 0$. Como los núcleos R_k son no negativos, (2.44) implica que $r_k, k > 2$ son no negativos. Hemos probado que

Teorema 2.2. *La solución $c = r_1$ de (2.46) que arranca de $c(0) = 0$ y las funciones r_k definidas por (2.44) son no negativas si los núcleos R_k son no negativos y la serie $\sum_{k=2}^{\infty} R_k$ es finita. Además, $c > 0$ para todo $t > 0$.*

Por tanto, podemos definir el cambio de variable $\frac{ds}{dt} = c(s)$ y $s(t)$ es positiva y creciente durante ese tiempo. Esto nos permite reescribir el sistema (2.58), (2.59), (2.62) en función de la variable s , aplicar la transformada de Laplace como en la Sección 3.2. para obtener la ecuación integro-diferencial (2.46) para c .

Reescribiendo (2.46) en la variable t obtenemos

$$\frac{dc}{dt} + 4D(1)c^2 + 2D(1)c \int_0^t \left[\sum_{k=2}^{\infty} R_k(s(t) - s(t')) \right] c^2(s(t')) dt' = 1, \quad (2.63)$$

$$\frac{ds}{dt} = c(t), \quad (2.64)$$

que se puede utilizar alternativamente para dar resultados de existencia para c (y consecuentemente, para r_k). Basta reescribir (2.63) y (2.64) como:

$$U'(t) = F(t, U(t), z(t)), \quad (2.65)$$

$$z(t) = \int_0^t K(t, t', U(t')), \quad (2.66)$$

con condición inicial

$$U(0) = \bar{0}, \quad (2.67)$$

donde

$$U(t) = (u_1, u_2) = (c(t), s(t)) \quad (2.68)$$

$$K(t, t', U(t')) = \sum_{k=2}^{\infty} R_k(u_2(t) - u_2(t')) u_1^2(t'), \quad (2.69)$$

$$F(t, U(t), z(t)) = (F_1, F_2) = (1 - 4D(1)u_1^2(t) + 2D(1)u_1(t)z(t), u_1(t)). \quad (2.70)$$

Integramos en (2.65) para conseguir:

$$U(t) = \int_0^t F(t', U(t'), z(t')) dt'$$

que unida a la ecuación (2.66) da lugar a la siguiente ecuación integral de Volterra:

$$V(t) = \int_0^t G(t, t', V(t')) dt', \quad (2.71)$$

$$V(t_0) = V_0, \quad (2.72)$$

donde,

$$V(t) = (u_1(t), u_2(t), z(t)), \quad (2.73)$$

$$G(t, t', V(t')) = (G_1, G_2, G_3) = (F_1(t, V), F_2(t, V), K(t, t', V),) \quad (2.74)$$

para después aplicar el siguiente teorema (véase [18]):

Teorema. Sea el problema integral

$$x(t) = f(t) + \int_0^t g(t, t', x(t')) dt', t \in [t_0, t_0 + \alpha]$$

de manera que se satisfacen:

- 1) f es una aplicación continua de $[t_0, t_0 + \alpha]$ en \mathbb{R}^n ;
- 2) g es una aplicación continua de $\Delta \times B_r$, donde $\Delta = (t, t')/t_0 \leq t' \leq t_0 + \alpha$ y B_r la bola de centro $\bar{0}$ y radio r ;
- 3) $g(t, t', x)$ es localmente Lipschitz en la variable x ;
- 4) Si $\beta = \sup_{t \in [t_0, t_0 + \alpha]} |f(t)|$, entonces $\beta < r$.

Entonces el problema integral tiene solución única continua en un intervalo $[t_0, t_0 + \delta]$. Además esta solución es el límite uniforme de la sucesión de aproximaciones sucesivas.

En nuestro caso $f(t) = 0$ así que las condiciones 1) y 4) se cumplen trivialmente. Además $G(t, t', V(t'))$ es continua, luego se cumple 2). Por otro lado, sus derivadas parciales existen y son continuas con lo que es localmente Lipschitz, es decir, se cumple 3). Comprobado esto estamos en posición de enunciar el siguiente teorema:

Teorema 2.3. *La ecuación integro-diferencial (2.46) tiene solución única.*

Además, por el método de las aproximaciones sucesivas, si definimos la sucesión $V_0 = \bar{0}$, $V_m = \int_0^t G(t, t', V_{m-1}) dt'$, $m \geq 1$ tenemos que $V(t) = \lim_{m \rightarrow \infty} V_m(t)$.

2.3.3. Existencia global

Una vez establecida la existencia local, la positividad de c y la corrección del cambio de variable $s(t)$, tomamos como nuevo dato inicial los valores $r_k(\tau)$, $k = 1, 2, \dots$ en un tiempo τ en el que $c(\tau) = r_1(\tau) \neq 0$. Podemos entonces considerar un nuevo problema de valores iniciales en la variable s :

$$\frac{dr_k}{ds} = (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1)r_{k-1} - k^{\frac{1}{3}}D(k)r_k, \quad k \geq 3, \quad (2.75)$$

$$\frac{dr_2}{ds} = 2D(1)r_1 - 2^{\frac{1}{3}}D(2)r_2, \quad (2.76)$$

$$\frac{dr_1}{ds} = \frac{1}{r_1} - 4D(1)r_1 - \sum_{k=3}^{\infty} k^{\frac{1}{3}}D(k)r_k, \quad (2.77)$$

arrancando de un valor s_0 en el que $r_1(s_0) > 0$. Tenemos pues $0 < m' < r_1(s)$ para $s_0 < s < s'$, cualquiera que sea s' . Por la teoría de ecuaciones diferenciales ordinarias, sabemos que una solución local se puede extender hasta un tiempo maximal. Se tienen dos opciones, o ese tiempo maximal es infinito y tenemos existencia global, o es finito y la solución explota en el sentido de que alguna norma de la solución se hace infinito al acercarse a ese tiempo.

En la variable s , tenemos el siguiente problema de valor inicial:

$$Y' = F(s, Y), \quad Y(s_0) = Y_0$$

con $Y = (r_1, \dots, r_k, \dots)^T$, $Y_0 = Y(\tau)$ y $F(s, Y) = AY + G(s)$, siendo:

$$A = \begin{pmatrix} -4D(1) & -2^{\frac{1}{3}}D(2) & -3^{\frac{1}{3}}D(3) & \cdot & \cdot & -k^{\frac{1}{3}}D(k) & \cdot & \cdot & \cdot \\ 2D(1) & -2^{\frac{1}{3}}D(2) & 0 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 2^{\frac{1}{3}}D(2) & -3^{\frac{1}{3}}D(3) & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & (k-1)^{\frac{1}{3}}D(k-1) & -k^{\frac{1}{3}}D(k) & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix},$$

y

$$G(s) = \left(\frac{1}{r_1(s)}, 0, \dots, 0, \dots \right)^T.$$

Si $G(s) = 0$, tenemos un problema lineal en un espacio de Banach de dimensión infinita y la existencia de solución global está garantizada (véase el primer teorema de la sección 2.3.1 y [21]).

En nuestro caso, $G(s) = \frac{1}{r_1}$, y hemos probado que $0 < G(s) < \frac{1}{m'}$ para $s_0 < s < s'$, cualquiera que sea s' . Además, $G(s)$ tiende a cero si r_1 tiende a infinito. Tenemos un problema lineal con una perturbación localmente acotada. No puede haber explosión en tiempo finito y la solución está definida para todo s .

Hemos probado que:

Teorema 2.4. *El sistema (2.58), (2.59), (2.62) con datos iniciales nulos tiene una única solución definida para todo $t > 0$.*

De la resolución numérica del sistema y las fórmulas aproximadas, se concluye que las soluciones están globalmente acotadas. Para probarlo, bastaría acotar globalmente c . Las r_k están automáticamente acotadas, debido a su expresión integral ya que los núcleos R_k los están.

2.4. Tratamiento numérico.

Una vez asegurada la existencia y unicidad de la solución de nuestro problema, en esta sección trataremos las estrategias numéricas para atacar la ecuación integro-diferencial (2.46). Primero mostraremos los principales resultados teóricos al respecto y, posteriormente, discutiremos la efectividad de algunos esquemas concretos.

2.4.1. Resultados teóricos.

Consideremos la siguiente ecuación integro-diferencial de Volterra:

$$u'(t) = F(t, u(t), z(t)), \quad (2.78)$$

$$z(t) = \int_0^t K(t, s, u(s)) ds. \quad (2.79)$$

$$u(0) = u_0$$

Como hemos dicho, nuestro objetivo es aproximar la solución $u(t)$ de (2.78)

con $0 \leq t \leq \alpha$ usando un esquema numérico. Para hacer esto, podemos seguir tres estrategias distintas: podemos combinar una fórmula de cuadratura lineal para aproximar $z(t)$ y un método clásico para ecuaciones diferenciales ordinarias, podemos integrar la primera ecuación para tratar el problema como un sistema de ecuaciones integrales de manera que usaremos dos fórmulas de cuadratura lineal o, en los casos en los que $K(t, s, u(s))$ tiene una expresión simple, podemos derivar la segunda ecuación para tratarlo como un sistema de ecuaciones diferenciales. En cualquiera de los casos, elegimos un paso fijo h y denotamos por N al número de pasos ($Nh = \alpha$).

Para enfrentarnos a la ecuación dada por (2.65)-(2.70), hemos elegido la primera de las estrategias de modo que, si discretizamos, nos queda:

$$u'(t_i) = F(t_i, u(t_i), z(t_i)),$$

$$z(t_i) = \int_0^{t_i} K(t_i, s, u(s)) ds.$$

Aproximamos $z(t_i)$ por la fórmula:

$$z_i = h \sum_{j=0}^i \omega_j^i K(t_i, t_j, u_j), \quad (2.80)$$

y, aplicando un método multipaso lineal de p pasos a (2.78), tenemos:

$$\sum_{n=0}^p \alpha_n u_{i+n} = h \sum_{n=0}^p \beta_n F_{n+i}, \quad (2.81)$$

donde $F_n = F(t_n, u_n, z_n)$. Si aproximamos los p primeros valores usando un método monopaso adecuado obtenemos el método:

$$\sum_{n=0}^p \alpha_n u_{i+n} = h \sum_{n=0}^p \beta_n F(t_{i+n}, u_{i+n}, h \sum_{j=0}^{i+n} \omega_j^{i+n} K(t_{i+n}, t_j, u_j)). \quad (2.82)$$

P. Linz demuestra en [31] que, para asegurar la convergencia de un método de la forma (2.82), es suficiente exigir los criterios clásicos acerca de 0-estabilidad y consistencia.

Definición. Un método de la forma (2.82) se dice que es *estable* si todas las raíces del polinomio

$$\rho(z) = \sum_{n=0}^p \alpha_n z^n$$

están en el interior del círculo unidad o en su frontera, $|z| \leq 1$, y las raíces de módulo uno son simples.

También consideraremos el polinomio

$$\sigma(z) = \sum_{n=0}^p \beta_n z^n$$

pudiendo definir así el siguiente concepto:

Definición. Decimos que un método de la forma (2.82) es *consistente* si:

- (i) $\rho(1) = 0$,
- (ii) $\rho'(1) = \sigma(1)$,
- (iii) los pesos de la fórmula de cuadratura ω_j^i están acotados, $|\omega_j^i| \leq W$, para cada i y todo $j \leq i$, y son tales que para cualquier función continua $f(x)$,

$$\int_0^t f(s) ds - h \sum_{j=0}^i \omega_j^i f(t_j) \longrightarrow 0,$$

donde $h \rightarrow 0$, $i \rightarrow \infty$ y $hi = t$.

Definición. Un método de la forma (2.82) se dice que es *convergente* si

$$|e_i| = |u(t_i) - u_i| \longrightarrow 0,$$

cuando $h \rightarrow 0$, $i \rightarrow \infty$ y $hi = t$.

El siguiente teorema da una condición suficiente de convergencia. Se puede encontrar una demostración en [31].

Teorema. Un método consistente y estable de la forma (2.82) es convergente.

Por otro lado, in [32], W.L. Mokarsky muestra resultados análogos a los de Linz, pero abordando el problema con la segunda estrategia, esto es, aplicando dos fórmulas de cuadratura lineal al problema integral:

$$u_i = \sum_{j=0}^i \nu_j^i F(t_i, u_j, h \sum_{k=0}^j \omega_k^j K(t_j, t_k, u_k)) + u_0. \quad (2.83)$$

Definición. Un método de la forma (2.83) se dice que es *consistente* si para cualquier función f continua en $[0, \xi]$ se cumple:

$$\left| \int_0^\xi f(s) ds - h \sum_{j=0}^i \omega_j^i f(t_j) \right| \longrightarrow 0,$$

$$\left| \int_0^\xi f(s) ds - h \sum_{j=0}^i \nu_j^i f(t_j) \right| \longrightarrow 0,$$

cuando $h \rightarrow 0$, $i \rightarrow \infty$ y $hi = \xi$.

Se prueba en [32] que:

Teorema. Cualquier método consistente de la forma (2.83) es también convergente.

2.4.2. Esquemas numéricos.

Como vimos en la figura 2.11 de la sección 3.3, para obtener una buena aproximación de la concentración de monómeros, basta con tomar R_k en forma de función delta. Usando esta expresión hemos realizado distintos esquemas numéricos basándonos en las estrategias descritas en el punto anterior. A la hora de elegir un método numérico para resolver un problema, además de asegurar la convergencia del método utilizado, así como conocer el orden de ésta, es muy importante tener en cuenta la estabilidad de dicho método aplicado a nuestro problema concreto. Así, debido a la rigidez del problema podemos encontrarnos con que un método de orden menor nos proporciona mejores resultados, incluso usando un paso de mayor tamaño. Es por esto que hemos llevado a cabo pruebas a tiempos largos con las distintas opciones, para poder concluir qué método nos proporciona mejores resultados con menor coste computacional.

La presencia de términos integrales fuerza el uso de discretizaciones con paso temporal constante. Por un lado hemos utilizado métodos que combinan una fórmula de cuadratura lineal con un método clásico para sistemas de EDO's. En concreto hemos diseñado dos esquemas de orden dos, ambos usan la fórmula del trapecio compuesto para aproximar la integral y uno la combina con el Método de Euler y otro con un Runge-Kutta de orden dos. También hemos tratado el problema con dos métodos de orden cuatro, usando para la integral el método de Simpson compuesto junto con un Runge-Kutta de orden cuatro en un caso y con un multipaso de orden cuatro en el otro.

Por otro lado hemos diseñado esquemas siguiendo la segunda estrategia expuesta en la sección 5.1, es decir, convirtiendo el problema en uno integral y aplicando dos fórmulas de cuadratura. Los dos diseños en este caso se basan en utilizar o bien la fórmula del trapecio (orden dos), o bien la de Simpson (orden cuatro).

Después de comparar los resultados obtenidos en cada uno de los casos, podemos concluir que el que mejor resultados nos ofrece es precisamente el primero, Euler con Trapecio. Obtenemos con él muy buenas aproximaciones utilizando un paso de tamaño mayor que en los otros casos, lo que nos lleva a menor tiempo de ejecución.

Capítulo 3

Ondas discretas unidimensionales

A partir de este capítulo nos vamos a centrar en el desarrollo y evaluación de condiciones de contorno no reflectantes para sistemas atómicos de complejidad creciente. Este capítulo está dedicado al estudio de sistemas unidimensionales.

Consideramos una cadena atómica rígida por la dinámica

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = V'(u_{n+1} - u_n) - V'(u_n - u_{n-1}), \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.1)$$

donde u_n representa el desplazamiento del átomo n -ésimo con respecto a su posición de equilibrio. $M > 0$ es la masa atómica y V el potencial interatómico. Suponemos que los posibles defectos están concentrados en la región $|n| \ll N$. Cuando n está próximo a N , podemos linealizar las ecuaciones de movimiento reemplazando (3.1) por:

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad K > 0, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.2)$$

Colocamos una frontera artificial en $|n| = N$ y buscamos condiciones de contorno no reflectantes que permitan calcular la evolución de la cadena truncada sin introducir efectos espúreos. Como hemos indicado en el capítulo 1, podemos optar por buscar condiciones de contorno exactas (transparentes), locales aproximadas (absorbentes) o capas acopladas de amortiguación. Vamos a optar por buscar una condición de contorno exacta para (3.2). Esto significa que resolver el problema en la cadena truncada $|n| \leq N$ con esa

condición de contorno produce el mismo resultado que resolver el problema completo (3.2). Si se utilizan estas condiciones para el problema no lineal (3.1), dejan de ser exactas debido a la linealización, pero se espera que funcionen razonablemente en determinadas condiciones. La primera etapa a la hora de derivar estas condiciones de contorno consiste en calcular la función de Green del problema linealizado. Esta tarea se lleva a cabo en la sección 3.1. Gracias las funciones de Green podemos expresar la contribución de la región suprimida sobre el recinto computacional como una fuerza ejercida sobre la frontera y derivar condiciones de contorno exactas en la sección 3.2. Las condiciones de contorno resultantes involucran integrales en tiempo. A continuación, indicamos cómo truncar las integrales en las expresiones integrodiferenciales resultantes para obtener aproximaciones absorbentes. En la sección 3.3, testamos la eficiencia de estas aproximaciones para suprimir reflexiones en distintos tipos de ecuaciones de ondas discretas, lineales y no lineales.

Como hemos indicado en el capítulo 1, se conocen condiciones de contorno no reflectantes para múltiples problemas continuos, entre ellos la ecuación de ondas. Desde un punto de vista numérico, se podría considerar (3.2) como la discretización por el método de las líneas de la ecuación de ondas unidimensional:

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0, \quad x \in [a, b],$$

en la malla $x_n = a + nh$, $n = 0, \dots, N$ con $h = \frac{b-a}{N+1}$. Llamando $u_n(t) = u(x_n, t)$ y empleando la aproximación

$$u_{xx}(x_n, t) = \frac{u_{n+1}(t) - 2u_n(t) + u_{n-1}(t)}{h^2} + O(h^2),$$

resulta la ecuación aproximada:

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = \frac{c^2}{h^2} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (3.3)$$

Desde este punto de vista, se podría pensar en complementar (3.2) con discretizaciones de las condiciones no reflectantes conocidas para la ecuación de ondas continua. Este procedimiento se encuentra con dos dificultades prácticas. La primera es que el coeficiente $\frac{c^2}{h^2}$ en (3.3) suele ser muy grande, ya que el paso de discretización h ha de ser pequeño en una aproximación de la ecuación de ondas (estamos en el límite continuo). Sin embargo, $\frac{K}{M}$ está determinado por las constantes de los átomos que formen la cadena y no tiene por

qué tomar valores grandes. La segunda dificultad ya se comentó en el capítulo 1. Al discretizar las condiciones no reflectantes para la ecuación de ondas, no necesariamente resultan condiciones de contorno discretas que supriman las reflexiones del modelo discreto, ya que las ondas de los modelos continuos y discretos obedecen leyes de dispersión distintas. Por ello recurrimos directamente al diseño de condiciones de contorno para el problema discreto (3.2), algo que no parece haberse hecho con anterioridad. Los únicos antecedentes medianamente relacionados que conocemos son el diseño de condiciones no reflectantes exactas para ecuaciones de ondas tridimensionales discretizadas en tiempo y espacio (que no se extienden a otros modelos y otras dimensiones) [35] y el diseño de discretizaciones de ecuaciones de ondas especiales para las cuales se pueden dar condiciones de contorno discretas no reflectantes [26]. En nuestro caso, el modelo discreto de partida está fijado.

3.1. Funciones de Green

En esta primera sección calculamos las funciones de Green para cadenas unidimensionales bajo distintas condiciones. Las funciones de Green para cadenas atómicas conservativas como (3.2) fueron calculadas por Schrödinger en [36]. Sus propiedades se analizan en detalle en [4]. En [4] se calculan igualmente funciones de Green para cadenas con interacciones más generales (que incluyen las ecuaciones de Klein-Gordon discretas). En [11] se consideran cadenas disipativas, que incluyen términos de fricción. Detallamos a continuación el aspecto de las funciones de Green para ecuaciones de ondas y Klein-Gordon discretas en el caso conservativo y disipativo.

3.1.1. Ecuaciones de ondas discretas

Se trata de dar una representación integral de la solución del problema:

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + f_n, \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.4)$$

$$u_n(0) = u_n^0, \quad \frac{du_n}{dt}(0) = u_n^1, \quad (3.5)$$

donde $D = \frac{K}{M} > 0$. Se tiene el siguiente resultado:

Teorema 3.1. *La solución del problema de valores iniciales (3.4)-(3.5) se expresa como*

$$u_n(t) = \sum_{n'} [G_{n,n'}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{dG_{n,n'}^0}{dt}(t) u_{n'}(0)] + \int_0^t \sum_{n'} G_{n,n'}^0(t-s) f_{n'}(s) ds \quad (3.6)$$

en términos de la función de Green

$$G_{n,n'}^0(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{e^{i(n-n')\theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t) \quad (3.7)$$

y de los datos iniciales y fuente.

Demostración. Se procede como sigue. En primer lugar, se elimina el operador en diferencias introduciendo funciones generatrices $p(\theta, t)$ y $f(\theta, t)$:

$$p(\theta, t) = \sum_n u_n(t) e^{-in\theta}, \quad f(\theta, t) = \sum_n f_n(t) e^{-in\theta}. \quad (3.8)$$

Derivando p respecto a t y usando la ecuación (3.4), vemos que p es solución de la ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{d^2 p}{dt^2}(\theta, t) + \omega(\theta)^2 p(\theta, t) = f(\theta, t) \quad (3.9)$$

donde $\omega(\theta)^2 = 4D \sin^2(\frac{\theta}{2})$, con las condiciones iniciales obvias para $p(\theta, t)$, obtenidas a partir de las condiciones iniciales para $u_n(t)$. La solución p depende de las raíces del polinomio $r^2 + \omega(\theta)^2 = 0$:

$$p(\theta, t) = p(\theta, 0) \cos(\omega(\theta)t) + \frac{dp}{dt}(\theta, 0) \frac{\sin(\omega(\theta)t)}{\omega(\theta)} + \int_0^t \frac{\sin(\omega(\theta)(t-s))}{\omega(\theta)} f(\theta, s) ds \quad (3.10)$$

y la solución $u_n(t)$ de (3.4) se recupera invirtiendo la transformada de Fourier (3.8):

$$u_n(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{in\theta} p(\theta, t), \quad (3.11)$$

que podemos reescribir como (3.6)-(3.7).

La convergencia de sumas en (3.7) se deduce del decaimiento espacial de las funciones de Green. Integrando por partes en (3.7) y usando la periodicidad de $e^{i(n-n')}$ concluimos que $G_{n,n'}^0$ decae como $|n-n'|^p$ para cualquier $p > 1$. Como $\omega(\theta)$ es par respecto a θ , la función de Green (3.7) es real.

3.1.2. Ecuaciones de Klein-Gordon discretas

Consideramos una cadena atómica regida por la dinámica

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = V'(u_{n+1} - u_n) - V'(u_n - u_{n-1}) + W(u_n), \quad n \in \mathbb{N}$$

en lugar de (3.1). u_n representa el desplazamiento del átomo n -ésimo con respecto a su posición de equilibrio. $M > 0$ es la masa atómica, V el potencial interatómico y W un potencial 'on-site'. Al linealizar obtenemos

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - Au_n, \quad M, K, A, > 0, n \in \mathbb{N}. \quad (3.12)$$

La función de Green se halla modificando ligeramente los argumentos de la Sección 3.1.1. Basta actualizar la definición de $\omega(\theta)$: $\omega(\theta)^2 = 4D \sin^2(\frac{\theta}{2}) + A$, con $D = \frac{K}{M}$.

3.1.3. Problemas con fricción

Al añadir fricción, (3.2) y (3.12) se transforman en

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} + \gamma \frac{du_n}{dt} = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - Au_n, \quad M, K, \gamma > 0, A \geq 0 \quad (3.13)$$

y la expresión integral para u_n cambia. Aparece la segunda componente de la función de Green, G_{nk}^1 , que es distinta de la derivada en tiempo de G_{nk}^0 y la reemplaza en la fórmula.

Teorema 3.2. *La solución del problema de valores iniciales*

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} + \gamma \frac{du_n}{dt} = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - Au_n + f_n, \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.14)$$

$$u_n(0) = u_n^0, \quad \frac{du_n}{dt}(0) = u_n^1, \quad (3.15)$$

se expresa como

$$u_n(t) = \sum_k [G_{nk}^0(t)u'_k(0) + G_{nk}^1(t)u_k(0)] + \int_0^t \sum_k G_{nk}^0(t-s)f_k(s)ds \quad (3.16)$$

donde

$$\begin{aligned} G_{nk}^0(t) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{i(n-k)\theta} g^0(\theta, t) \\ G_{nk}^1(t) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{i(n-k)\theta} g^1(\theta, t) \end{aligned} \quad (3.17)$$

siendo

$$g^0(\theta, t) = \begin{cases} \frac{e^{r_+(\theta)t} - e^{r_-(\theta)t}}{r_+(\theta) - r_-(\theta)}, & \theta \in I_1 \\ e^{\frac{-\gamma}{2}t}, & \theta \in P \\ e^{\frac{-\gamma}{2}t} \frac{\sin(I(\theta)t)}{I(\theta)}, & \theta \in I_2 \end{cases} \quad (3.18)$$

$$g^1(\theta, t) = \begin{cases} \frac{e^{r_-(\theta)t} r_+(\theta) - e^{r_+(\theta)t} r_-(\theta)}{r_+(\theta) - r_-(\theta)}, & \theta \in I_1 \\ e^{\frac{-\gamma}{2}t} (1 + \frac{\gamma}{2}t), & \theta \in P \\ e^{\frac{-\gamma}{2}t} \left[\cos(I(\theta)t) + \frac{\gamma \sin(I(\theta)t)}{2I(\theta)} \right], & \theta \in I_2. \end{cases} \quad (3.19)$$

Demostración. Con este nuevo sistema, la función generatriz p depende de las raíces de $r^2 + \gamma r + \omega(\theta)^2 = 0$. Si $\frac{\gamma^2}{4} > \omega^2(\theta)$,

$$\begin{aligned} p(\theta, t) &= p(\theta, 0) \frac{e^{r_-(\theta)t} r_+(\theta) - e^{r_+(\theta)t} r_-(\theta)}{r_+(\theta) - r_-(\theta)} \\ &\quad + p'(\theta, 0) \frac{e^{r_+(\theta)t} - e^{r_-(\theta)t}}{r_+(\theta) - r_-(\theta)} \\ &\quad + \int_0^t \frac{e^{r_+(\theta)(t-s)} - e^{r_-(\theta)(t-s)}}{r_+(\theta) - r_-(\theta)} f(\theta, s) ds, \end{aligned} \quad (3.20)$$

donde $r_{\pm}(\theta) = \frac{-\gamma \pm \sqrt{\alpha(\theta)}}{2} < 0$ y $\alpha(\theta) = \gamma^2 - 4\omega(\theta)^2$. Si $\frac{\gamma^2}{4} < \omega^2(\theta)$, las raíces son complejas:

$$\begin{aligned}
p(\theta, t) = & p(\theta, 0)e^{\frac{-\gamma}{2}t} \left[\cos(I(\theta)t) + \frac{\gamma \sin(I(\theta)t)}{2I(\theta)} \right] \\
& + p'(\theta, 0) e^{\frac{-\gamma}{2}t} \frac{\sin(I(\theta)t)}{I(\theta)} \\
& + \int_0^t e^{\frac{-\gamma}{2}(t-s)} \frac{\sin(I(\theta)(t-s))}{I(\theta)} f(\theta, s) ds,
\end{aligned} \tag{3.21}$$

donde $I(\theta) = \frac{\sqrt{-\alpha(\theta)}}{2}$. Si $\frac{\gamma^2}{4} = \omega^2(\theta)$,

$$\begin{aligned}
p(\theta, t) = & p(\theta, 0)e^{\frac{-\gamma}{2}t} \left(1 + \frac{\gamma}{2}t \right) + p'(\theta, 0) e^{\frac{-\gamma}{2}t} t \\
& + \int_0^t (t-s) e^{\frac{-\gamma}{2}(t-s)} f(\theta, s) ds.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

La solución $u_n(t)$ de (3.14) es:

$$u_n(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{in\theta} p(\theta, t), \tag{3.23}$$

donde la función $p(\theta, t)$ viene dada por (3.20) cuando $\theta \in I_1$:

$$I_1 = \left\{ \theta \in [-\pi, \pi] \mid \frac{\gamma^2}{4} > \omega^2(\theta) \right\}, \tag{3.24}$$

por (3.21) cuando $\theta \in I_2$:

$$I_2 = \left\{ \theta \in [-\pi, \pi] \mid \frac{\gamma^2}{4} < \omega^2(\theta) \right\}, \tag{3.25}$$

y por (3.22) si $\theta \in I_3$:

$$P = \left\{ \theta \in [-\pi, \pi] \mid \frac{\gamma^2}{4} = \omega^2(\theta) \right\}. \tag{3.26}$$

Nótese que $I_1 = P = \emptyset$ si $\gamma^2 < 4$ y $I_2 = P = \emptyset$ si $\gamma^2 > 4(A + 4D)$. $P \neq \emptyset$ sólo si $4(A + 4D) < \gamma^2 < 4$ y consta de dos puntos.

La fórmula (3.23) se transforma así en (3.16)-(3.19).

3.2. Condiciones de contorno exactas

En esta sección utilizamos las funciones de Green para cadenas infinitas derivadas en la sección anterior para obtener condiciones de contorno exactas en paredes artificiales.

Consideremos en primer lugar la geometría más simple, con $A = 0$. Colocamos una frontera artificial en $n = 0$ y restringimos el recinto computacional a la región $n \geq 0$. Necesitamos una condición de contorno para calcular $u_0(t)$ y cerrar el sistema (3.4). En principio,

$$\frac{d^2 u_0}{dt^2} = D(u_1 - 2u_0 + u_{-1}) + f_0, \quad (3.27)$$

pero $u_{-1}(t)$ es desconocido a no ser que se resuelva (3.4)-(3.5) para $n \leq 0$. Reescribimos (3.4) en $n = -1$ como:

$$\frac{d^2 u_{-1}}{dt^2} = D(0 - 2u_{-1} + u_{-2}) + f_{-1} + Du_0. \quad (3.28)$$

Suponiendo $u_0(t)$ conocido, el problema (3.4)-(3.5) para $n \leq 0$ con condición de contorno $u_0(t)$ puede reformularse como un problema con condición de contorno nula en la pared y término fuente modificado: $f_n + D\delta_{n,-1}u_0$, $n < 0$. Podemos extender este problema a todo el espacio definiendo

$$v_n = \begin{cases} u_n & n < 0 \\ 0 & n = 0 \\ -u_{-n} & n > 0. \end{cases} \quad (3.29)$$

La extensión v_n satisface

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = D(v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}) + g_n, \quad (3.30)$$

$$v_n(0) = v_n^0, \quad \frac{dv_n}{dt}(0) = v_n^1, \quad (3.31)$$

para todo n , siendo v_n^0 y v_n^1 extensiones impares de u_n^0 y u_n^1 definidas como en (3.29). La fuente g_n se obtiene extendiendo $f_n + D\delta_{n,-1}u_0$ de la misma forma. Hemos incluido la condición de contorno u_0 como una fuerza que actúa sobre u_{-1} con el fin de posibilitar la extensión impar con $v_0 = 0$. Usando la

expresión integral (3.6) y la simetría de los datos obtenemos para $n < 0$

$$\begin{aligned} u_n(t) &= v_n(t) = \sum_{n' \leq 0} [\mathcal{G}_{n,n'}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{n,n'}^0}{dt}(t) u_{n'}(0)] \\ &\quad + \int_0^t \sum_{n' \leq 0} \mathcal{G}_{n,n'}^0(t-s) (f_{n'}(s) + D\delta_{n',-1} u_0(s)) ds, \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde $\mathcal{G}_{n,n'}^0 = G_{n,n'}^0 - G_{n,-n'}^0$ es la función de Green para el semiespacio $n < 0$ con condición de contorno nula en $n = 0$. De esta forma, obtenemos una expresión cerrada para u_{-1} :

$$\begin{aligned} u_{-1}(t) &= r_{-1}(t) + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_0(s) ds, \\ r_{-1}(t) &= \sum_{n' \leq 0} [\mathcal{G}_{-1,n'}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{-1,n'}^0}{dt}(t) u_{n'}(0) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{G}_{-1,n'}^0(t-s) f_{n'}(s) ds]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

El término $r_{-1}(t)$ representa la contribución de la región exterior suprimida a la evolución en el recinto computacional $n \geq 0$. La condición de contorno en $n = 0$ toma la forma:

$$\frac{d^2 u_0}{dt^2} = D \left(u_1 - 2u_0 + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_0(s) ds \right) + Dr_{-1} + f_0, \quad (3.34)$$

con núcleo de integración

$$\mathcal{G}_{-1,-1}^0(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{1 - e^{-2i\theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t). \quad (3.35)$$

Combinando este argumento en dos paredes opuestas obtenemos condiciones no reflectantes para recintos truncados con fronteras artificiales en $n = \pm N$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{\pm N}}{dt^2} &= D \left(u_{\pm(N-1)} - 2u_{\pm N} + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_{\pm N}(s) ds \right) \\ &\quad + Dr_{\pm(N+1)} + f_{\pm N}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

usando

$$\begin{aligned} u_{-N-1}(t) &= r_{-N-1}(t) + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_{-N}(s) ds, \\ r_{-N-1}(t) &= \sum_{n' \leq -N} [\mathcal{G}_{-1,n'+N}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{-1,n'+N}^0}{dt}(t) u_{n'}(0) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{G}_{-1,n'+N}^0(t-s) f_{n'}(s) ds], \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned}
u_{N+1}(t) &= r_{N+1}(t) + D \int_0^t \mathcal{G}_{1,1}^0(t-s)u_N(s)ds, \\
r_{N+1}(t) &= \sum_{n' \geq N} [\mathcal{G}_{1,n'-N}^0(t) \frac{du_{n'}(0)}{dt} + \frac{d\mathcal{G}_{1,n'-N}^0(t)}{dt} u_{n'}(0) \\
&\quad + \int_0^t \mathcal{G}_{1,n'-N}^0(t-s)f_{n'}(s)ds].
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Hemos probado el siguiente resultado:

Teorema 3.3. *La solución de (3.4)-(3.5) restringida a la región $|n| \leq N$ coincide con la solución de (3.4)-(3.5) en $|n| \leq N$ con las condiciones de contorno (3.36)-(3.38).*

Cuando $A \neq 0$ y $\gamma \neq 0$, la revisión de los cálculos anteriores muestra que

Teorema 3.4. *Si $A \neq 0$ la solución de (3.14)-(3.15) restringida a la región $|n| \leq N$ coincide con la solución de (3.14)-(3.15) en $|n| \leq N$ con las condiciones de contorno (3.35)-(3.37). La función de Green \mathcal{G}^0 se calcula con la fórmula de $\omega(\theta)$ introducida en la Sección 3.1.2: $\omega(\theta)^2 = 4D \sin^2(\frac{\theta}{2}) + A$.*

Si $\gamma \neq 0$, el enunciado sigue siendo cierto actualizando la fórmula para $r_{\pm(N+1)}$ y la ecuación para $u_{\pm N}$: se reemplaza $\frac{d\mathcal{G}_{-1,n'+N}^0}{dt}$ por $\mathcal{G}_{-1,n'+N}^1$ en (3.37)-(3.38) y se añade $\gamma \frac{du_n}{dt}$ en (3.35).

Observaciones:

- No se asume que los datos iniciales y la fuente tengan soporte compacto contenido en el interior del recinto truncado. La serie se puede calcular usando el decaimiento de G_{1k}^0 con k .
- Cuando el soporte de los datos iniciales y la fuente están contenidos en el recinto computacional $r_{\pm(N+1)}(t) = 0$ y la condición de contorno involucra únicamente a $u_{\pm N}$ y su vecino interior inmediato. La condición es no local en tiempo debido a la integral.
- Los términos $r_{\pm(N+1)}(t)$ representan la interacción con el medio externo. Se pueden reemplazar por la solución de un problema exterior calculada mediante métodos sin malla o de elementos finitos si se desea evitar el cálculo de la serie y las integrales correspondientes, lo cual puede ser ventajoso en dimensiones superiores. De esta forma se tiene un método híbrido multiescala que acopla el problema atómico con una descripción exterior continua discretizada.

- Frecuentemente se introducen términos de fricción $\frac{\partial u_{\pm N}}{\partial t}$ en las ecuaciones diferenciales para los extremos de la cadena esperando reducir las reflexiones producidas por elecciones arbitrarias de las condiciones de contorno, con un éxito incierto. Al discretizar estas derivadas en tiempo, se obtienen combinaciones lineales de valores de $u_{\pm N}$ en tiempos anteriores. La integral que aparece en nuestras condiciones de contorno exactas (3.35) es una combinación de valores de $u_{\pm N}$ ya calculados. Se puede interpretar como un término de fricción generado por la cola de la cadena truncada.

3.3. Aproximación absorbente y resultados numéricos

En esta sección testamos la eficiencia de las condiciones de contorno obtenidas en la Sección 3.2 e indicamos cómo proceder a su discretización. Consideramos tres casos modelo: la ecuación de ondas discreta con una gaussiana como dato inicial, la ecuación de Klein-Gordon discreta con el mismo dato inicial y la ecuación de Frenkel-Kontorova (sine-Gordon discreto) con un dato inicial de tipo escalón (que no tiene soporte compacto).

3.3.1. Ecuación de ondas discreta

Consideramos la ecuación de ondas discreta

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad D = \frac{K}{M} > 0, \quad (3.39)$$

con un dato inicial de tipo gaussiana centrado en $n = 0$:

$$u_n(0) = e^{-n^2 t}.$$

Colocamos paredes artificiales en $n = \pm N$, $N = 25$, de forma que el pico de la gaussiana queda contenido dentro del recinto computacional truncado y que su valor en los bordes es aproximadamente cero.

La figura 3.1 compara la evolución temporal de las soluciones de (3.39) obtenidas utilizando dos recintos encajados. El primero es el recinto computacional al cual deseamos restringir los cálculos, ya descrito. El segundo triplica en tamaño al primero. En el recinto más grande usamos condiciones

de contorno de Dirichlet nulas. Como el dato inicial es una gaussiana con soporte contenido en el recinto más pequeño, podemos suponer que durante el tiempo en el que se realiza la comparación no hay interacción con el borde exterior, así que la solución es independiente de las condiciones de contorno empleadas. El resultado obtenido se representa con cuadrados negros.

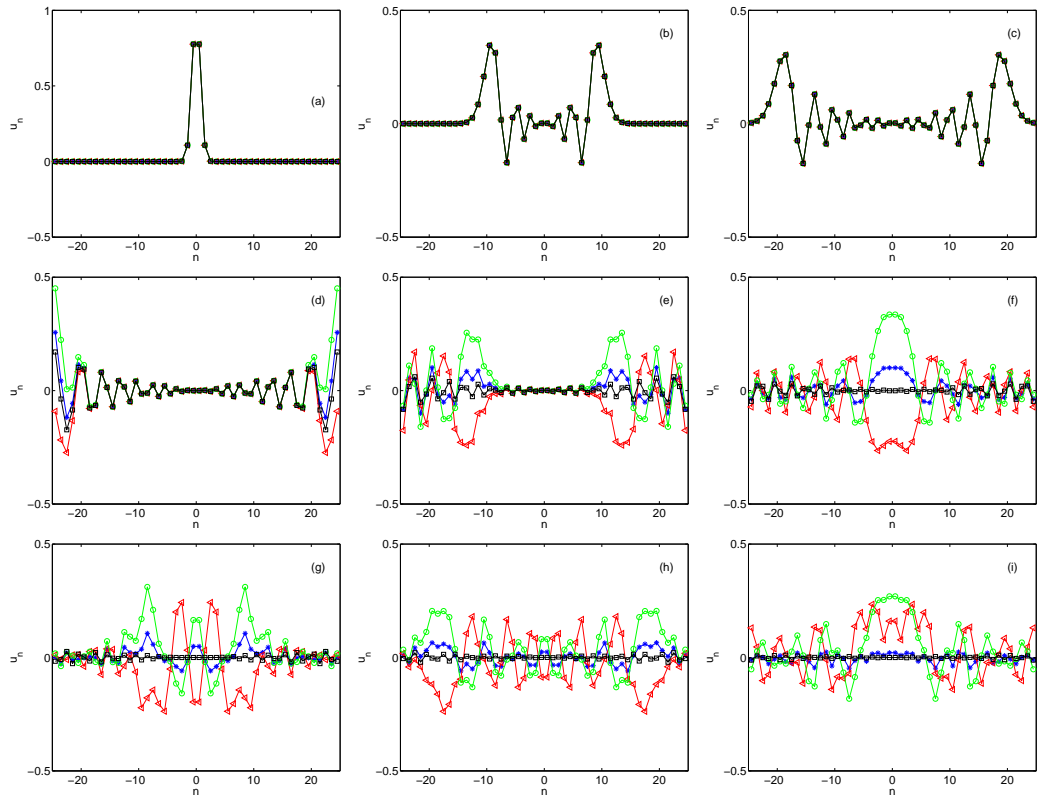


Figura 3.1: Ondas salientes con condiciones de contorno aproximadas comparadas con la onda original para $D = 1$ y $\tau = 0,8$ en sucesivos instantes de tiempo.

En el recinto pequeño utilizamos tres condiciones de contorno. Los triángulos rojos corresponden a la solución obtenida con condiciones de contorno de Dirichlet nulas. La onda se refleja hacia el interior del recinto computacional al llegar a la pared, llega al centro y vuelve a salir hacia el exterior, produciéndose reflexiones sucesivas sin que la magnitud de las ondas reflejadas decrezca. Los círculos verdes se obtienen con una versión discretizada de las

condiciones de contorno no reflectantes para la ecuación de ondas $u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0 : u_t \pm cu_x = 0$. En nuestro caso $c = 1$ y la condición discretizada a imponer en cada pared es del tipo $u(t_{j+1}) - u(t_j) = k\sqrt{D}(-u_{\pm N}(t_j) + u_{\pm(N-1)}(t_j))$, tomando k y $\frac{1}{\sqrt{D}}$ como pasos en tiempo y espacio respectivamente. De nuevo, una onda reflejada de cierta magnitud rebota de las paredes al interior sucesivamente.

La tercera condición de contorno se obtiene discretizando la condición exacta (3.36). El resultado se ha representado con asteriscos azules. Es bien sabido que al discretizar ecuaciones integrodiferenciales se pueden generar inestabilidades a tiempos largos y que esta tendencia a la inestabilidad empeora con métodos de orden alto. Se ha discretizado el sistema de ecuaciones usando la aproximación:

$$\frac{d^2 u_n(t_j)}{dt^2} = \frac{u_n(t_j + k) - 2u_n(t_j) + u_n(t_j - k)}{k^2} + O(k^2) \quad (3.40)$$

y la integral mediante la regla del trapecio compuesta (orden 2):

$$\int_0^{t_j} f(s) ds = k \left(\frac{f(0)}{2} + \sum_{i=1}^{j-1} f(t_i) + \frac{f(t_j)}{2} \right) + O(k^2) \quad (3.41)$$

con $f(s) = \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t_j - s)u_{\pm N}(s)$.

El núcleo $\mathcal{G}_{-1,-1}(t - s)$ oscila y decae a medida que $t - s$ crece. El decaimiento permite truncar la integral a un intervalo de la forma $[t - \tau, t]$. La regla del trapecio reemplaza esta la integral por una combinación lineal de valores de $u_{\pm N}$ en los nodos temporales t_i con pesos $\mathcal{G}_{-1,-1}(t_j)$, $j = 1 \dots n_\tau$. Los pesos son fijos y se calculan una sola vez. Si τ es demasiado pequeño, se observa una onda reflejada similar a la obtenida con condiciones de contorno de Dirichlet nulas. A medida que τ crece, la magnitud de la onda reflejada disminuye. Si τ es demasiado grande, el error de discretización acumulado desestabiliza el esquema. En general, es posible encontrar un valor óptimo para τ que depende de D y de k , de modo que la onda reflejada es menor que con otras condiciones de contorno y prácticamente se desvanece tras la segunda reflexión.

3.3.2. Ecuación de Klein-Gordon discreta

Consideramos la ecuación de Klein-Gordon discreta

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - Au_n \quad D = \frac{K}{M} > 0, \quad A > 0 \quad (3.42)$$

con un dato inicial de tipo gaussiana centrado en $n = 0$:

$$u_n(0) = e^{-n^2 t}.$$

Como en la sección anterior, colocamos paredes artificiales en $n = \pm 25$, de forma que el pico de la gaussiana queda contenido dentro del recinto computacional truncado y que su valor en los bordes es aproximadamente cero.

La figura 3.2 compara la evolución temporal de soluciones de (3.42) obtenidas utilizando dos recintos encajados. El primero es el recinto computacional ya descrito, al cual se desea restringir los cálculos. El segundo, es tres veces mayor que el anterior. Como en la sección anterior, en el recinto más grande usamos condiciones de contorno de Dirichlet nulas. El resultado obtenido se representa con cuadrados negros. La solución se puede considerar como exacta en tanto que las oscilaciones no lleguen a la pared del recinto grande.

En el segundo recinto utilizamos tres condiciones de contorno. Los triángulos rojos corresponden a la solución obtenida con condiciones de contorno de Dirichlet nulas. Los círculos verdes se obtienen con la versión discretizada de las condiciones de contorno no reflectantes para la ecuación de ondas $u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0 : u_t \pm cu_x = 0$. En cada pared imponemos $u(t_{j+1}) - u(t_j) = k\sqrt{D}(-u_{\pm N}(t_j) + u_{\pm(N-1)}(t_j))$, tomando k y $\frac{1}{\sqrt{D}}$ como pasos en tiempo y espacio respectivamente. En ambos casos, la onda se refleja hacia el interior del recinto computacional al llegar a la pared, llega al centro y vuelve a salir hacia el exterior, produciéndose reflexiones sucesivas sin que la magnitud de las ondas reflejadas parezca decrecer.

La tercera condición de contorno se obtiene discretizando la condición exacta (3.36) con $\omega(\theta)^2 = 4D \sin^2(\frac{\theta}{2}) + 1$. El resultado se ha representado con asteriscos azules. Se ha discretizado el sistema de ecuaciones con el esquema (3.40) y la integral mediante la regla del trapecio compuesta (orden 2), truncando la integral a un intervalo $[t - \tau, t]$. Como en la sección anterior, si τ es demasiado pequeño, se observa una onda reflejada similar a la obtenida con condiciones de contorno nulas. A medida que τ crece, la magnitud de la onda reflejada disminuye. Si τ es demasiado grande, el error de discretización acumulado desestabiliza el esquema. Utilizamos el mismo valor de τ que en el caso $A = 0$. La solución numérica obtenida se ajusta razonablemente bien a la solución exacta. La magnitud de las ondas reflejadas es pequeña y decrece con el tiempo.

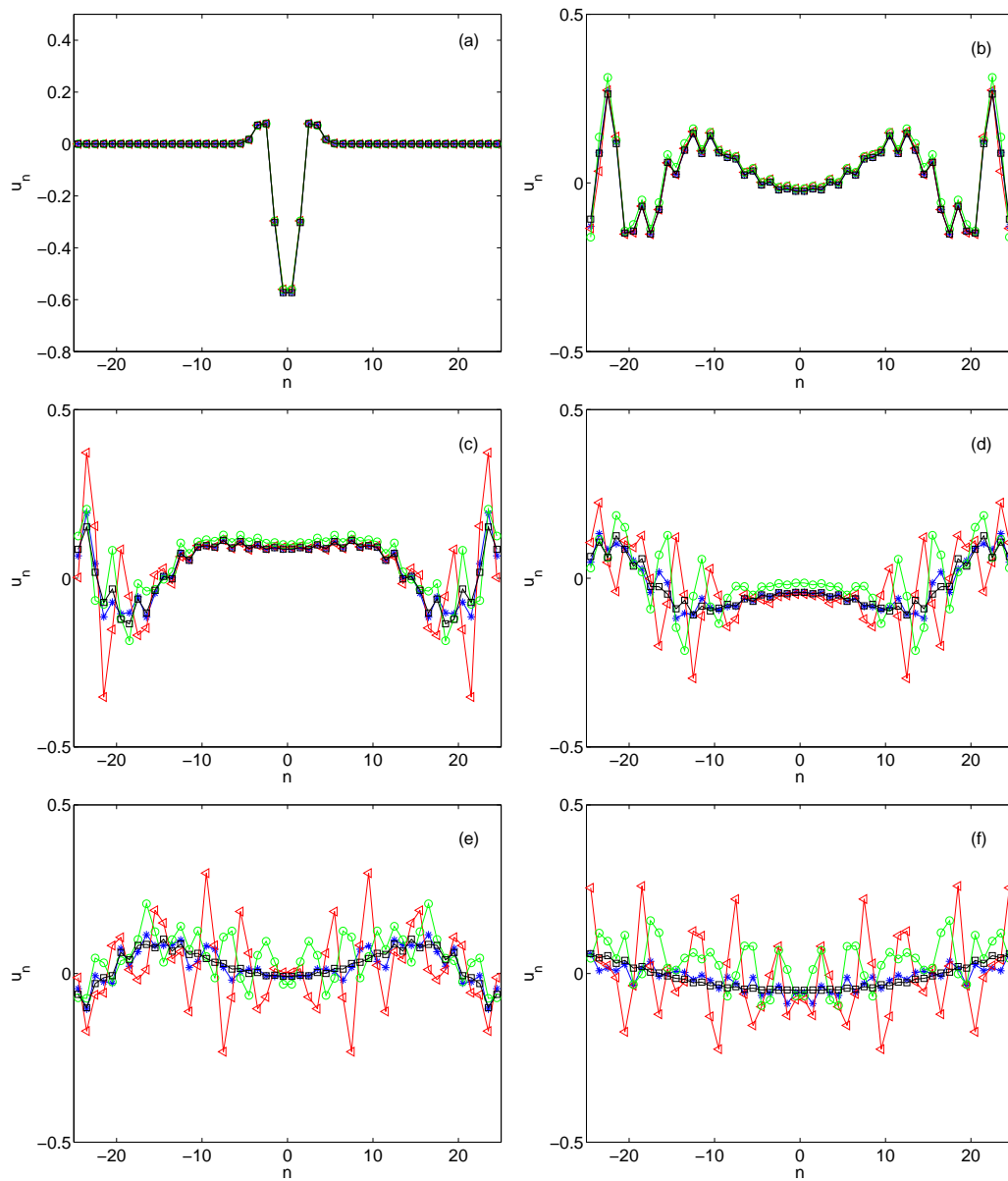


Figura 3.2: Test análogo al realizado en la figura 3.1 pero con la ecuación (3.42) y $D = A = 1$.

3.3.3. Ecuación de Frenkel-Kontorova

En esta sección vamos a analizar la posibilidad de utilizar las condiciones de contorno deducidas para problemas lineales en un problema no lineal. Los

resultados dependen del tipo de no linealidad y del tipo de ondas que llegan a los bordes. En problemas linealizables en la región en la que se colocan las paredes artificiales durante el tiempo que dura la computación, los resultados son tan buenos como en el caso lineal.

Consideramos a continuación un caso particularmente complicado, pues se trata de ondas viajeras de tipo frente con colas que oscilan con una amplitud uniforme. El problema deja de ser linealizable en la pared artificial en el momento en que el frente llega a ella. Nótese que el dato inicial no tiene ahora soporte compacto.

El modelo de Frenkel-Kontorova describe la evolución de un defecto de tipo dislocación en una cadena atómica:

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - A \sin(u_n) + F, \quad D = \frac{K}{M}, A > 0. \quad (3.43)$$

Si la fuerza $F > 0$ aplicada sobre el defecto es suficientemente grande, el defecto comienza a deslizarse como una onda viajera hasta alcanzar las paredes del recinto computacional. La solución que describe la evolución del defecto tiene estructura de frente viajero. La Figura 3.3(a) muestra el aspecto de la onda viajera generada.

La Figura 3.3(b) compara la evolución temporal de soluciones de (3.43) con condiciones de contorno distintas. El dato inicial es la onda viajera en un determinado instante de tiempo. Utilizamos dos condiciones de contorno. Los cuadrados negros corresponden a la solución obtenida con condiciones de contorno constantes en los extremos. La segunda condición de contorno se obtiene linealizando (3.43) en torno a los dos valores constantes en los extremos (los dos ceros estables de la fuente $A \sin(u) = F$). Obtenemos dos ecuaciones de Klein-Gordon (3.42) en cada extremo, con coeficientes D y $A \cos(c_1)$, $c_1 = \arcsin(F/A)$, en un caso y D y $A \cos(c_2)$, $c_2 = c_1 + 2\pi$, en el otro. Discretizamos las condiciones exactas (3.36) con $\omega(\theta)^2 = 4D \sin^2(\frac{\theta}{2}) + A \cos(c_i)$ respectivamente en las paredes izquierda y derecha. El resultado se ha representado con asteriscos azules. Se ha utilizado el esquema (3.40) y la regla del trapecio compuesta (orden 2), truncando la integral a un intervalo $[t - \tau, t]$. En todos los casos, la onda se refleja hacia el interior del recinto computacional al llegar a la pared, llega al centro y vuelve a salir hacia el exterior, produciéndose reflexiones sucesivas sin que la magnitud de las ondas reflejadas decrezca. Al tratarse de un problema no lineal y obtener una versión aproximada de (3.36) linealizando en los extremos siendo las oscilaciones de gran amplitud, nuestras condiciones de contorno no tienen la

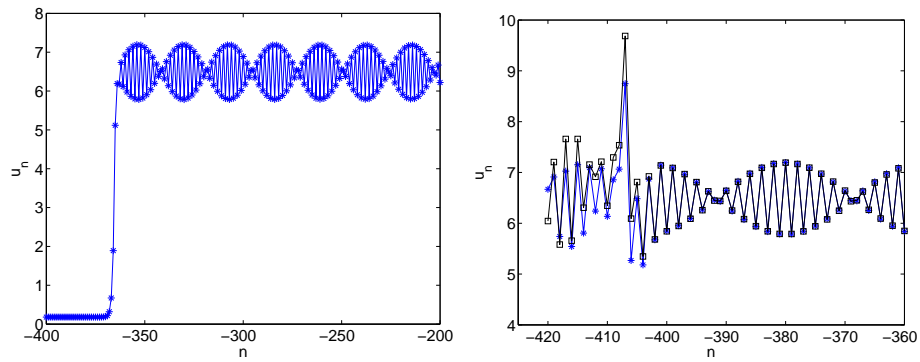


Figura 3.3: (a) Onda viajera solución de (3.43) con cola oscilatoria de amplitud uniforme. (b) Detalle de las reflexiones en la pared producidas al llegar a ella la cola oscilatoria.

misma eficiencia que en los dos casos lineales tratados en las dos secciones anteriores. Otro factor relevante es el hecho de que las oscilaciones en los dos ejemplos lineales decaen en amplitud mientras que en el caso no lineal tienen amplitud uniforme. Retomaremos este ejemplo en el capítulo 5, al estudiar las capas perfectamente acopladas.

Capítulo 4

Defectos en cristales

En el capítulo 3 nos hemos restringido al estudio de condiciones de contorno para cadenas atómicas. En esta sección extendemos a redes cristalinas las condiciones desarrolladas en la sección anterior. En numerosos materiales, como los metales o semiconductores, los átomos se organizan formando redes cristalinas tridimensionales. Estas redes se generan repitiendo periódicamente una celda atómica unidad con una cierta simetría: cúbica, hexagonal... En los cristales reales, la estructura cristalina no suele ser perfecta, contiene siempre una menor o mayor proporción de defectos que alteran sus propiedades. Los defectos pueden ser puntuales, soportados por curvas o de volumen. El estudio de la nucleación y dinámica de los defectos soportados por curvas (llamados dislocaciones) es particularmente importante, ya que controlan las propiedades mecánicas del cristal (deformación plástica, dureza...) y alteran sus propiedades ópticas, electrónicas y magnéticas. Como hemos comentado en la sección 1.3 del capítulo 1, es particularmente importante ser capaz de reducir la simulación de la dinámica de los átomos de un cristal a redes pequeñas sin alterar de forma significativa los resultados cuando se intenta simular la nucleación y dinámica de defectos en una pequeña región del cristal.

Nos centramos en este capítulo en el estudio de redes cúbicas simples, si bien los resultados son susceptibles de generalización. Consideremos una red atómica tridimensional con estructura de cristal cúbico simple, véase figura 4.1. Etiquetamos sus átomos usando tres parámetros enteros, que coinciden con sus coordenadas cartesianas $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$. El desplazamiento de cada átomo respecto a su posición de equilibrio es $\mathbf{u}_{\mathbf{n}}$. Si denotamos la energía del

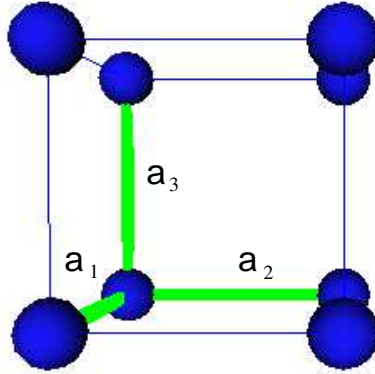


Figura 4.1: Celda base de una red de átomos con estructura de cristal cúbico. El cristal se forma repitiendo periódicamente la celda unidad en las tres direcciones de simetría: a_1 , a_2 , a_3 .

cristal por $U(\mathbf{u})$, $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_{\mathbf{n}})$, las ecuaciones de movimiento son

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_{\mathbf{n}}}{dt^2} = - \frac{\partial U(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}_{\mathbf{n}}} \quad (4.1)$$

donde $\mathbf{u}_{\mathbf{n}}$ es el vector desplazamiento del átomo etiquetado como \mathbf{n} y M es su peso atómico. La energía puede venir expresada como una suma de potenciales interatómicos $U(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}} V(|\mathbf{u}_{\mathbf{n}'} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}}|)$, para algún potencial V o incluir correcciones ('glue potential', 'embedded atom').

Una revisión de distintas estrategias ensayadas para paliar las reflexiones en los bordes del recinto computacional al simular la dinámica de los átomos de un cristal usando las ecuaciones (4.1) se puede encontrar en [37]. En [9] se usan ecuaciones de Langevin con integrales que promedian las velocidades (derivadas en tiempo de los desplazamientos $u_{\mathbf{n}}$) utilizando núcleos que se calculan con costosas simulaciones. Otras opciones para minimizar reflexiones consisten en incorporar términos de fricción ad hoc [27], en utilizar acoplamiento aproximados [33] o en recurrir a estrategias de optimización [28].

En este capítulo desarrollamos una vía distinta, consistente en derivar condiciones exactas para problemas linealizados utilizando funciones de Green de problemas de valores iniciales convenientemente escogidos. Cuando todos

los defectos del cristal se concentran en una región determinada, podemos linealizar y localizar las ecuaciones de movimiento a cierta distancia. Tomando en cuenta únicamente la interacción con los vecinos próximos, las ecuaciones (vectoriales) de movimiento se aproximan por:

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_n}{dt^2} = \sum_{|n_1 - n'_1| \leq 1, |n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{n-n'} \mathbf{u}_{n'} \quad (4.2)$$

con matrices coeficiente $\mathbf{K}_{n-n'}$ relacionadas con las constantes elásticas del retículo:

$$\mathbf{K}_{n-n'} = - \left. \frac{\partial^2 U(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}_{n'} \partial \mathbf{u}_n} \right|_{\mathbf{u}=0}. \quad (4.3)$$

Vamos a derivar condiciones de contorno para este tipo de problemas a partir de las funciones de Green del problema de valores iniciales. Suponiendo que las matrices $\mathbf{K}_{n-n'}$ tienen una determinada distribución de ceros, el sistema se reduce a una colección de ecuaciones de ondas discretas en varias dimensiones. Consideramos en primer lugar este tipo de problemas en la sección 4.1. Para matrices más generales, las ecuaciones no se desacoplan. Aparecen términos cruzados que ligan unas ecuaciones con otras. El caso general lo tratamos en la sección 4.2.

4.1. Ecuación de ondas discreta en varias dimensiones

Para cristales cúbicos simples y en condiciones de simetría particulares, (4.2) se reduce a una ecuación de ondas discreta (escalar). Consideramos en esta sección el caso bidimensional en detalle. Aplicaremos las condiciones obtenidas a un problema no lineal de dinámica de defectos. Posteriormente indicaremos cómo extender el método a tres dimensiones.

4.1.1. Dimensión dos

Se trata de dar condiciones de contorno exactas para el problema:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{nm}}{dt^2} = & D_1(u_{n+1m} - 2u_{nm} + u_{n-1m}) \\ & + D_2(u_{nm+1} - 2u_{nm} + u_{nm-1}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

con $D_1, D_2 > 0$, para $n, m \in \mathbb{N}$. Truncamos el dominio a un rectángulo finito introduciendo fronteras artificiales en $|n| = N$ y $|m| = M$. Una vez más comenzamos calculando las funciones de Green del problema de valores iniciales.

Funciones de Green

Se trata de calcular la función de Green del problema de valores iniciales:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{nm}}{dt^2} &= D_1(u_{n+1m} - 2u_{nm} + u_{n-1m}) \\ &+ D_2(u_{nm+1} - 2u_{nm} + u_{nm-1}) + f_{nm}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$u_{nm}(0) = u_{nm}^0, \quad \frac{du_{nm}}{dt}(0) = u_{nm}^1, \quad (4.6)$$

En primer lugar, recurrimos a transformadas de Fourier discretas para eliminar el operador en diferencias. Consideramos

$$p(\theta, t) = \sum_{(n,m)} u_{nm}(t) e^{-i(n,m)\cdot\theta}, \quad (4.7)$$

donde $\theta = (\theta_1, \theta_2)$.

Derivando p respecto a t y usando la ecuación (4.5) tenemos que p es solución de

$$\frac{d^2 p}{dt^2}(\theta, t) + \omega(\theta)^2 p(\theta, t) = f(\theta, t),$$

donde $\omega(\theta)^2 = 4[D_1 \sin^2(\frac{\theta_1}{2}) + D_2 \sin^2(\frac{\theta_2}{2})]$ y con las condiciones iniciales para p deducidas a partir de las dadas sobre u_{nm} . Como en el capítulo 3, la solución p depende de las raíces del polinomio $r^2 + \omega(\theta)^2 = 0$ (con la nueva definición de ω) y viene dada por:

$$\begin{aligned} p(\theta, t) &= p(\theta, 0) \cos(\omega(\theta)t) + \frac{dp}{dt}(\theta, 0) \frac{\sin(\omega(\theta)t)}{\omega(\theta)} \\ &+ \int_0^t \frac{\sin(\omega(\theta)(t-s))}{\omega(\theta)} f(\theta, s) ds. \end{aligned}$$

Para obtener u_{nm} basta, de nuevo, invertir la transformada de Fourier, de forma que podemos escribir

$$u_{nm}(t) = \sum_{(n',m')} [G_{(n,m),(n',m')}^0(t) \frac{du_{n'm'}(0)}{dt} + \frac{dG_{(n,m),(n',m')}^0(t)}{dt} u_{n'm'}(0)], \quad (4.8)$$

$$+ \int_0^t \sum_{(n',m')} G_{(n,m),(n',m')}^0(t-s) f_{(n',m')}(s) ds$$

donde

$$G_{(n,m),(n',m')}^0(t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{i((n,m)-(n',m')) \cdot \theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t) d\theta_1 d\theta_2. \quad (4.9)$$

Hemos probado el siguiente resultado:

Teorema 4.1. *La solución del problema de valores iniciales (4.5)-(4.6) admite la expresión integral (4.8) con núcleo (4.9).*

Una vez determinadas las funciones de Green, procedemos a derivar las condiciones de contorno.

Condiciones de contorno

Deseamos imponer una condición de contorno en cada uno de los lados del rectángulo $|n| = N$, $|m| = M$. Consideremos la frontera $n = 0$ y trunquemos el recinto computacional a la región $n \geq 0$. En la pared $n = 0$, (4.4) se reduce a:

$$\frac{d^2 u_{0m}}{dt^2} = D_1(u_{1m} - 2u_{0m} + u_{-1m}) + D_2(u_{0m+1} - 2u_{0m} + u_{0m-1}). \quad (4.10)$$

Como podemos observar, esta ecuación involucra términos en $n = -1$, los cuales no conocemos. Obtendremos una expresión para ellos supuestos conocidos los valores de u_{0m} , con el fin de cerrar el sistema. Usando éstos como datos de contorno, resolvemos el problema (4.5), (4.6) en $n \leq 0$ y expresamos los valores de la solución en ese semiespacio exterior en función de los valores de la solución en el recinto computacional.

Para ello, como en el capítulo anterior, consideramos la extensión

$$v_{nm} = \begin{cases} u_{nm} & n < 0 \\ 0 & n = 0 \\ -u_{-nm} & n > 0. \end{cases} \quad (4.11)$$

que es solución de

$$\begin{aligned} \frac{d^2 v_{nm}}{dt^2} = & D_1(v_{n+1m} - 2v_{nm} + v_{n-1m}) + D_1\delta_{(nm),(-1m)}u_{0m} \\ & + D_2(v_{nm+1} - 2v_{nm} + v_{nm-1}), \quad n, m \in \mathbb{N}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$v_{nm}(0) = v_{nm}^0, \quad \frac{dv_{nm}}{dt}(0) = v_{nm}^1, \quad (4.13)$$

donde v_{nm}^0 y v_{nm}^1 son, respectivamente, extensiones de u_{nm}^0 y u_{nm}^1 de la forma (4.11). Usando la expresión de v_{nm} en términos de las funciones de Green calculadas en el apartado anterior, obtenemos:

$$u_{-1m}(t) = r_{-1m}(t) + D_1 \int_0^t \mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0(t-s)u_{0m}(s)ds, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} r_{-1m}(t) = & \sum_{n' \leq 0, m' \in \mathbb{Z}} \left[\mathcal{G}_{(-1,m),(n',m')}^0(t) \frac{du_{n',m'}}{dt}(0) \right. \\ & \left. + \frac{d\mathcal{G}_{(-1,m),(n',m')}^0}{dt}(t)u_{n',m'}(0) \right], \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde $\mathcal{G}_{(n,m),(n',m')}^0 = G_{(n,m),(n',m')}^0 - G_{(n,m),(-n',m')}^0$ es, nuevamente, la función de Green del semiespacio $n \leq 0$ con condición de contorno nula en $n = 0$. Así la condición de contorno exacta queda:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{0m}}{dt^2} = & D_1 \left(u_{1m} - 2u_{0m} + D_1 \int_0^t \mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0(t-s)u_{0m}(s)ds \right) \\ & + D_2(u_{0m+1} - 2u_{0m} + u_{0m-1}) + r_{-1m}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

con

$$\mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0(t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1 - e^{-2i\theta_1}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t) d\theta_1 d\theta_2. \quad (4.17)$$

Las condiciones de contorno en las paredes horizontales del rectángulo se calculan de forma totalmente análoga:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{n0}}{dt^2} = & D_2 \left(u_{n1} - 2u_{n0} + D_2 \int_0^t \mathcal{G}_{(n,-1),(n,-1)}^0(t-s)u_{n0}(s)ds \right) \\ & + D_1(u_{n+10} - 2u_{n0} + u_{n-10}) + r_{n-1}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Por traslación, se obtienen condiciones de contorno en las paredes $n = \pm N$ y $m = \pm M$ como en el capítulo 3.

Para las paredes $n = N$ y $m = M$, se parte de la condición de contorno a imponer en $n = 0$ cuando se quiere truncar el recinto computacional de forma opuesta, a la región $n \leq 0$.

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{0m}}{dt^2} = D_1 \left(u_{-1m} - 2u_{0m} + D_1 \int_0^t \mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0(t-s)u_{0m}(s)ds \right) \\ + D_2(u_{0m+1} - 2u_{0m} + u_{0m-1}) + r_{1m}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Tenemos por tanto

Teorema 4.2. *La solución de (4.5)-(4.6) en el recinto en todo el espacio concide con la solución en $|n| = N, |m| = M$ si se imponen en las paredes condiciones no reflectantes de la forma (4.16)-(4.19) convenientemente trasladadas:*

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{\pm N,m}}{dt^2} = D_1 \left(u_{\pm(N-1),m} - 2u_{\pm N,m} + D_1 \int_0^t \mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0(t-s)u_{\pm N,m}(s)ds \right) \\ + D_2(u_{\pm N,m+1} - 2u_{\pm N,m} + u_{\pm N,m-1}) + r_{\pm(N+1),m}, \end{aligned}$$

en las paredes verticales, con núcleo (4.17) y

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{n,\pm M}}{dt^2} = D_1(u_{n+1,\pm M} - 2u_{n,\pm M} + u_{n-1,\pm M}) + \\ D_2 \left(D_2 \int_0^t \mathcal{G}_{(n,-1),(n,-1)}^0(t-s)u_{n,\pm M}(s)ds - 2u_{n,\pm M} + u_{n,\pm(M-1)}, \right) + r_{n,\pm(M+1)}, \end{aligned}$$

en las paredes horizontales. Las fuentes vienen dadas por:

$$\begin{aligned} r_{N+1,m} &= \sum_{n' \geq N, m' \in \mathbb{Z}} [\mathcal{G}_{(-1,m),(n'-N,m')}^0(t) \frac{du_{n',m'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{(-1,m),(n'-N,m')}^0(t)}{dt} u_{n',m'}(0)], \\ r_{-(N+1),m} &= \sum_{n' \leq -N, m' \in \mathbb{Z}} [\mathcal{G}_{(-1,m),(n'+N,m')}^0(t) \frac{du_{n',m'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{(-1,m),(n'+N,m')}^0(t)}{dt} u_{n',m'}(0)], \\ r_{n,M+1} &= \sum_{m' \geq M, n' \in \mathbb{Z}} [\mathcal{G}_{(n,-1),(n',m'-M)}^0(t) \frac{du_{n',m'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{(n,-1),(n',m'-M)}^0(t)}{dt} u_{n',m'}(0)], \\ r_{n,-(M+1)} &= \sum_{m' \leq -M, n' \in \mathbb{Z}} [\mathcal{G}_{(n,-1),(n',m'+M)}^0(t) \frac{du_{n',m'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{(n,-1),(n',m'+M)}^0(t)}{dt} u_{n',m'}(0)]. \end{aligned}$$

Resultados numéricos

Hemos analizado la evolución temporal de la solución de la ecuación (4.5) utilizando las condiciones de contorno obtenidas en la sección anterior y tomando como dato inicial una gaussiana con soporte compacto contenido en el recinto computacional. Al igual que en el capítulo 3 los núcleos integrales $\mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0$ son fijos y, debido a la paridad de $\omega(\theta)$, reales:

$$\mathcal{G}_{(-1,m),(-1,m)}^0(t) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{1 - \cos(2\theta_1)}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t) d\theta_1 d\theta_2.$$

Además podemos tomar, nuevamente un τ óptimo de modo que podamos truncar la integral a un cuadrado $[t - \tau, t] \times [t - \tau, t]$.

Para medir la magnitud de las reflexiones producidas por las condiciones de contorno artificiales se puede utilizar la norma infinito o la norma euclídea normalizada de la diferencia entre la solución obtenida con las condiciones de contorno artificiales y la solución calculada en un recinto varias veces mayor, que se toma como exacta. Otra posibilidad consiste en calcular el coeficiente de reflexividad:

$$R(t) = \frac{|E(t) - E_{app}(t)|}{E(0)} \quad (4.20)$$

donde E denota la energía de la solución exacta,

$$E(u) = \frac{1}{2} \sum_{n,m} (|u'_n(t)|^2 + D_1(u_{n+1,m} - u_{n,m})^2 + D_1(u_{n,m+1} - u_{n,m})^2) \quad (4.21)$$

y E_{app} la energía de la solución aproximada. La suma se restringe a los puntos del interior del recinto computacional. Este coeficiente compara no sólo desplazamientos, sino también velocidades.

Consideremos en primer lugar un test en el que se trunca el recinto infinito a un cuadrado o rectángulo. En cada pared se imponen las condiciones exactas obtenidas para el semiespacio definido por ella. El problema truncado resultante no es del todo exacto pues las paredes confluyen en las esquinas. Se puede considerar casi exacto en las zonas de las paredes alejadas de las esquinas, si el recinto computacional final es suficientemente grande. La figura 4.2 muestra la evolución del coeficiente de reflexión definido comparando las normas euclídeas de la solución del problema truncado y la solución exacta cuando el recinto truncado tiene un tamaño 20×20 .

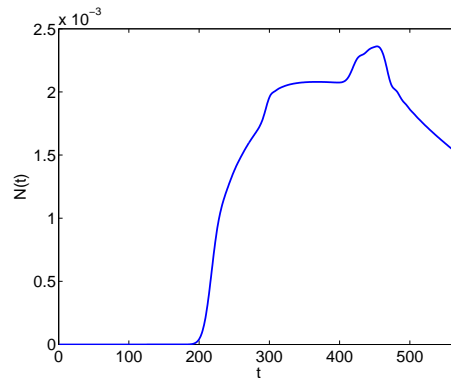


Figura 4.2: Norma euclídea de la diferencia entre las soluciones calculadas con condiciones de contorno no reflectantes y exactas.

En la figuras 4.3 y 4.4, está representada la evolución de la onda. En la primera tomamos una vista en dos dimensiones correspondiente a la proyección sobre el plano XY , mientras que la segunda se trata de una vista en tres dimensiones en la que podemos apreciar la altura que toma la onda reflejada. Se aprecia el efecto esquina en forma de reflexiones de mayor magnitud en las esquinas. Al aumentar el tamaño del recinto, el efecto esquina disminuye, y el coeficiente de reflexión también. La razón es que el tamaño relativo de la región donde las condiciones no son buenas (las cuatro esquinas) disminuye respecto al tamaño de la región en que las condiciones son aceptables.

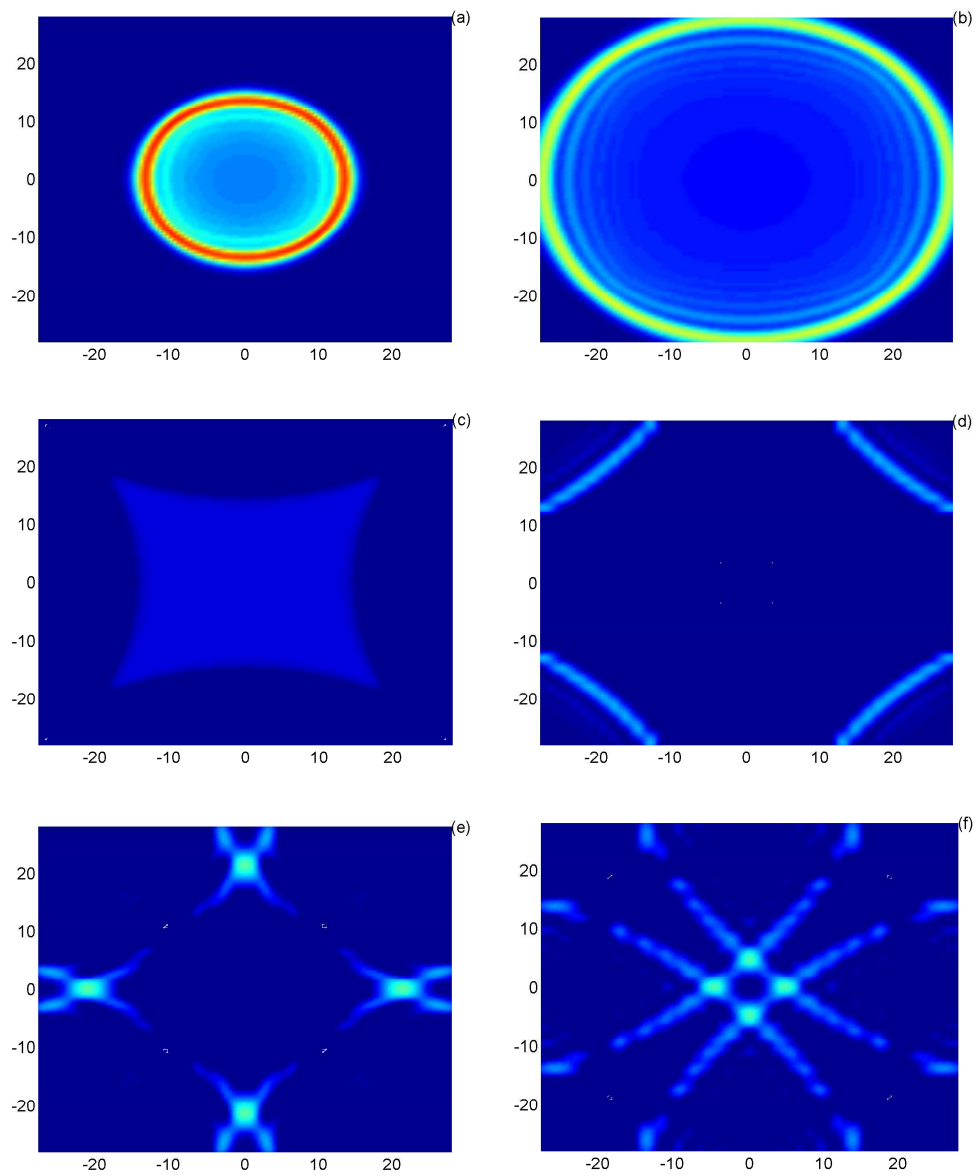


Figura 4.3: Proyección sobre el plano XY de: (a) onda saliente; (b), (c), (d), (e), (f) evolución de la onda (a) al llegar a las paredes del recinto computacional, con condiciones de contorno de la forma (4.16) en las cuatro paredes.

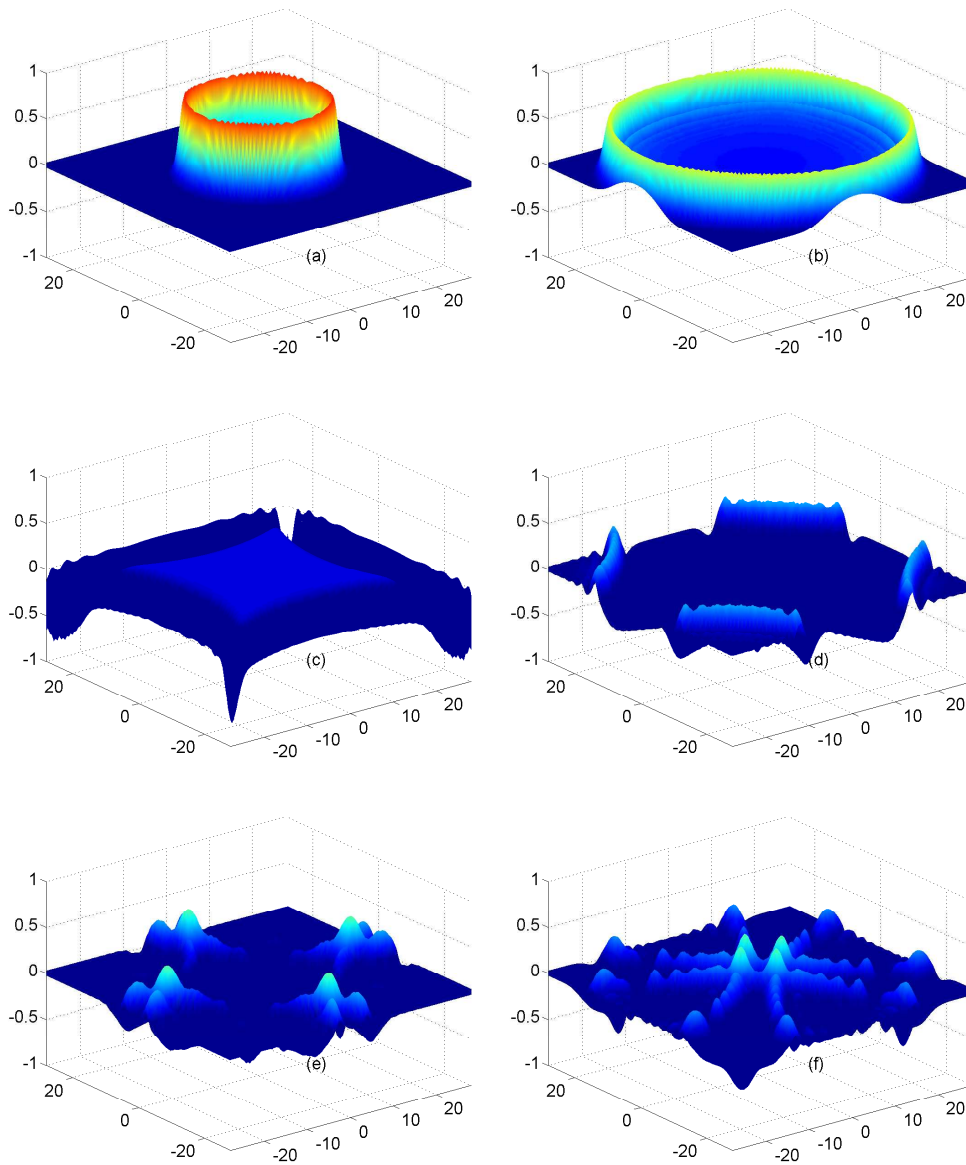


Figura 4.4: (a) onda saliente; (b), (c), (d), (e), (f) evolución de la onda (a) al llegar a las paredes del recinto computacional, con condiciones de contorno de la forma (4.16) en las cuatro paredes.

Aparte de la reflexión debida al efecto esquina (que disminuye con el tamaño del recinto computacional), otra fuente de ondas reflejadas es la forma en que se truncan las integrales en tiempo que definen las condiciones de contorno y la exactitud con que se calculen las integrales que definen las funciones de Green. Si la integral se trunca a intervalos $[t - \tau, t] \times [t - \tau, t]$, el valor adecuado de τ se puede calibrar con tests en semiespacios. Si τ es demasiado grande el sistema se desestabiliza. Si τ es demasiado pequeño la onda reflejada es de magnitud apreciable, como se ve en la figura 4.7.

La figura 4.5 muestra la diferencia de normas euclídeas entre la solución del problema con nuestra condición de contorno en una pared del recinto y la solución exacta. El recinto computacional se ha truncado sólo por un lado. En las figuras 4.6 y 4.7, representamos la evolución de la onda gaussiana

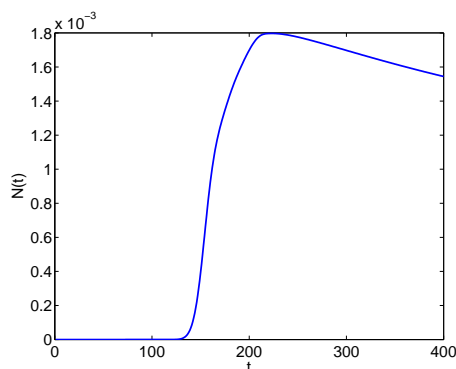


Figura 4.5: Norma euclídea de la diferencia entre la solución calculada con condición de contorno no reflectante en una pared y la solución exacta.

imponiendo la condición de contorno sólo en una pared del recinto.

Aunque el coeficiente de reflexión no parezca relevante, la visualización de la onda muestra que ha de ser reducido. Al tratarse de una onda expansiva, al aumentar el recinto disminuye la altura de la onda, y también la reflexión. Por otra parte, una mejor elección del parámetro τ reducirá también la reflexión. En la práctica puede ser más efectivo el recurrir a capas perfectamente acopladas discretas, como comentamos en el capítulo siguiente.

4.1.2. Dinámica no lineal de defectos

Las simulaciones de dinámica de defectos con este tipo de condiciones de contorno serán mejores o peores según la relevancia de la no linealidad

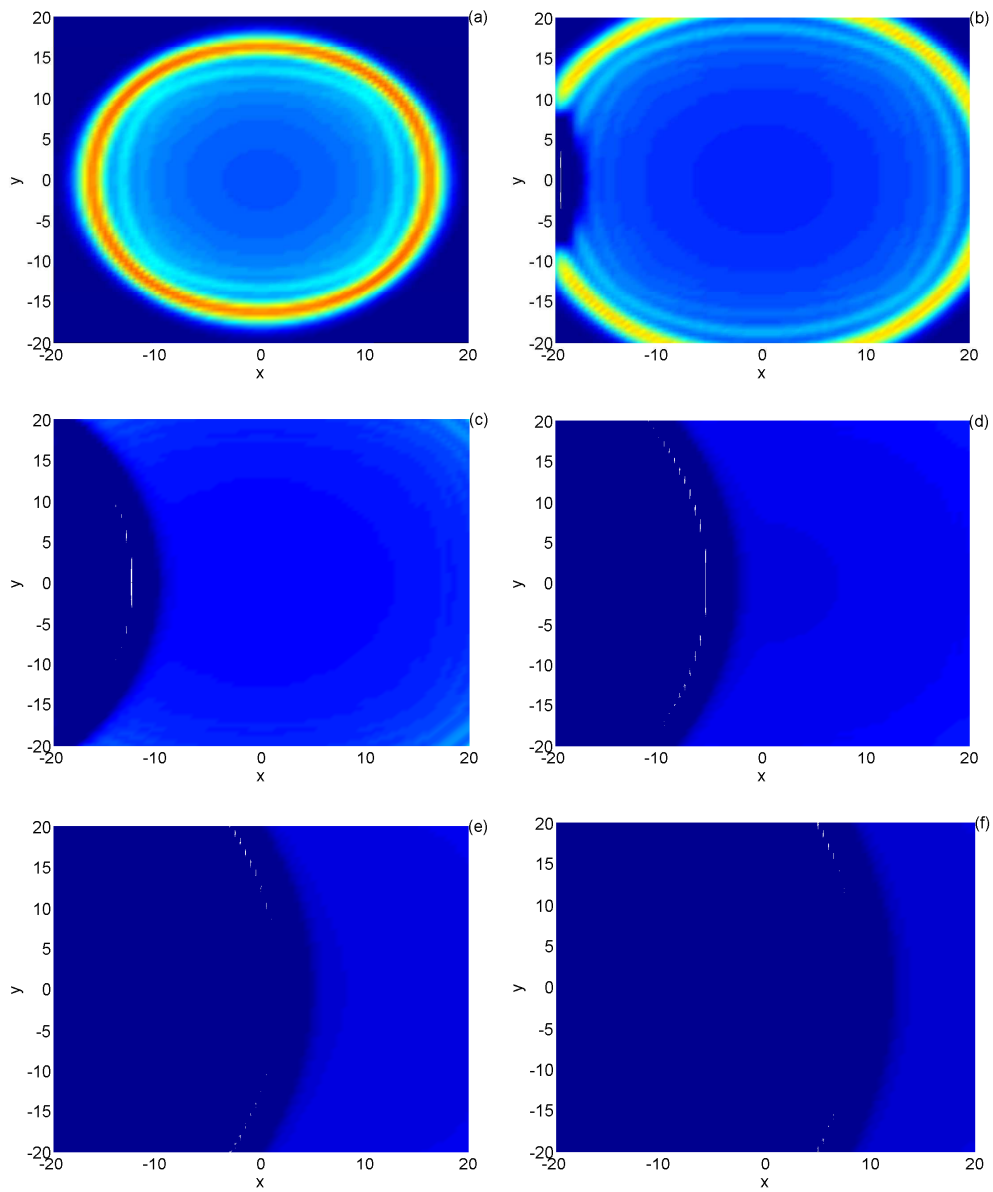


Figura 4.6: Proyección sobre el plano XY de: (a) onda saliente; (b), (c), (d), (e), (f) evolución de la onda (a) al llegar a la pared izquierda del recinto computacional, con condiciones de contorno de la forma (4.16) en dicha pared.

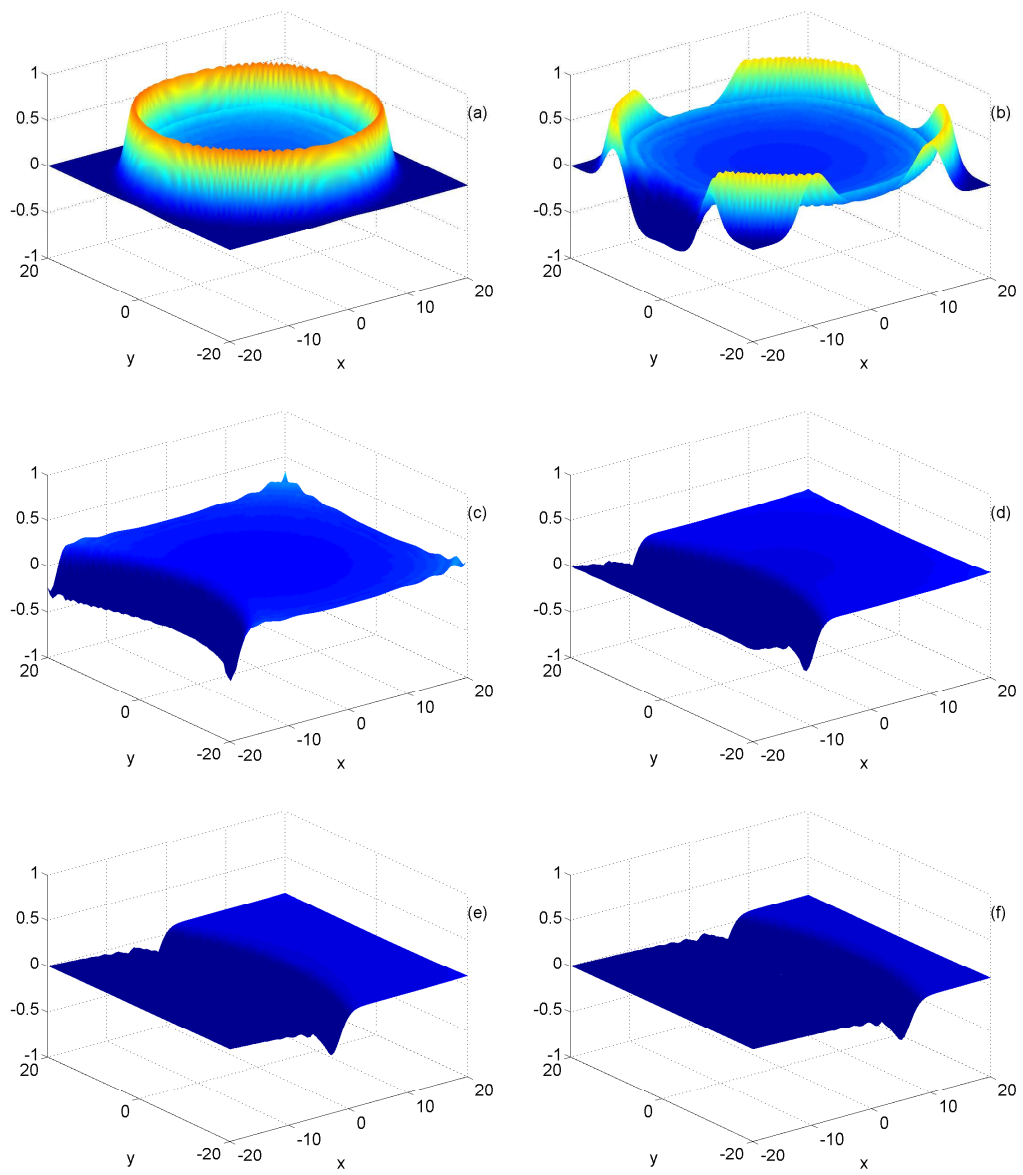


Figura 4.7: (a) onda saliente; (b), (c), (d), (e), (f) evolución de la onda (a) al llegar a la pared izquierda del recinto computacional, con condiciones de contorno de la forma (4.16) en dicha pared.

en los bordes. Vamos a considerar un tests en el que los efectos no lineales son relevantes: la simulación de la evolución de un grupo de dislocaciones en arista en cristales cúbicos bidimensionales cuando una de ellas llega a la pared del recinto computacional. Las dislocaciones en movimiento son como ondas que se desplazan. Al llegar a una pared real del cristal, quedan atrapadas. En una pared artificial, hay que evitar este efecto si no queremos distorsionar la evolución de las dislocaciones que quedan en el interior. Es preciso que las condiciones de contorno dejen salir las dislocaciones que alcanzan los bordes del recinto computacional.

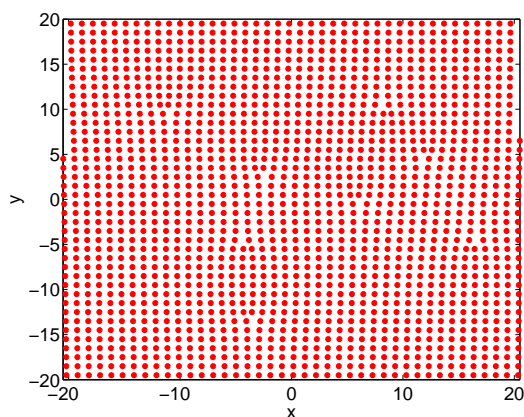


Figura 4.8: Dislocaciones en arista en interacción.

La geometría inicial se describe en la Figura 4.8. Una dislocación es el equivalente en un cristal de un vórtice en un fluido. En un retículo bidimensional se manifiestan en forma de semicadenas adicionales de átomos. El borde de cada cadena adicional indica la ubicación del núcleo de la dislocación. En el límite continuo estos defectos se corresponden con singularidades en las ecuaciones de la elasticidad. Se traducen en la presencia de deltas de Dirac soportadas en los núcleos. En un modelo atómico, este tipo de defectos se corresponde con soluciones en una clase particular de funciones. Por ejemplo, una dislocación en arista centrada en $(0, 0)$ se comporta en el infinito como la función ángulo $\theta(x, y) \in [-\pi, \pi]$. Esta función define el comportamiento en el infinito de las soluciones singulares de la elasticidad escalar en dos dimensiones.

Para estudiar la dinámica e interacción de estos defectos se pueden usar

modelos simplificados, como el siguiente [30, 10]:

$$\frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial t^2} = (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + A (\sin(u_{i,j+1} - u_{i,j}) + \sin(u_{i,j-1} - u_{i,j})), \quad (4.22)$$

con $A > 0$. La variable $u_{i,j}$ representa el desplazamiento del átomo (i, j) de un retículo cúbico bidimensional en la dirección x . Dentro de una misma cadena j no puede haber cambios de vecinos, el vecino anterior y posterior de un átomo (i, j) dado son siempre el $(i - 1, j)$ y el $(i + 1, j)$. Sin embargo, dos cadenas contiguas pueden deslizarse la una respecto a la otra, con lo que los vecinos superior e inferior de uno dado pueden cambiar. Este hecho permite a los defectos deslizarse en este retículo en la dirección horizontal.

Una población inicial de defectos se 'siembra' en el retículo considerando condiciones iniciales de la forma:

$$u_{i,j}(x, y, 0) = \sum_{k=1}^N \theta(x - x_k, \frac{y - y_k}{\sqrt{A}}), \quad (4.23)$$

siendo (x_k, y_k) la posición de cada defecto. Si deseamos simular la interacción y movimiento de estos defectos podemos aplicar una fuerza de cizalla en la dirección x . Esto se traduce en una variación de la condición inicial

$$u_{i,j}(x, y, 0) = \sum_{k=1}^N \theta(x - x_k, \frac{y - y_k}{\sqrt{A}}) + Fy. \quad (4.24)$$

El sistema se discretiza en tiempo mediante el método (3.40), como en capítulos anteriores.

Hemos estudiado la evolución de la solución de (4.22), considerando una vez más las condiciones de contorno no reflectantes calculadas a partir de las funciones de Green, con una modificación debido a la no linealidad. Las condiciones de base (4.16)-(4.19) se reemplazan por

$$\frac{d^2 u_{\pm N, m}}{dt^2} = \left(u_{\pm(N-1), m} - 2u_{\pm N, m} + \int_0^t \mathcal{G}_{(-1, m), (-1, m)}^0(t-s) u_{\pm N, m}(s) ds \right) + A (\sin(u_{\pm N, m+1} - u_{\pm N, m}) + \sin(u_{\pm N, m-1} - u_{\pm N, m})) + r_{\pm(N+1), m}. \quad (4.25)$$

en las paredes verticales, con núcleo (4.17). En las paredes horizontales

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_{n,\pm M}}{dt^2} &= (u_{n+1,\pm M} - 2u_{n,\pm M} + u_{n-1,\pm M}) + \\ &A \left(\sin(u_{n,\pm(M+1)} - u_{n,\pm M}) + \sin(u_{n,\pm(M-1)} - u_{n,\pm M}) \right), \\ u_{n,\pm(M+1)} &= A \int_0^t \mathcal{G}_{(n,-1),(n,-1)}^0(t-s) u_{n,\pm M}(s) ds + r_{n,\pm(M+1)}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Las condiciones son análogas a las del problema lineal salvo por la presencia de la función seno. Las fuentes vienen dadas por:

$$\begin{aligned} r_{N+1,m}(t) &= \sum_{n' \geq N, m' \in \mathbb{Z}} \frac{d\mathcal{G}_{(-1,m),(n'-N,m')}^0}{dt}(t) u_{n',m'}(0), \\ r_{-(N+1),m}(t) &= \sum_{n' \leq -N, m' \in \mathbb{Z}} \frac{d\mathcal{G}_{(-1,m),(n'+N,m')}^0}{dt}(t) u_{n',m'}(0), \\ r_{n,M+1}(t) &= \sum_{m' \geq M, n' \in \mathbb{Z}} \frac{d\mathcal{G}_{(n,-1),(n',m'-M)}^0}{dt}(t) u_{n',m'}(0), \\ r_{n,-(M+1)}(t) &= \sum_{m' \leq -M, n' \in \mathbb{Z}} \frac{d\mathcal{G}_{(n,-1),(n',m'+M)}^0}{dt}(t) u_{n',m'}(0), \end{aligned}$$

ya que el dato inicial esta vez no se anula fuera del recinto.

Hemos tomado como dato inicial un dipolo

$$u_{i,j}(x, y, 0) = \theta(x - 5,5, y - 0,5) + \theta(x + 5,5, y + 0,5) + 0,2y. \quad (4.27)$$

Además, para poder observar con facilidad la magnitud de las reflexiones producidas, hemos comparado las soluciones anteriores con las obtenidas en un recinto el doble de grande y con condiciones de contorno de Dirichlet fijas (construidas a partir del dato inicial), que se han considerado soluciones exactas en el recinto original. Los resultados que hemos obtenido de momento no son muy buenos debido en parte a que la no linealidad es relevante cuando los defectos llegan al borde y no está claro qué tipo de linealización sería aceptable (en torno a qué). Ya habíamos observado la presencia de reflexiones de magnitud apreciable en los propios problemas lineales. Retomaremos el ejemplo en el capítulo 5.

4.1.3. Extensión a varias dimensiones

Cuando las matrices $\mathbf{K}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'}$ toman una forma particularmente simple tenemos un problema de ondas vectorial

$$\frac{d^2 \mathbf{u}_{\mathbf{n}}}{dt^2} = D \sum_{|\mathbf{n}-\mathbf{n}'| \leq 1} (\mathbf{u}_{\mathbf{n}'} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}}) \quad (4.28)$$

con $D > 0$, $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ y $\mathbf{n}' = (n'_1, n'_2, n'_3)$. Las ecuaciones se desacoplan y podemos trabajar componente a componente con problemas escalares. El resultado vectorial se recupera reagrupando las componentes. Truncamos el dominio computacional a una caja finita, colocando fronteras artificiales en $\{|n_1| = N_1, |n_2| = N_2, |n_3| = N_3\}$ y buscamos una condición de contorno no reflectante. De nuevo, el primer paso consiste en calcular las funciones de Green del problema de valores iniciales.

Funciones de Green

La extensión a tres dimensiones de los resultados de la sección anterior se hace tomando $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ y $\omega(\theta) = 4D[\sin^2(\theta_1) + \sin^2(\theta_2) + \sin^2(\theta_3)]$, reemplazando las integrales dobles por integrales triples y m, m' por $(m_1, m_2), (m'_1, m'_2)$.

Deseamos hallar una representación integral para la solución del problema

$$\frac{d^2 u_{\mathbf{n}}}{dt^2} = D \sum_{|\mathbf{n}-\mathbf{n}'| \leq 1} (u_{\mathbf{n}'} - u_{\mathbf{n}}) + f_{\mathbf{n}}, \quad (4.29)$$

$$u_{\mathbf{n}}(0) = u_{\mathbf{n}}^0, \quad \frac{du_{\mathbf{n}}}{dt}(0) = u_{\mathbf{n}}^1. \quad (4.30)$$

Para encontrar las funciones de Green asociadas, seguimos el procedimiento descrito en la sección 3.1: Se trata de eliminar el operador en diferencias recurriendo a transformadas de Fourier discretas

$$p(\theta, t) = \sum_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}}(t) e^{-i\mathbf{n}\cdot\theta}, \quad f(\theta, t) = \sum_{\mathbf{n}} f_{\mathbf{n}}(t) e^{-i\mathbf{n}\cdot\theta} \quad (4.31)$$

donde $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$.

Derivando p respecto a t y usando la ecuación (4.30), concluimos que p es solución de (3.8) con $\omega(\theta)^2 = 4D[\sin^2(\frac{\theta_1}{2}) + \sin^2(\frac{\theta_2}{2}) + \sin^2(\frac{\theta_3}{2})]$. Las

condiciones iniciales para $p(\theta, t)$ se obtienen a partir de las condiciones para $u_{\mathbf{n}}(t)$. De nuevo, p depende de las raíces del polinomio $r^2 + \omega(\theta)^2 = 0$ y viene dado por (3.21). Recuperamos $u_{\mathbf{n}}(t)$ invirtiendo las transformadas de Fourier para obtener la expresión integral (3.6). Ahora, \mathbf{n} , \mathbf{n}' y θ son vectores y las funciones de Green toman la forma:

$$G_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^0(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{(2\pi)^3} \frac{e^{i(\mathbf{n}-\mathbf{n}')\cdot\theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t). \quad (4.32)$$

Una vez determinadas las funciones de Green, derivamos las condiciones de contorno.

Condiciones de contorno

En cada pared de la caja $\{|n_1| = N_1, |n_2| = N_2, |n_3| = N_3\}$ deseamos imponer una condición de contorno exacta para el semiespacio correspondiente.

Consideremos un semiespacio determinado. Colocamos una frontera artificial en $n_1 = 0$ y resolvemos (4.28) para $n_1 \geq 0$. Necesitamos una condición de contorno para calcular $u_{0, \mathbf{m}}(t)$, $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$. En la pared $n_1 = 0$, (4.28) se reduce a:

$$\frac{d^2 u_{0, \mathbf{m}}}{dt^2} = D \sum_{|n'_1| + |\mathbf{m} - \mathbf{m}'| \leq 1} (u_{n'_1, \mathbf{m}'} - u_{0, \mathbf{m}}) + f_{0, \mathbf{m}}, \quad (4.33)$$

Estas ecuaciones involucran valores en la pared $n_1 = -1$, que son desconocidos. Obtenemos una expresión para ellos suponiendo conocidos los valores $u_{0, \mathbf{m}}$ para todo \mathbf{m} y resolviendo (4.29)-(4.30) en el semiespacio $n_1 \leq 0$, usando $u_{0, \mathbf{m}}$ como datos de contorno. Este problema se puede reescribir como un problema con condiciones de contorno nulas en $n_1 = 0$ y un término fuente modificado: $f_{n_1, \mathbf{m}} + D\delta_{n_1, -1}u_{0, \mathbf{m}}$. Esto permite una extensión impar a todo el espacio:

$$v_{n_1, \mathbf{m}} = \begin{cases} u_{n_1, \mathbf{m}} & n_1 < 0 \\ 0 & n_1 = 0 \\ -u_{-n_1, \mathbf{m}} & n_1 > 0. \end{cases} \quad (4.34)$$

La extensión $v_{n_1, \mathbf{m}}$ es solución de:

$$\frac{d^2 v_{n_1, \mathbf{m}}}{dt^2} = D \sum_{|n'_1 - n_1| + |\mathbf{m} - \mathbf{m}'| \leq 1} (v_{n'_1, \mathbf{m}'} - v_{n_1, \mathbf{m}}) + g_{n_1, \mathbf{m}}, \quad (4.35)$$

$$v_{n_1, \mathbf{m}}(0) = v_{n_1, \mathbf{m}}^0, \quad \frac{dv_{n_1, \mathbf{m}}}{dt}(0) = v_{n_1, \mathbf{m}}^1 \quad (4.36)$$

para $n_1, \mathbf{m} = (n_2, n_3)$. Los datos $v_{n_1, \mathbf{m}}^0$ y $v_{n_1, \mathbf{m}}^1$ son extensiones impares de $u_{n_1, \mathbf{m}}^0$ y $u_{n_1, \mathbf{m}}^1$ definidas como en (4.34). La fuente $g_{n_1, \mathbf{m}}$ se obtiene extendiendo $f_{n_1, \mathbf{m}} + D\delta_{n_1, -1}u_{0, \mathbf{m}}$ de forma análoga. Usando la representación integral de $v_{n_1, \mathbf{m}}$ en términos de funciones de Green hallada en 4.1.3 y la simetría de los datos encontramos la expresión buscada para $u_{-1, \mathbf{m}}$:

$$u_{-1, \mathbf{m}}(t) = r_{-1, \mathbf{m}}(t) + D \int_0^t \mathcal{G}_{(-1, \mathbf{m}), (-1, \mathbf{m})}^0(t-s) u_{0, \mathbf{m}}(s) ds, \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned} r_{-1, \mathbf{m}}(t) = & \sum_{n'_1 \leq 0, \mathbf{m}' \in Z^2} \left[\mathcal{G}_{(-1, \mathbf{m}), (n'_1, \mathbf{m}')}^0(t) \frac{du_{n'_1, \mathbf{m}'}}{dt}(0) \right. \\ & + \frac{d\mathcal{G}_{(-1, \mathbf{m}), (n'_1, \mathbf{m}')}^0}{dt}(t) u_{n'_1, \mathbf{m}'}(0) \\ & \left. + \int_0^t \mathcal{G}_{(-1, \mathbf{m}), (n'_1, \mathbf{m}')}^0(t-s) f_{n'_1, \mathbf{m}'}(s) ds \right] \end{aligned} \quad (4.38)$$

donde $\mathcal{G}_{(n_1, \mathbf{m}), (n'_1, \mathbf{m}')}^0 = G_{(n_1, \mathbf{m}), (n'_1, \mathbf{m}')}^0 - G_{(n_1, \mathbf{m}), (-n'_1, \mathbf{m}')}^0$ es la función de Green del semiespacio $n_1 < 0$ con condición de contorno nula en $n_1 = 0$.

El término $r_{-1, \mathbf{m}}(t)$ representa la contribución de los datos iniciales en la región exterior y su incidencia en la evolución dentro del recinto truncado. La condición de contorno en la pared $n_1 = 0$ viene dada por (4.33) y (4.37). Las condiciones de contorno en otros planos paralelos o en otras direcciones se calculan de forma análoga con modificaciones obvias.

4.2. Matrices de acoplamiento generales

En general, las matrices de constantes elásticas $\mathbf{K}_{\mathbf{n}-\mathbf{n}'}$ no permiten desacoplar el sistema y aparecen términos cruzados. Al resolver (4.2) truncamos el dominio computacional a una caja finita, colocando fronteras artificiales en $\{|n_1| = N_1, |n_2| = N_2, |n_3| = N_3\}$, como en el caso anterior. El procedimiento para el cálculo de las funciones de Green y las condiciones de contorno es ligeramente más complicado debido a la presencia de términos cruzados.

4.2.1. Funciones de Green

Para calcular las funciones de Green del operador linealizado (4.2) seguiremos el procedimiento de la Sección 4.1.3. Consideramos el problema de valores iniciales

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_n}{dt^2} = \sum_{|n_1 - n'_1| \leq 1, |n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{n-n'} \mathbf{u}_{n'} + \mathbf{f}_n, \quad (4.39)$$

$$\mathbf{u}_n(0) = \mathbf{u}_n^0, \quad \mathbf{u}'_n(0) = \mathbf{u}_n^1. \quad (4.40)$$

Ahora \mathbf{f}_n y \mathbf{u}_n son vectores y \mathbf{K}_n matrices. La transformada \mathbf{p} es solución del sistema

$$M \frac{d^2 \mathbf{p}}{dt^2}(\theta, t) + \mathbf{A}(\theta) \mathbf{p}(\theta, t) = \mathbf{f}(\theta, t),$$

$$\mathbf{A}(\theta) = \sum_{|\mathbf{n}_1| \leq 1, |\mathbf{n}_2| \leq 1, |\mathbf{n}_3| \leq 1} \mathbf{K}_n e^{-i\theta \cdot \mathbf{n}} \quad (4.41)$$

La matriz de coeficientes $\mathbf{A}(\theta)$ no depende del tiempo. Para encontrar la solución general recurrimos a la transformada de Laplace en tiempo

$$L\mathbf{p}(\theta, s) = (Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1} (L\mathbf{f}(\theta, s) + M \frac{d\mathbf{p}}{dt}(\theta, 0) + sM\mathbf{p}(\theta, 0)). \quad (4.42)$$

Si $LG_0(s) = (Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1}$ y $LG_1(s) = s(Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1} = LG'_0(s)$, al invertir la transformada de Laplace tenemos

$$\mathbf{p}(\theta, t) = M \frac{d\mathbf{G}_0}{dt}(t) \mathbf{p}(\theta, 0) + M \mathbf{G}_0(t) \frac{d\mathbf{p}}{dt}(\theta, 0) + \int_0^t \mathbf{G}_0(t-s) \mathbf{f}(\theta, s) ds, \quad (4.43)$$

y al invertir la transformada de Fourier discreta recobramos la expresión integral (3.6) con:

$$\mathbf{G}_{n,n'}^0(t) = M \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{n}-\mathbf{n}') \cdot \theta} \mathbf{G}_0(s) ds, \quad (4.44)$$

siendo $G_0(s)$ la transformada de Laplace inversa de $(Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1}$.

Hemos probado el siguiente resultado:

Teorema 4.3. *La solución del problema de valores iniciales (4.39)-(4.40) se expresa en función de los datos iniciales y la fuente mediante la expresión integral (3.6), donde la función de Green viene dada por (4.44).*

4.2.2. Condiciones de contorno

Una vez conocida la función de Green obtenemos la condición de contorno para un semiespacio. Si colocamos una frontera artificial en $n_1 = 0$ y queremos resolver (4.2) cuando $n_1 \geq 0$, necesitamos una condición de contorno para calcular $u_{0,\mathbf{m}}(t)$, $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$. En la pared $n_1 = 0$

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_{0,\mathbf{m}}}{dt^2} = \sum_{|n'_1| \leq 1, |n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{(0,\mathbf{m}) - \mathbf{n}'} \mathbf{u}_{\mathbf{n}'}. \quad (4.45)$$

Hemos de expresar los valores $\mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}'}$ en función de $\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}}$ para cerrar el sistema. Para ello, se trata de representar la contribución de la región $n_1 \leq 0$ sobre la región $n_1 \geq 0$ mediante fuerzas ejercidas sobre la interfaz.

Al aparecer términos cruzados en (4.39) no es cierto en general que la extensión impar \mathbf{v} de \mathbf{u} definida en (4.34) sea solución de un problema de tipo (4.39) con datos extendidos de forma impar a todo el espacio como en (4.34)-(4.36). Normalmente habrá que corregir $\mathbf{g}_{n_1,\mathbf{m}}$, $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$, en $n_1 = 0$:

$$\mathbf{g}_{n_1,\mathbf{m}} = \begin{cases} \mathbf{f}_{n_1,\mathbf{m}} + \delta_{n_1,-1} \mathbf{a}_{\mathbf{m}}(t) & n_1 < 0 \\ \mathbf{b}_{\mathbf{m}}(t) & n_1 = 0 \\ -\mathbf{g}_{-n_1,\mathbf{m}} & n_1 > 0 \end{cases} \quad (4.46)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{\mathbf{m}}(t) &= \sum_{|n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{(-1,\mathbf{m}) - (0,\mathbf{m}')} \mathbf{u}_{0,\mathbf{m}'} \\ \mathbf{b}_{\mathbf{m}}(t) &= \sum_{|n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} [\mathbf{K}_{(0,\mathbf{m}) - (-1,\mathbf{m}')} - \mathbf{K}_{(0,\mathbf{m}) - (1,\mathbf{m}')}] \mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}'}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Resolvemos el problema extendido en todo el espacio y obtenemos $\mathbf{u}_{n_1,\mathbf{m}}$, $n_1 < 0$, en función de $\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}'}$, $\mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}'}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n_1,\mathbf{m}}(t) &= \sum_{n'_1 \leq 0, \mathbf{m}' \in Z^2} [\mathcal{G}_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}^0(t) \frac{d\mathbf{u}_{\mathbf{n}'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}^0}{dt}(t) \mathbf{u}_{\mathbf{n}'}(0)] \\ &+ \int_0^t \sum_{\mathbf{m}' \in Z^2} [\mathcal{G}_{\mathbf{n},(-1,\mathbf{m}')}^0(t-s) \mathbf{a}_{\mathbf{m}'}(s) + \mathcal{G}_{\mathbf{n},(0,\mathbf{m}')}^0(t-s) \mathbf{b}_{\mathbf{m}'}(s)] ds \\ &+ \int_0^t \sum_{n'_1 \leq 0, \mathbf{m}' \in Z^2} \mathcal{G}_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}^0(t-s) \mathbf{f}_{\mathbf{n}'}(s) ds, \end{aligned} \quad (4.48)$$

donde $\mathcal{G}_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}^0$ es la función de Green en el semiespacio $n_1 < 0$ con condición de contorno nula en el borde. Cuando $\mathbf{K}_{(0+1,\mathbf{m}-\mathbf{m}')} = \mathbf{K}_{(0-1,\mathbf{m}-\mathbf{m}')}$, $\mathbf{b}_{\mathbf{m}} = 0$ y (4.48) expresa $\mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}}$ en función de $\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}'}$, con lo que se cierra (4.45) en $n_1 \geq 0$. Se tiene otra vez una condición de contorno con la estructura (4.33),(4.37)-(4.38). Si $\mathbf{b}_{\mathbf{m}}$ no se anula, obtenemos una expresión para $\mathbf{u}_{-2,\mathbf{m}}$ en función de $\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}'}$ y $\mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}'}$. Esto nos permite cerrar la condición de contorno en $\mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}}$ en lugar de $\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}}$:

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}}}{dt^2} = \sum_{|-1+n'_1| \leq 1, |n_2-n'_2| \leq 1, |n_3-n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{(-1,\mathbf{m})-\mathbf{n}'} \mathbf{u}_{\mathbf{n}'}. \quad (4.49)$$

con $\mathbf{u}_{-2,\mathbf{m}'}$ dado por (4.48).

Tenemos pues el siguiente resultado:

Teorema 4.4. *La solución de (4.39)-(4.40) en todo el espacio se aproxima sin reflexiones por la solución en una caja finita, si se imponen en las paredes de la caja condiciones de la forma (4.48)-(4.49).*

Estas condiciones se extienden a otros cristales cúbicos (véase figura 4.9) trabajando con la base de vectores primitivos y los planos de simetría del cristal.

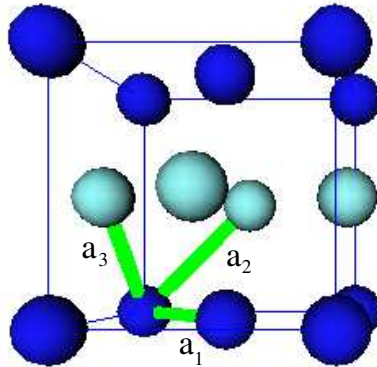


Figura 4.9: Celda base de una red de átomos con estructura de cristal cúbico centrado en las caras (oro, cobre, ...).

La figura 4.9 muestra la celda básica de un cristal cúbico real. En la

base primitiva (a_1, a_2, a_3) , los átomos ocupan posiciones con coordenadas enteras (n, m, k) . Los cristales cúbicos simples (cuya celda se describe en la figura 4.1) apenas se encuentran en la naturaleza (únicamente el polonio, que es radiactivo). La mayor parte de los cristales cúbicos reales son cúbicos centrados en el cuerpo (con una celda base como la descrita en la figura 4.1 pero con un átomo de más en el centro de la celda), o cúbicos centrados en las caras (cuya celda base se describe en la figura 4.9).

Capítulo 5

Capas perfectamente acopladas

Las condiciones de contorno que hemos obtenido para problemas de elasticidad discreta en el capítulo anterior tienen dos inconvenientes. En primer lugar, son costosas, por el número de integrales a evaluar en cada instante en toda la frontera artificial, sobre todo en varias dimensiones. En segundo lugar, las integrales se han de truncar en tiempo para que resulte un problema numéricamente estable. Al hacer esto, dejan de ser exactas y dan lugar a reflexiones de mayor o menor amplitud.

Una alternativa consiste en diseñar capas perfectamente acopladas. La idea consiste en introducir una región cerca de la pared en la cual se cambian los coeficientes del sistema de modo que las ondas se amortiguen. Construir capas perfectamente acopladas para problemas discretos en espacio no es sencillo, y los intentos en esa dirección son puramente heurísticos. Hemos comentado en el capítulo 1 los antecedentes de esta técnica en problemas continuos [6, 17, 5]. En este capítulo proponemos capas acopladas aproximadas en problemas espacialmente discretos por analogía con las capas de los problemas continuos, pero sin recurrir a discretizaciones de las capas continuas (que no funcionarían fuera del límite continuo). Los trabajos sobre capas acopladas hasta la fecha parecen restringirse al estudio de problemas continuos y de cómo discretizarlos de forma adecuada. Nuestros problemas son discretos de partida y no se puede elegir la estructura discreta (que está fijada) ni hay pasos de discretización en espacio que hacer tender a cero. Las capas que obtenemos no están en principio 'perfectamente' acopladas, pero sí tienen un efecto amortiguador razonable, según los ensayos realizados. La ventaja respecto a los métodos estudiados en las secciones anteriores estriba en la reducción del coste computacional y un mejor control de la magnitud

de las reflexiones. Estas condiciones son locales, aunque se imponen en una región y no en un borde. Tienen la ventaja de evitar el cálculo de integrales en cada etapa de la evolución temporal.

El capítulo está organizado como sigue. La sección 5.1 se inspira en los diseños de capas perfectamente acopladas en problemas de ondas para proponer capas aproximadas en modelos de ondas discretos. En la sección 5.2 recordamos resultados conocidos sobre capas acopladas en modelos de elasticidad continuos isótropos y anisótropos, en particular, relativos a su estabilidad en problemas de simetría cúbica. En la sección 5.3 diseñamos capas acopladas para problemas de elasticidad discreta en cristales cúbicos tridimensionales. Nos restringiremos a ensayos en dos dimensiones, aunque la teoría es válida en cualquier dimensión.

5.1. Ecuaciones de ondas discretas

Como hemos comentado en el capítulo 1, se han derivado capas perfectamente acopladas para ciertos tipos de problemas continuos. El objetivo de esta sección es diseñar capas aproximadas para problemas de ondas discretos. Las estrategias utilizadas en problemas continuos nos servirán de punto de partida.

Recordemos como se procede en el caso modelo de una ecuación de ondas bidimensional. En primer lugar, se reescribe la ecuación de ondas $u_{tt} - u_{xx} - u_{yy} = 0$ como un sistema hiperbólico de primer orden:

$$\partial_t v - \mathcal{A} \partial_x v - \mathcal{B} \partial_y v = 0. \quad (5.1)$$

donde \mathcal{A} , \mathcal{B} , son matrices 3×3 :

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Ambas tienen autovalores reales y distintos, así que se trata de un sistema hiperbólico. Comparando con la solución de la ecuación de ondas bidimensional, $v_1 = u_t$, $v_2 = u_x$ y $v_3 = u_y$.

A continuación, introducimos un factor de disipación $d(x)$ en la región $x \geq 0$ y descomponemos $v = v^{\parallel} + v^{\top}$, donde \parallel denota la solución de la ecuación manteniendo sólo las derivadas en la dirección paralela a la interfaz

$x = 0$ y \top la solución de la ecuación manteniendo las derivadas respecto a la dirección perpendicular:

$$\partial_t v^{\parallel} - \mathcal{B} \partial_y v = 0, \quad \partial_t v^{\top} - \mathcal{A} \partial_x v = 0, \quad x < 0 \quad (5.3)$$

$$\partial_t v^{\parallel} - \mathcal{B} \partial_y v = 0, \quad \partial_t v^{\top} + d(x) v^{\top} - \mathcal{A} \partial_x v = 0, \quad x > 0. \quad (5.4)$$

Las soluciones de tipo onda plana de ambos sistemas son de la forma:

$$\begin{aligned} v_- &= v_0 e^{-i(k_x x + k_y y - \omega t)}, \quad x < 0 \\ v_+^{\parallel} &= v_0^{\parallel} e^{-i(k_x x'(x) + k_y y - \omega t)}, \quad v_+^{\top} = v_0^{\top} e^{-i(k_x x'(x) + k_y y - \omega t)} \quad x > 0 \\ a^{\parallel} + a^{\top} &= v_0, \quad a^{\parallel} = \mathcal{B} v_0 \frac{k_y}{\omega}, \quad a^{\top} = \mathcal{A} v_0 \frac{k_x}{\omega} \end{aligned} \quad (5.5)$$

con $x'(x) = x - i\omega \int_0^x d(s) ds$. Resulta

$$v_+ = v_0 e^{-i(k_x x + k_y y - \omega t)} e^{-\frac{k_x}{\omega} \int_0^x d(s) ds} \quad (5.6)$$

con lo que v_+ coincide con v_- cuando $x \leq 0$ pero se amortigua cuando $x > 0$ con coeficiente $\|v_+\| = \|v_-\| e^{-\frac{k_x}{\omega} \int_0^x d(s) ds}$. Los dos sistemas se acoplan 'perfectamente' en la región $x \leq 0$ y no hay reflexiones en la pared.

Se trata de adaptar estas ideas a problemas de onda espacialmente discretos. Discutimos en primer lugar cómo proceder en dimensión dos. A continuación, explicamos brevemente cómo diseñar capas de amortiguación en dimensión uno.

5.1.1. Dimensión dos

Consideremos una ecuación de ondas discreta en dos dimensiones:

$$u_{i,j}'' - c^2(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) = 0. \quad (5.7)$$

Si $c = \frac{1}{h}$ es grande, podemos considerarla una discretización de la ecuación continua. Se puede pensar en generar capas acopladas aproximadas recurriendo a una versión discreta de (5.3)-(5.4), que, sin embargo, no es exactamente una discretización. Los resultados son buenos independientemente del tamaño de c .

Introducimos los operadores discretos $\Delta_x u_{ij} = u_{i+1,j} - u_{i,j}$ y $\Delta_y u_{ij} = u_{i,j+1} - u_{i,j}$. La ecuación de ondas discreta se reescribe en forma de sistema

como:

$$\begin{aligned}\partial_t^2 u_{i,j} - c^2 \Delta_x (\Delta_x u_{i-1,j}) - c^2 \Delta_y (\Delta_y u_{i,j-1}) &= 0, \\ \partial_t (\Delta_x u_{i-1,j}) &= \Delta_x (\partial_t u_{i-1,j}), \\ \partial_t (\Delta_y u_{i,j-1}) &= \Delta_y (\partial_t u_{i,j-1}),\end{aligned}\tag{5.8}$$

análogo discreto de (5.1), salvo por el hecho de que en el segundo miembro de las ecuaciones segunda y tercera, $\partial_t u_{i-1,j}$ y $\partial_t u_{i,j-1}$ respectivamente, debieran ser $\partial_t u_{i,j}$ para poder escribir el sistema como

$$\partial_t v_{i,j} - c^2 \mathcal{A} \Delta_x v_{i,j} - c^2 \mathcal{B} \Delta_y v_{i,j} = 0,\tag{5.9}$$

con $v_{i,j} = (\partial_t u_{i,j}, \Delta_x u_{i-1,j}, \Delta_y u_{i,j-1})$. Los operadores Δ_x y Δ_y en este sistema actúan componente a componente. En cualquier caso, podemos plantear el análogo discreto de (5.3)-(5.4) teniendo en cuenta estos desplazamientos, introduciendo las variables

$$w_{i,j}^{(1)} = (\partial_t u_{i-1,j}, \Delta_x u_{i-1,j}, \Delta_y u_{i-1,j}), \quad w_{i,j}^{(2)} = (\partial_t u_{i,j-1}, \Delta_x u_{i,j-1}, \Delta_y u_{i,j-1}),$$

y considerando los sistemas

$$\partial_t v_{i,j}^{\parallel} - \mathcal{B} \Delta_y w_{i,j}^{(2)} = 0, \quad \partial_t v_{i,j}^{\top} + d_{i,j} v_{i,j}^{\top} - \mathcal{A} \Delta_x w_{i,j}^{(1)} = 0, \quad \forall i, j,\tag{5.10}$$

donde \mathcal{A} , \mathcal{B} , son matrices 3×3 :

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & c^2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & c^2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\tag{5.11}$$

Tenemos dos sistemas acoplados para las tres componentes de v^{\parallel} y v^{\top} , que se relacionan con $u_{i,j}$ a través de $v_{i,j} = v_{i,j}^{\parallel} + v_{i,j}^{\top}$ y con $w_{i,j}^{(1)}$ y $w_{i,j}^{(2)}$ a través de $u_{i,j}$. Para resolverlo sólo hace falta la descomposición de los datos iniciales $v_{i,j}(0) = v_{i,j}^{\parallel}(0) + v_{i,j}^{\top}(0)$. De entrada, podemos tomar $v_{i,j}^{\parallel}(0) = v_{i,j}^{\top}(0) = \frac{1}{2} v_{i,j}(0)$.

Estudiamos a continuación la evolución del dato inicial gaussiano empleado en tests anteriores al truncar el recinto de computación para la ecuación de ondas discreta introduciendo una capa amortiguadora aproximada. Hemos tomado $c = 1$ y un coeficiente amortiguador d_i que crece de $d = 0$ para $i \leq 10$ a $d = 1$ para $i \geq 20$. Como recinto computacional elegimos $-50 \leq i \leq 50$,

$-50 \leq j \leq 50$. En las paredes $i = -50$, $j = \pm 50$ imponemos condiciones de contorno nulas. La condición de contorno que se imponga en estas paredes es irrelevante y no afecta a la solución en tanto que la onda no llegue a ellas. El dato inicial es una gaussiana centrada en el origen con 'soporte' contenido en $-2 \leq i \leq 2$, $-2 \leq j \leq 2$. Se trata de observar la evolución de la onda cuando llega al inicio de la capa acoplada en $i = 10$.

Utilizamos, una vez más, la norma euclídea de la diferencia entre la solución real y la resultante de aplicar la capa acoplada aproximada. Este coeficiente que nos permite comparar nuestra aproximación con la solución real se ve representado en la figura 5.1. Nótese que es mucho menor que los coeficientes de reflexión obtenidos en el capítulo 4. Pasado el pico que se observa en la figura, decae aún más.

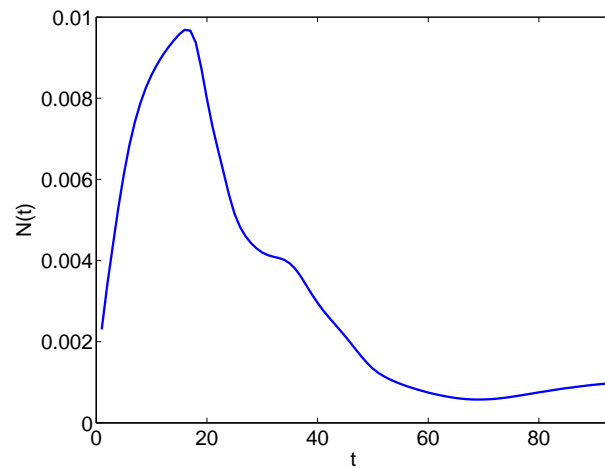


Figura 5.1: Norma euclídea de la diferencia entre las soluciones exactas y las calculadas usando el modelo de capa acoplada.

En la figura 5.2 mostramos una vista en dos dimensiones correspondiente a la proyección sobre el plano XY . En la figura 5.3 se observa una vista en tres dimensiones. En ambas podemos apreciar como la onda atraviesa la pared artificial $i = 10$ sin producir apenas reflexiones hacia el interior.

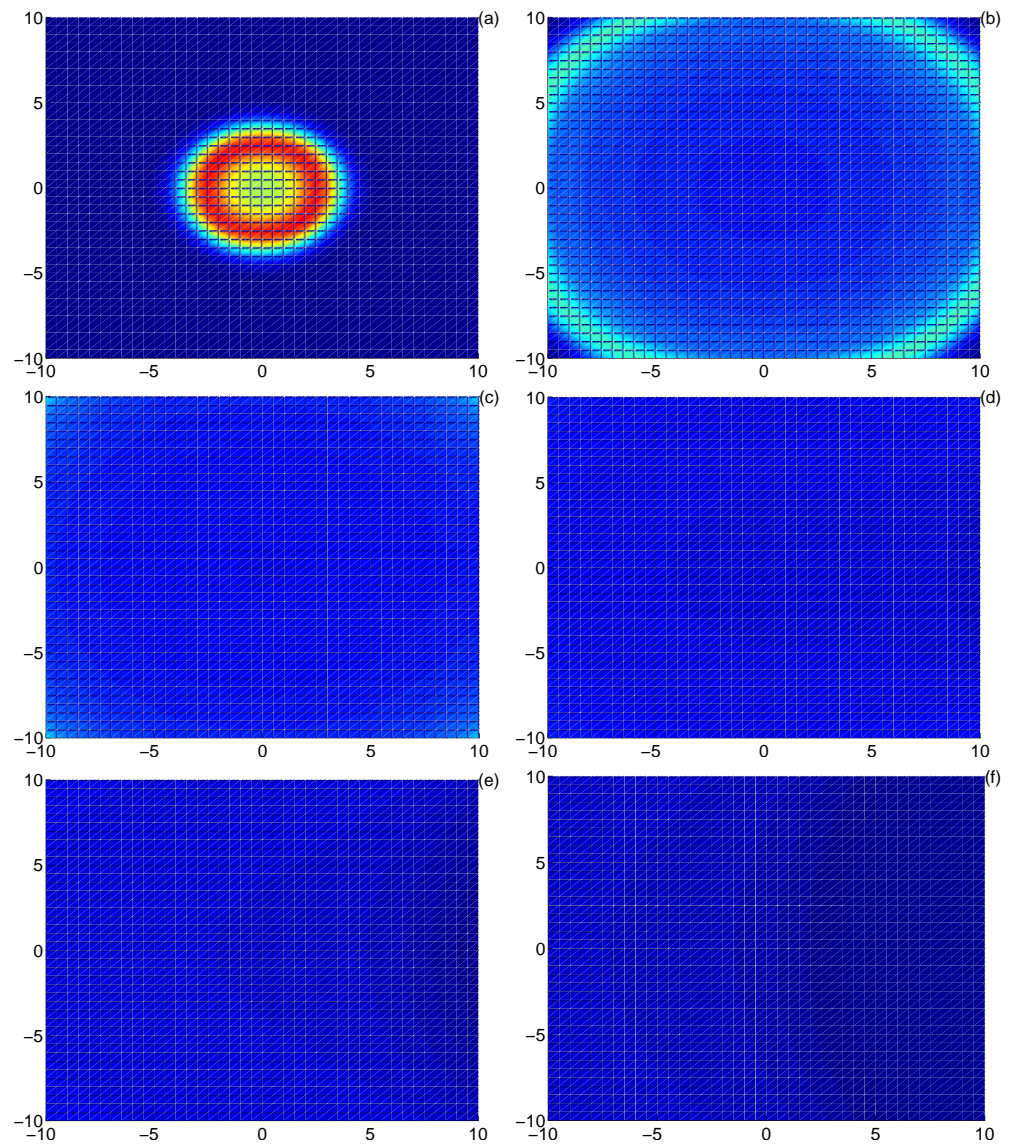


Figura 5.2: Proyección sobre el plano XY de la evolución de un dato inicial de tipo gaussiana al atravesar la frontera artificial en el modelo con capa acoplada aproximada (5.10).

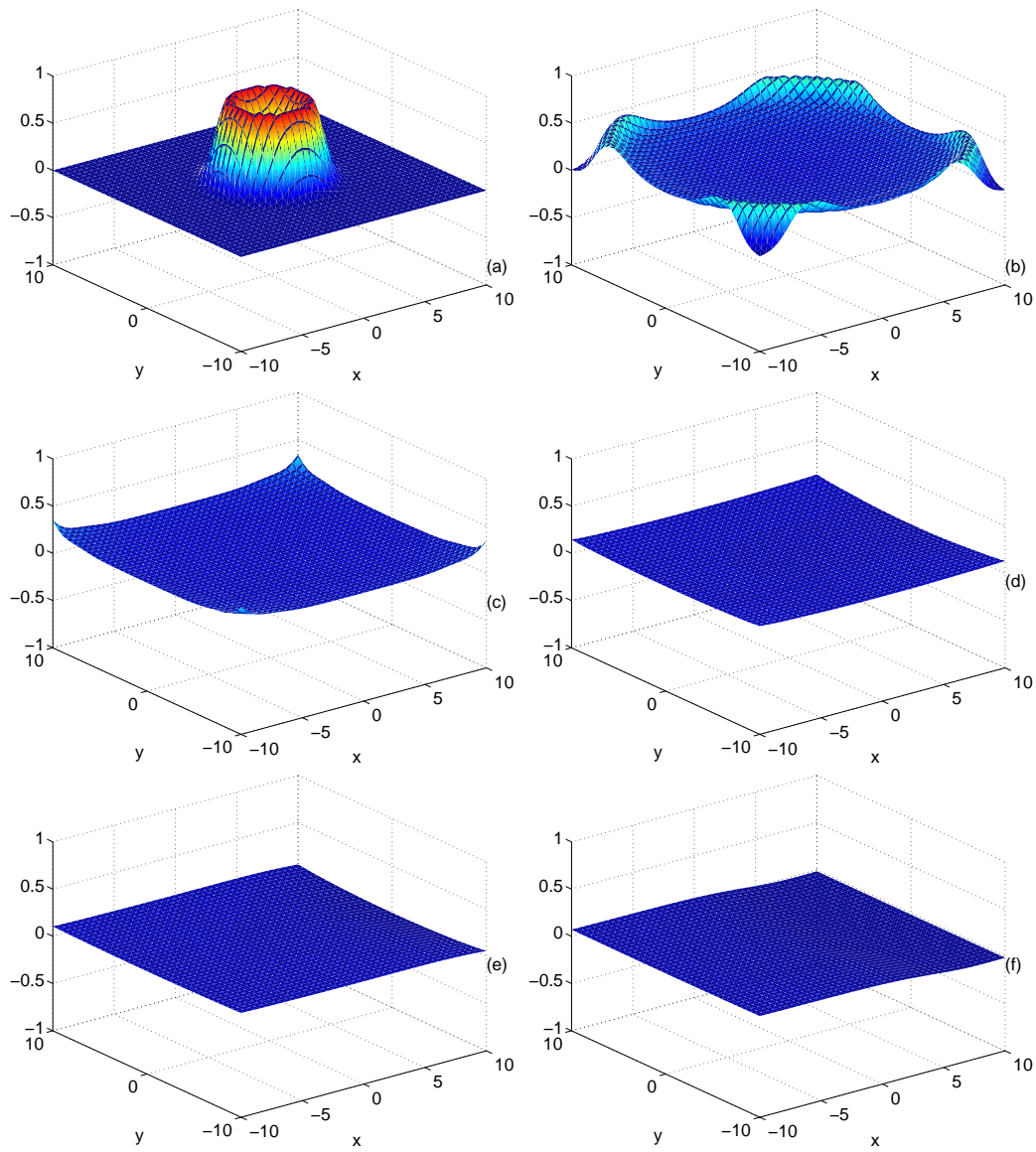


Figura 5.3: Evolución de un dato inicial de tipo gaussiana (a) al atravesar la frontera artificial en el modelo con capa acoplada aproximada (5.10).

Retomamos a continuación el ejemplo no lineal considerado en la sección 4.1.2. Hemos realizado test numéricos tomando distintos datos iniciales. Si consideramos como dato inicial una función gaussiana cuya altura no supere la amplitud del seno la capa acoplada absorbe bien las reflexiones. Sin embargo, cuando tomamos como dato inicial un dipolo como el dado por la ecuación (4.27), los resultados no son todavía buenos. A pesar de que parecen mejorar al aumenar el tamaño del recinto computacional, para obtener un error aceptable necesitamos un tamaño del recinto demasiado grande de manera que el coste computacional resulta demasiado alto. Así la obtención de resultados eficientes para casos no lineales más complicados sigue siendo un problema abierto a tratar.

5.1.2. Dimensión uno

En dimensión 1, no hay componente v^{\parallel} , ni variable y . Las ecuaciones con capa acoplada para

$$u'_i - c^2(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) = 0,$$

se reducen a

$$\partial_t v_i + d_i v_i - \mathcal{A} \Delta w_i = 0, \quad \forall i, \quad (5.12)$$

donde \mathcal{A} es una matriz 2×2 :

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & c^2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

y

$$w_i = (\partial_t u_i, \Delta u_i), \quad v_i = (\partial_t u_i, \Delta u_{i-1}), \quad \Delta w_i = w_{i+1} - w_i.$$

En un problema de tipo Klein-Gordon

$$u'_i - c^2(u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + Au_i = 0, \quad A > 0,$$

nos queda:

$$\partial_t v_i + d_i v_i - \mathcal{A} \Delta w_i = \begin{pmatrix} -Au_i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \forall i. \quad (5.14)$$

Nótese que $u_i = u_1 + \sum_{k=1}^{i-1} v_k^{(2)}$, donde $v_k^{(2)}$ denota la segunda componente de v_k . Numeramos los nodos de forma que u_1 es un dato conocido por la condición de contorno.

Los resultados para problemas lineales son buenos, con un coste bastante menor que cuando se usan condiciones de contorno basadas en funciones de Green. Al evitar introducir integrales, no es preciso utilizar esquemas con paso de tiempo constante. Se puede recurrir a esquemas de orden alto y paso variable. La estabilidad de los esquemas resultantes está garantizada por la elección de d .

En tests lineales esta estrategia es efectiva en la supresión de reflexiones. Retomamos a continuación el problema no lineal descrito en la sección 3.3.3, una ecuación discreta unidimensional con fuente $-A \sin(u_n) + F$. Las ecuaciones con capa acoplada quedan:

$$\partial_t v_i + d_i v_i - \mathcal{A} \Delta w_i = \left(-A \sin(u_1 + \sum_{k=1}^i v_k^{(2)}) + F \right),$$

donde d_i es un coeficiente que decrece desde 1 para $i < i_0$ hasta 0 para $i > i_0$, siendo i_0 un valor próximo al borde izquierdo del recinto de computación. En este caso no lineal, los resultados no son buenos debido al efecto combinado del salto y las oscilaciones.

5.2. El sistema de elasticidad bidimensional

Dado que estamos interesados en la obtención de condiciones de contorno para cristales, el sistema continuo de interés son las ecuaciones de la elasticidad con simetría cristalina. En esta sección revisamos la teoría de capas acopladas para problemas de elasticidad.

Consideremos un medio elástico bidimensional anisótropo. Con el fin de diseñar capas perfectamente acopladas, conviene escribir sus ecuaciones en forma de sistema hiperbólico de orden uno, no como el sistema usual de orden dos para los desplazamientos (ecuaciones de Navier). Usando la formulación velocidad-tensión, las ecuaciones que rigen la evolución del medio se escriben:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} - \operatorname{div} \sigma &= 0, \\ A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - \varepsilon(\mathbf{v}) &= 0, \end{aligned}$$

siendo $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ la velocidad y $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$ el tensor de tensiones. C es el tensor de orden cuatro formado por las constantes elásticas y $\mathcal{A} = C^{-1}$. El tensor de deformación $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, siendo $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ el vector

desplazamiento. La velocidad es $\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$. La densidad ρ se supone constante e igual a 1 y se ignorará en lo sucesivo.

Vamos a reescribir este sistema en forma matricial. Para ello identificamos el tensor de tensiones con un vector $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)^t$, $\sigma_1 = \sigma_{11}$, $\sigma_2 = \sigma_{22}$ y $\sigma_3 = \sigma_{12}$. Introducimos las matrices

$$\mathcal{D}^{\parallel} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{D}^{\top} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

$$\mathcal{E}^{\parallel} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^t, \quad \mathcal{E}^{\top} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}^t. \quad (5.16)$$

El sistema se reescribe como

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \mathcal{D}^{\parallel} \frac{\partial \sigma}{\partial y} + \mathcal{D}^{\top} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \quad (5.17)$$

$$\mathcal{A} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \mathcal{E}^{\parallel} \frac{\partial v}{\partial y} + \mathcal{E}^{\top} \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (5.18)$$

Se trata de restringir el recinto computacional a la región $x \leq 0$. Para ello introducimos un coeficiente de amortiguación d en la región $x > 0$. Si conseguimos que este coeficiente haga decaer todo tipo de onda en la región $x > 0$ sin enviar reflexiones dentro de la región $x \leq 0$, habremos diseñado una capa perfectamente acoplada a nuestro problema en $x > 0$. La región $x > 0$ es una capa de amortiguación infinita. En la práctica, el recinto computacional se trunca dentro de la capa, en $x = L > 0$, eligiendo la distancia L de modo que las ondas generadas en la pared artificial $x = L$ se amortiguen y no entren en $x \leq 0$. Tenemos pues una pared de acoplamiento $x = 0$, que no genera reflexiones en el recinto de interés $x \leq 0$ y una pared artificial que genera reflexiones en la capa de amortiguación. El valor del coeficiente d y de la distancia L ha de ser tal que las reflexiones sean despreciables cuando llegan a $x = 0$.

Si se desea truncar el recinto computacional a una caja, se construyen primero capas perfectamente acopladas infinitas para los distintos semiespacios involucrados: $x > -N$, $x < N$, $y > -M$, $y < M$. A continuación, se construye una capa exterior a la caja que combine estas cuatro y se introduce una pared artificial en la que se trunca el recinto computacional. Se espera que la solución calculada dentro de la caja de interés se asemeje a la solución del sistema infinito. Los valores calculados dentro de la capa de amortiguación no son relevantes. Esta capa sirve simplemente para reducir el

recinto computacional garantizando la fiabilidad de los resultados en la caja que rodea. Obviamente, si el grosor de la capa de amortiguación finita L es demasiado grande, el cálculo es demasiado costoso y la técnica no es útil.

Veamos cómo introducir una capa perfectamente acoplada infinita en la dirección x . Descomponiendo

$$\mathbf{v} = v^{\parallel} + v^{\top}, \quad \sigma = \sigma^{\parallel} + \sigma^{\top} \quad (5.19)$$

en componentes paralelas y perpendiculares a la pared $x = 0$ tenemos:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial v^{\parallel}}{\partial t} &= \mathcal{D}^{\parallel} \frac{\partial \sigma}{\partial y}, \\ \rho \frac{\partial v^{\top}}{\partial t} + d(x)v^{\top} &= \mathcal{D}^{\top} \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \\ \mathcal{A} \frac{\partial \sigma^{\parallel}}{\partial t} &= \mathcal{E}^{\parallel} \frac{\partial v}{\partial y}, \\ \mathcal{A} \left(\frac{\partial \sigma^{\top}}{\partial t} + d(x)\sigma^{\top} \right) &= \mathcal{E}^{\top} \frac{\partial v}{\partial x}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

siendo $d(x)$ el coeficiente de amortiguación en $x > 0$. d es nulo para $x \leq 0$. El superíndice \parallel significa que conservamos la derivada paralela a la pared, es decir, la derivada respecto a y . El superíndice \top significa que conservamos la derivada perpendicular a la pared, es decir, la derivada respecto a x .

Para decidir si este sistema nos genera una capa perfectamente acoplada, hay que estudiar la estructura de las ondas planas en él. Las ondas han de decaer. Consideremos en primer lugar el caso isótropo. A continuación, nos centraremos en problemas cúbicos.

5.2.1. Caso isótropo

En el caso isótropo, sólo hay dos constantes elásticas independientes, las constantes de Lamé λ y μ :

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + 2\mu \varepsilon_{ij}. \quad (5.21)$$

El sistema con amortiguación se escribe

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v_1^\top}{\partial t} + d(x)v_1^\top &= \frac{\partial \sigma_1}{\partial x}, & \frac{\partial v_1^\parallel}{\partial t} &= \frac{\partial \sigma_3}{\partial y}, \\
\frac{\partial v_2^\top}{\partial t} + d(x)v_2^\top &= \frac{\partial \sigma_3}{\partial x}, & \frac{\partial v_2^\parallel}{\partial t} &= \frac{\partial \sigma_2}{\partial y}, \\
\frac{\partial \sigma_1^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_1^\top &= (\lambda + 2\mu)\frac{\partial v_1}{\partial x}, & \frac{\partial \sigma_1^\parallel}{\partial t} &= \lambda\frac{\partial v_2}{\partial y}, \\
\frac{\partial \sigma_2^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_2^\top &= \lambda\frac{\partial v_1}{\partial x}, & \frac{\partial \sigma_2^\parallel}{\partial t} &= (\lambda + 2\mu)\frac{\partial v_2}{\partial y}, \\
\frac{\partial \sigma_3^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_3^\top &= \mu\frac{\partial v_2}{\partial x}, & \frac{\partial \sigma_3^\parallel}{\partial t} &= \mu\frac{\partial v_1}{\partial y}
\end{aligned} \tag{5.22}$$

En el caso isótropo, las soluciones de tipo onda plana de (5.18) se pueden escribir como superposición de ondas planas longitudinales y transversales:

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_p &= a_p \mathbf{d}_p e^{i\omega(v_p t - (\cos(\theta)x + \sin(\theta)y))} \\
\mathbf{u}_s &= a_s \mathbf{d}_s e^{i\omega(v_s t - (-\sin(\theta)x + \cos(\theta)y))}
\end{aligned} \tag{5.23}$$

donde $v_p = \sqrt{\lambda + 2\mu}$ y $v_s = \sqrt{\mu}$, son las velocidades de propagación, a_j las amplitudes, \mathbf{d}_j las direcciones de movimiento de las partículas y θ define la dirección de propagación de la onda.

Para el sistema con amortiguación (5.22), las ondas planas son las mismas, pero reemplazando x por

$$\hat{x}_j = x - \frac{i}{\omega v_j} \int_0^x d(z) dz \tag{5.24}$$

para $j = p, s$. En la región $x > 0$, aparecen dos coeficientes de amortiguación

$$e^{-\cos(\theta)v_p^{-1} \int_0^x d(z) dz}, e^{\sin(\theta)v_s^{-1} \int_0^x d(z) dz} \tag{5.25}$$

que decaen si $\cos(\theta) > 0$ para las ondas longitudinales ($\theta \in (-\pi/2, \pi/2)$) y $\sin(\theta) < 0$ ($\theta \in (\pi/2, 3\pi/2)$) para las ondas transversales. Sólo para $\theta \in (-\pi/2, 0)$ se amortiguan ambos tipos de ondas. Este tipo de capas no llega a eliminar todo tipo de ondas en general, sólo las que se propagan en determinadas direcciones.

Al colocar una pared artificial $x = L$ a una cierta distancia de la pared $x = 0$ en la que se activa el coeficiente de amortiguación, se generan una

onda longitudinal y transversal reflejadas [17]. Los coeficientes de reflexión de estas ondas reflejadas son proporcionales a los de las ondas amortiguadas. Su amplitud es menor cuanto más lejos está la pared que trunca la capa de amortiguación y el recinto computacional. Decaen según un factor de orden (5.25) con $x = L$. Obsérvese que el decaimiento sólo se produce para ciertos ángulos de incidencia.

5.2.2. Caso anisótropo

Los cristales tienen simetrías determinadas, luego son anisótropos. No se comportan igual en todas las direcciones. El sistema con capa de amortiguación para $x \geq 0$ es (5.20). Para ver el efecto de la capa, calculamos las ondas planas del sistema exacto (5.18) y del amortiguado.

Las ondas planas son de la forma $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{d}e^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}$, donde \mathbf{d} es el vector de polarización, \mathbf{k} el vector de onda y ω la frecuencia. Estas ondas son solución de las ecuaciones de Navier si satisfacen una relación de dispersión:

$$\begin{aligned} M(k)\mathbf{d} &= \rho\omega^2\mathbf{d}, & M(k) &= C_{ijkl}k_l k_m. \\ F_2(\omega, k) &= \det(M(k) - \rho\omega^2 I) = 0 \end{aligned} \quad (5.26)$$

El vector d ha de ser un autovector de $M(k)$ correspondiente al autovalor $\rho\omega^2$. La ecuación de dispersión tiene cuatro raíces para cada vector de onda k :

$$\begin{aligned} w &= \pm \sqrt{\frac{1}{2\rho} \left(M_{11}(k) + M_{22}(k) + \sqrt{(M_{11}(k) - M_{22}(k))^2 + 4M_{12}(k)^2} \right)}, \\ w &= \pm \sqrt{\frac{1}{2\rho} \left(M_{11}(k) + M_{22}(k) - \sqrt{(M_{11}(k) - M_{22}(k))^2 + 4M_{12}(k)^2} \right)}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

Como el problema original es estable, obtenemos raíces reales que aseguran que las ondas planas no se amplifican con el tiempo. Al considerar el problema modificado (5.20), podría ocurrir que algunas raíces tuvieran parte imaginaria negativa. Ello daría lugar a la generación de inestabilidades.

La velocidad de grupo viene dada por

$$v_g(k) = \nabla_k \omega(k) = -\left(\frac{\partial F_2}{\partial \omega}(1, \mathbf{s}) \right)^{-1} \nabla_k F_2(1, \mathbf{s}).$$

siendo $\mathbf{s} = \frac{k}{\omega}$. F_2 es la ley de dispersión del sistema de elasticidad original, escrito como sistema de segundo orden en tiempo para la variable \mathbf{u} . Al

escribirlo en la formulación velocidad-tensión como sistema de primer orden (5.18), la relación cambia un poco y aparece un autovalor 0: $F_1 = \omega F_2$ en 2D. Obsérvese que la velocidad de grupo es ortogonal a la curvas $\mathbf{s} = cte$. La velocidad de grupo permite definir los frentes de onda. Son las curvas donde las velocidades de grupo toman valores extremos. Permiten estudiar la localización de la energía.

En [5] se han dado algunas condiciones bajo las cuales el problema amortiguado es estable para materiales transversalmente isótropos. Estos materiales tienen 4 constantes elásticas independientes en lugar de 2: $c_{11}, c_{33}, c_{22}, c_{12}$. El resultado depende de las constantes elásticas del material. Dado un material anisótropo arbitrario puede ocurrir que la capa se desestabilice [5, 3].

En un cristal cúbico tenemos tres constantes independientes: c_{11}, c_{44} y c_{12} . Sólo son distintas de cero las constantes: $c_{1111} = c_{2222} = c_{3333} = c_{11}$, $c_{1122} = c_{1133} = c_{2211} = c_{2233} = c_{3311} = c_{3322} = c_{12}$ y $c_{2323} = c_{3131} = c_{1212} = c_{44}$. En 2D, matriz $M(k)$ tiene componentes:

$$\begin{aligned} M_{11}(k) &= c_{11}k_1^2 + c_{12}k_2^2, & M_{22}(k) &= c_{11}k_2^2 + c_{12}k_1^2, \\ M_{12}(k) &= c_{44}k_1k_2 = M_{21}(k). \end{aligned}$$

Los cuatro autovectores (5.27) del problema de elasticidad original son reales y distintos. Esta matriz tiene una estructura similar a la del caso transversalmente isótropo:

$$\begin{aligned} M_{11}(k) &= c_{11}k_1^2 + c_{33}k_2^2, \\ M_{22}(k) &= c_{22}k_2^2 + c_{33}k_1^2, \\ M_{12}(k) &= (c_{12} + c_{33})k_1k_2 = M_{21}(k). \end{aligned}$$

Sería un caso particular en el que $c_{11} = c_{22}$, $c_{33} = c_{12}$ y $c_{44} = c_{12} + c_{33}$.

Podemos obtener resultados de estabilidad de la capa perfectamente acoplada para un material cúbico particularizando para este caso los resultados transversalmente isótropos de [5]. Supongamos de momento que el coeficiente de amortiguación $d > 0$ es constante. Para probar que el sistema amortiguado está bien puesto, basta excluir la existencia de soluciones de tipo onda plana correspondientes a autovalores modificados con parte imaginaria negativa. Se tiene el siguiente resultado, consecuencia de [5]:

Teorema 5.1. *Para la elasticidad con simetría cúbica, el sistema (5.20)*

con $d > 0$ constante tiene soluciones de tipo onda plana con frecuencias

$$\omega(k, d) = \omega(k) + \alpha\left(\frac{k}{|k|}\right)d + O\left(\frac{1}{|k|}\right). \quad (5.28)$$

Su parte imaginaria es $\text{Im}(\alpha(\frac{k}{|k|}))d + O(\frac{1}{|k|})$ y está acotada cuando $|k| \rightarrow \infty$. El sistema (5.20) está bien puesto. Además, $\alpha(\frac{k}{|k|}) = \imath \mathbf{s}^1(\frac{k}{|k|})v_g^1(\frac{k}{|k|})$. Si $\mathbf{s}^1(\frac{k}{|k|})v_g^1(\frac{k}{|k|}) \geq 0$, el sistema es estable a altas frecuencias.

Demostración. Las frecuencias de las ondas planas en un cristal cúbico bidimensional son simples. Son raíces de la ecuación de dispersión

$$F_1\left(\frac{\omega}{|k|}, \frac{k}{|k|}, \frac{d}{|k|}\right) = 0.$$

Como hemos visto, hay cinco soluciones simples, que sirven de punto de arranque a cinco ramas $\omega(k, d)$. El desarrollo (5.28) se obtiene aplicando el teorema de la función implícita en $(\omega(k, 0), k, 0)$. Al ser simples las raíces, $\frac{\partial F_1}{\partial \frac{\omega}{|k|}}\left(\frac{\omega}{|k|}, \frac{k}{|k|}, \frac{d}{|k|}\right) \neq 0$. El valor para α se obtiene desarrollando la ecuación en potencias del parámetro pequeño $\frac{d}{|k|}$ e imponiendo que el primer orden se anule.

Corolario 5.2. *Si para el sistema amortiguado en la dirección x se tiene $\mathbf{s}^1(\frac{k}{|k|})v_g^1(\frac{k}{|k|}) \geq 0$ y para el sistema amortiguado en la dirección y $\mathbf{s}^2(\frac{k}{|k|})v_g^2(\frac{k}{|k|}) \geq 0$, se puede construir una capa perfectamente acoplada en el exterior de una caja.*

En principio, para los materiales cúbicos no se observarían inestabilidades. Los ejemplos de inestabilidad se han construido cuando $c_{11} \neq c_{22}$.

5.3. El sistema de elasticidad discreta

Vamos a considerar en esta sección un sistema de elasticidad discreta tridimensional para un retículo cúbico cuyo límite continuo son las ecuaciones de la elasticidad tridimensional con simetría cúbica. Considerando densidad

constante $\rho = 1$ y llamando:

$$\begin{aligned} D_1^+ v_j(x_1, x_2, x_3) &= v_j(x_1 + h, x_2, x_3), & D_1^- v_j(x_1, x_2, x_3) &= v_j(x_1 - h, x_2, x_3) \\ D_2^+ v_j(x_1, x_2, x_3) &= v_j(x_1, x_2 + h, x_3), & D_2^- v_j(x_1, x_2, x_3) &= v_j(x_1, x_2 - h, x_3) \\ D_3^+ v_j(x_1, x_2, x_3) &= v_j(x_1, x_2, x_3 + h), & D_3^- v_j(x_1, x_2, x_3) &= v_j(x_1, x_2, x_3 - h) \end{aligned}$$

las ecuaciones que rigen la evolución del modelo discreto serán:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = D_1^- \sigma_{i1} + D_2^- \sigma_{i2} + D_3^- \sigma_{i3}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.29)$$

$$A \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \varepsilon(v), \quad (5.30)$$

siendo $u = (u_1, u_2, u_3)$ el vector desplazamiento, $v = (v_1, v_2, v_3)$ la velocidad, ε el tensor de deformación: $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(D_j^+ u_i + D_i^+ u_j)$, $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$ el tensor de tensiones, C el tensor, de orden seis, de constantes elásticas y $A = C^{-1}$.

Con el fin de escribir este sistema de forma matricial identificaremos el tensor de tensiones $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6)^t$ donde $\sigma_1 = \sigma_{11}$, $\sigma_2 = \sigma_{22}$, $\sigma_3 = \sigma_{33}$, $\sigma_4 = \sigma_{12}$, $\sigma_5 = \sigma_{23}$ y $\sigma_6 = \sigma_{13}$ y de manera análoga el tensor de deformación $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \varepsilon_4, \varepsilon_5, \varepsilon_6)^t$. Introduciendo además las matrices:

$$\mathcal{E}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{E}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{F}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}^t, \quad \mathcal{F}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}^t,$$

$$\mathcal{F}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^t,$$

podemos reescribir el sistema (5.29) como:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \mathcal{E}_1 D_1^- \sigma + \mathcal{E}_2 D_2^- \sigma + \mathcal{E}_3 D_3^- \sigma, \quad (5.31)$$

$$A \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \mathcal{F}_1 D_1^+ v + \mathcal{F}_2 D_2^+ v + \mathcal{F}_3 D_3^+ v. \quad (5.32)$$

Al igual que en la sección anterior introducimos una capa perfectamente acoplada en la dirección x_1 . Para ello descomponemos la velocidad y el tensor de tensiones en dos componentes: una paralela al subespacio $x_1 = 0$ (de dimensión 2) denotada con \parallel y otra perpendicular a él (dimension 1) que denotaremos con \top . Así el superíndice \parallel significa que conservamos las diferencias en x_2 y x_3 y con \top conservamos las diferencias en x_1 . Introduciendo un coeficiente de amortiguación en la región $x_1 > 0$, el sistema queda:

$$\frac{\partial v^{\parallel}}{\partial t} = \mathcal{E}_2 D_2^- \sigma + \mathcal{E}_3 D_3^- \sigma, \quad (5.33)$$

$$\frac{\partial v^{\top}}{\partial t} + d(x)v^{\top} = \mathcal{E}_1 D_1^- \sigma, \quad (5.34)$$

$$A \frac{\partial \sigma^{\parallel}}{\partial t} = \mathcal{F}_2 D_2^+ v + \mathcal{F}_3 D_3^+ v, \quad (5.35)$$

$$A \left(\frac{\partial \sigma^{\top}}{\partial t} + d(x)\sigma^{\top} \right) = \mathcal{F}_1 D_1^+ v. \quad (5.36)$$

Una vez más consideraremos primeramente el caso isótropo y posteriormente el anisótropo.

5.3.1. Caso isótropo

Como ya vimos en la sección anterior, en este caso sólo hay dos constantes elásticas independientes, las de Lamé: λ y μ . El tensor de constantes elásticas del problema tridimensional será entonces:

$$C = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{pmatrix}.$$

Usando la forma particular del tensor de constantes elásticas y expresando las ecuaciones (5.33), (5.34), (5.35) y (5.36) en componentes, nuestro sistema

queda:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v_1^\top}{\partial t} + d(x)v_1^\top &= D_1^- \sigma_1, & \frac{\partial v_1^\parallel}{\partial t} &= D_2^- \sigma_4 + D_3^- \sigma_6, \\
\frac{\partial v_2^\top}{\partial t} + d(x)v_2^\top &= D_1^- \sigma_4, & \frac{\partial v_2^\parallel}{\partial t} &= D_2^- \sigma_2 + D_3^- \sigma_5, \\
\frac{\partial v_3^\top}{\partial t} + d(x)v_3^\top &= D_1^- \sigma_6, & \frac{\partial v_3^\parallel}{\partial t} &= D_2^- \sigma_5 + D_3^- \sigma_3, \\
\frac{\partial \sigma_1^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_1^\top &= (\lambda + 2\mu)D_1^+ v_1, & \frac{\partial \sigma_1^\parallel}{\partial t} &= \lambda D_2^+ v_2 + \lambda D_3^+ v_3, \\
\frac{\partial \sigma_2^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_2^\top &= \lambda D_1^+ v_1, & \frac{\partial \sigma_2^\parallel}{\partial t} &= (\lambda + 2\mu)D_2^+ v_2 + \lambda D_3^+ v_3, \\
\frac{\partial \sigma_3^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_3^\top &= \lambda D_1^+ v_1, & \frac{\partial \sigma_3^\parallel}{\partial t} &= \lambda D_2^+ v_2 + (\lambda + 2\mu)D_3^+ v_3, \\
\frac{\partial \sigma_4^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_4^\top &= \mu D_1^+ v_2, & \frac{\partial \sigma_4^\parallel}{\partial t} &= \mu D_2^+ v_1 \\
\frac{\partial \sigma_5^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_5^\top &= 0, & \frac{\partial \sigma_5^\parallel}{\partial t} &= \mu D_2^+ v_3 + \mu D_3^+ v_2, \\
\frac{\partial \sigma_6^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_6^\top &= \mu D_1^+ v_3, & \frac{\partial \sigma_6^\parallel}{\partial t} &= \mu D_3^+ v_1.
\end{aligned}$$

5.3.2. Caso anisótropo

En este caso hay tres constantes elásticas independientes: c_{11} , c_{44} y c_{12} . El tensor de constantes elásticas del problema tridimensional será entonces:

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}$$

y el tensor de tensiones viene dado por:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix}.$$

En un problema bidimensional tomamos $\sigma_{33} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0$, $\varepsilon_{33} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$, $v_3 = 0$ y $v_1 = v_1(x_1, x_2)$, $v_2 = v_2(x_1, x_2)$.

Usando esta reducción y expresando las ecuaciones (5.33), (5.34), (5.35) y (5.36), en el caso bidimensional nuestro sistema queda en componentes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_1^\top}{\partial t} + d(x)v_1^\top &= D_1^- \sigma_1 & \frac{\partial v_1^\parallel}{\partial t} &= D_2^- \sigma_3 \\ \frac{\partial v_2^\top}{\partial t} + d(x)v_2^\top &= D_1^- \sigma_3 & \frac{\partial v_2^\parallel}{\partial t} &= D_2^- \sigma_2 \\ \frac{\partial \sigma_1^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_1^\top &= c_{11}D_1^+ v_1 & \frac{\partial \sigma_1^\parallel}{\partial t} &= c_{12}D_2^+ v_2 \\ \frac{\partial \sigma_2^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_2^\top &= c_{12}D_1^+ v_1 & \frac{\partial \sigma_2^\parallel}{\partial t} &= c_{11}D_2^+ v_2 \\ \frac{\partial \sigma_3^\top}{\partial t} + d(x)\sigma_3^\top &= c_{44}D_1^+ v_2 & \frac{\partial \sigma_3^\parallel}{\partial t} &= c_{44}D_2^+ v_1 \end{aligned}$$

5.3.3. Test numérico

Hemos elegido para la realización de un test numérico un caso anisótropo sencillo. Tomaremos como constantes de elasticidad del material las correspondientes al oro: $c_{11} = 1'86$, $c_{12} = 1'57$ y $c_{44} = 0'42$ (valores adimensionales, las unidades son 10^2 GPa). Además consideraremos que tanto v_2 como v_3 son nulas. De esta forma simplificamos el problema, que se puede expresar (usando la notación de la sección 5.3) mediante la ecuación:

$$\partial_t^2 u_{ij} = c_{11} \Delta_x (\Delta_x u_{i-1j}) + c_{44} \Delta_y (\Delta_y u_{ij-1})$$

En este test hemos aplicado capas perfectamente acopladas en las cuatro paredes del recinto. En la figura 5.4 podemos apreciar el coeficiente de reflexión que relaciona la aproximación anterior con la solución real.

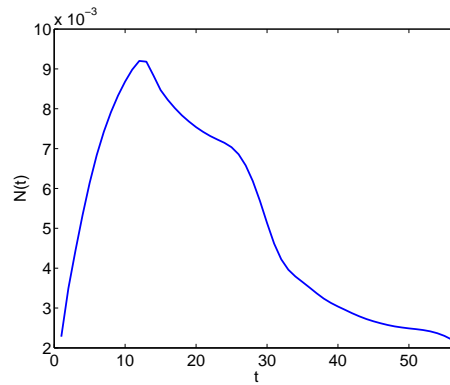


Figura 5.4: Norma euclídea de la diferencia entre la solución exacta y la aproximada mediante capas acopladas en las cuatro paredes del recinto

Como podemos observar en las figuras 5.5 y 5.6, la reflexión hacia el interior es prácticamente nula. Hemos tomado, una vez más, como recinto computacional $-50 \leq x \leq 50$, $-50 \leq y \leq 50$ introduciendo una capa amortiguadora en $x = \pm 10$, $y = \pm 10$. En el borde del recinto computacional hemos impuesto condiciones de contorno nulas.

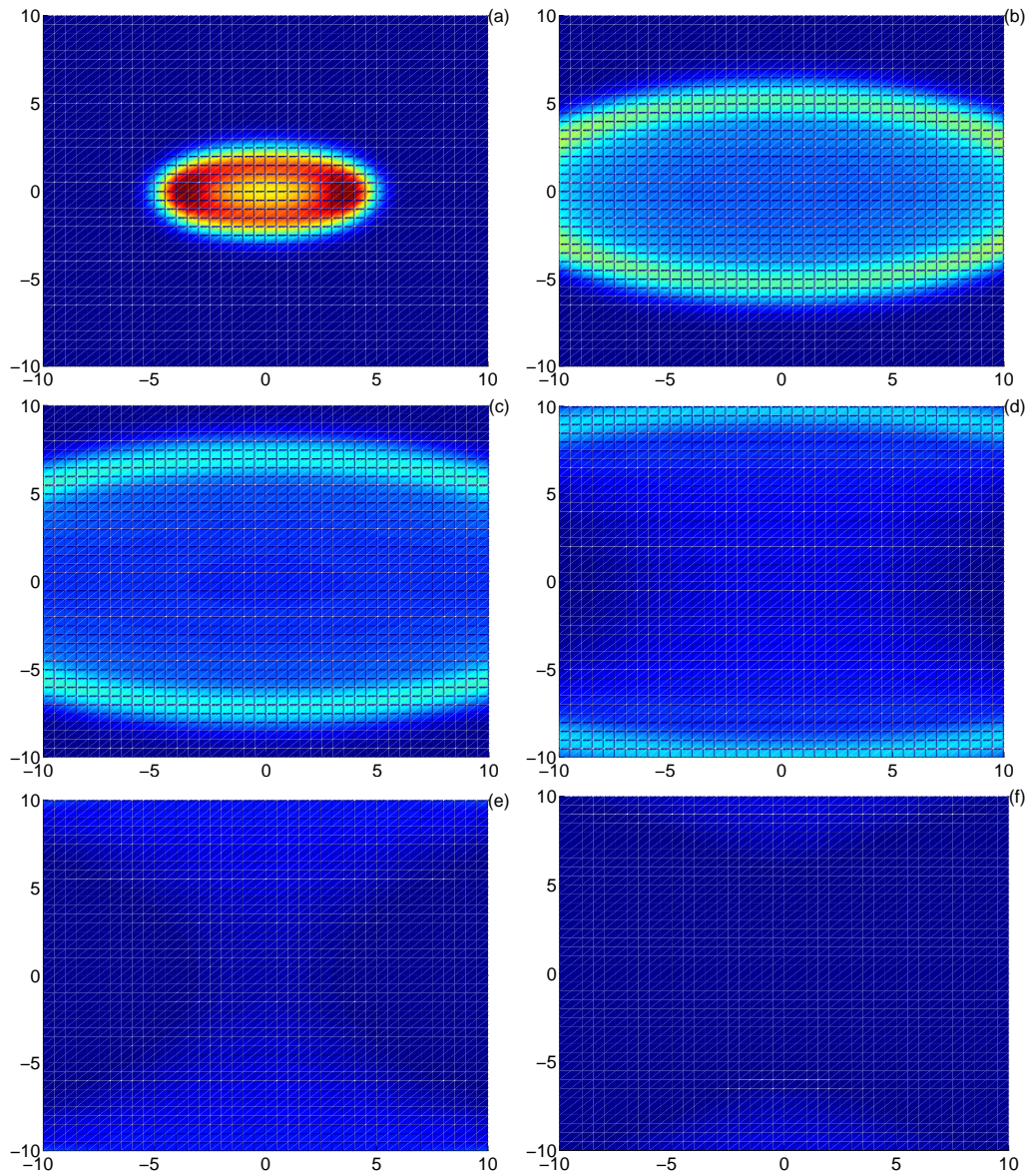


Figura 5.5: Proyección sobre el plano XY de la evolución de un dato inicial de tipo gaussiana al atravesar la frontera artificial en el modelo con capa acoplada aproximada en las cuatro paredes del recinto.

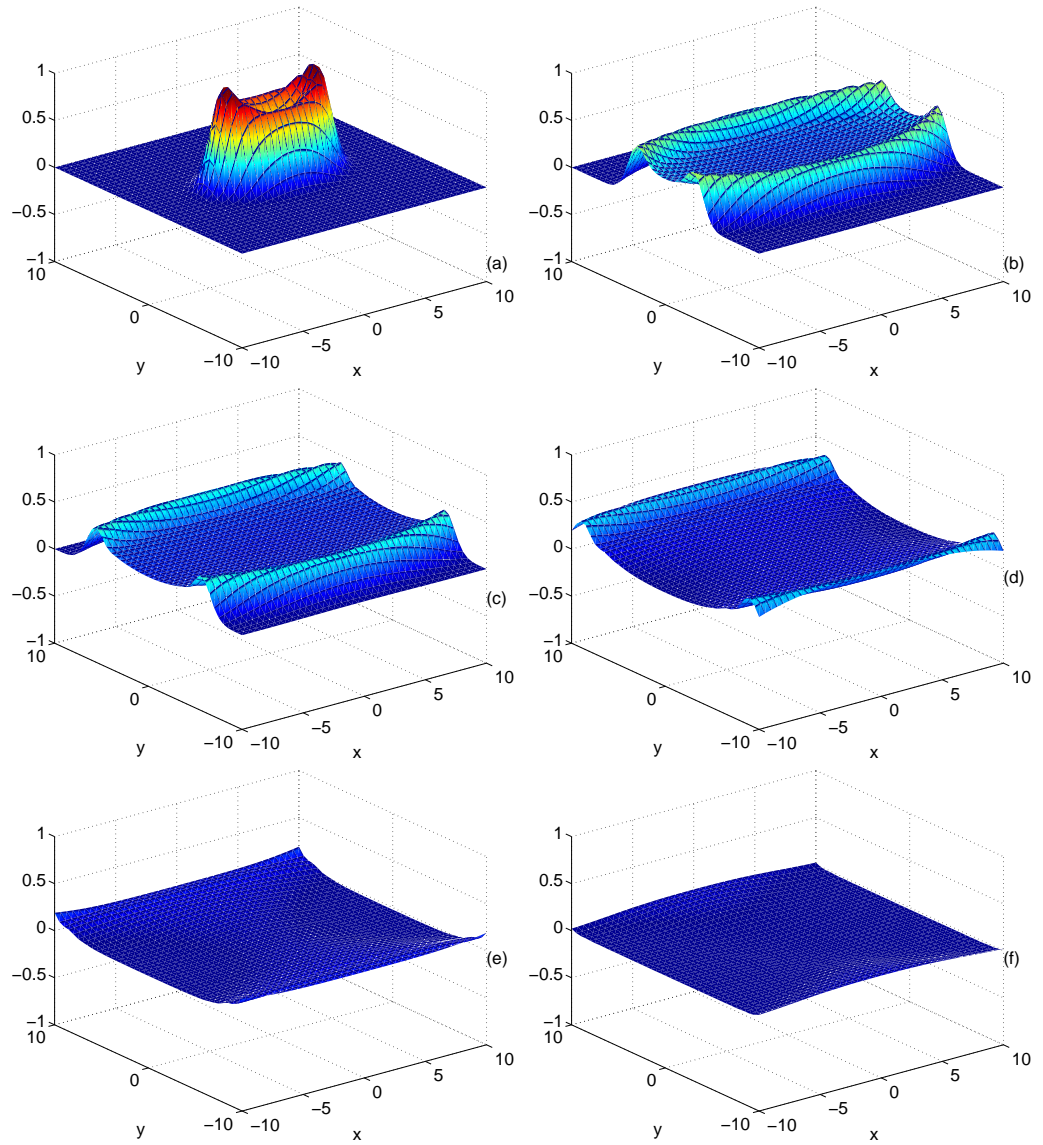


Figura 5.6: Evolución de un dato inicial de tipo gaussiana (a) al atravesar la frontera artificial en el modelo con capa acoplada aproximada en las cuatro paredes del recinto.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis hemos desarrollado condiciones de contorno no reflectantes en dos casos concretos. Por un lado, en modelos de crecimiento de burbujas de helio en plutonio, donde se produce un proceso de agregación molecular. Por otro, en sistemas de elasticidad discreta relacionados con la simulación de dinámica de defectos en nanocristales.

En el capítulo 2 hemos estudiado las ecuaciones para burbujas de helio. Se propone un modelo formado por infinitas ecuaciones diferenciales acopladas para distribución de burbujas de diferentes tamaños. Este modelo corrige un modelo anterior introducido en los Lawrence Livermore National Laboratories mediante la introducción de un coeficiente que depende del tamaño de las burbujas, proporcionando resultados más acordes con los datos experimentales disponibles. Mediante un cambio de variable y transformadas de Laplace, introducimos condiciones de contorno exactas que permiten reducir el sistema infinito a una ecuación integrodiferencial. Usamos esta nueva formulación para obtener información cualitativa sobre la dinámica de la población de burbujas [12]. Queda pendiente dar una justificación física de la modificación introducida en el modelo y calibrar el mismo con los datos disponibles de modo que pueda proporcionar información cuantitativa.

En el caso de modelos para la dinámica de redes atómicas, deducimos condiciones de contorno no reflectantes para problemas de ondas discretas, las extendemos a modelos de elasticidad discreta y estudiamos su utilidad en algunos tests no lineales. Los capítulos 3 y 4 obtienen condiciones exactas y discretizaciones absorbentes. En capítulo 5 se proponen capas perfectamente

acopladas 'aproximadas' discretas.

En el capítulo 3 consideramos cadenas atómicas regidas por ecuaciones de ondas discretas en dimensión uno. Construimos condiciones de contorno exactas a partir de las funciones de Green del problema de valores iniciales, en el espíritu de [25, 24, 29]. Estas condiciones involucran integrales en tiempo. Introducimos una estrategia de discretización que proporciona condiciones de contorno aproximadas absorbentes y testamos su eficiencia en problemas lineales y no lineales [13, 14]. Los resultados en problema lineales son buenos. En los casos no lineales, depende de la no linealidad y el tipo de ondas que llegan a las paredes. El capítulo 4 extiende la idea a retículos bi y tridimensionales.

Los ensayos numéricos realizados con las condiciones teóricamente exactas en varias dimensiones revelan dos inconvenientes. Por una parte, el coste del cálculo de las funciones de Green (definidas por integrales) y de las integrales que definen las condiciones de contorno. Por otra, la dificultad de discretizar las condiciones de contorno en tiempo de modo que el problema resultante sea numéricamente estable y no se creen reflexiones de magnitud relevante. Las capas perfectamente acopladas discretas constituyen una alternativa más eficiente en la práctica. En el capítulo 5 se diseñan capas perfectamente acopladas en ecuaciones de ondas y de elasticidad discretas, inspirados en el tratamiento de modelos de ondas y elasticidad continuos [15]. Testamos la eficiencia de las condiciones no reflectantes obtenidas en problemas bidimensionales lineales y en problemas no lineales sencillos relacionados con el estudio de poblaciones de defectos que interaccionan entre sí [14, 15]. Los resultados numéricos son bastante mejores que los obtenidos con las condiciones de contorno no locales en tiempo desarrolladas en el capítulo 4.

Las condiciones de contorno artificiales obtenidas en los capítulos 3-5 son útiles en problemas lineales y en problemas en los que se puede linealizar en los bordes del recinto computacional. La obtención de buenas condiciones no reflectantes cuando los efectos no lineales son relevantes en las paredes artificiales es un problema completamente abierto.

Bibliografía

- [1] F.F. Abraham, H. Gao, *How fast can cracks propagate?*, Phys. Rev. Lett., Vol. 84, pp. 3113-3116, (2000).
- [2] S.A. Aldeman, J.D. Doll, *Generalized Langevin equation approach for atom/solid-surface scattering: General formulation for classical scattering off harmonic solids*, J. Chem. Phys., vol. 64, pp. 2375-2388, (1976).
- [3] A. Appelé, G. Kreiss, *A new absorbing layer for elastic waves*, J. Comp. Phys., Vol. 215, pp. 642-660, (2006).
- [4] J. Bafalui, J.M. Rubi, *The harmonic liquid away from equilibrium I and II*, Physica A, Vol. 153, pp. 129-159, (1988).
- [5] E. Beaches, S. Fauqueux, P. Joly, *Stability of perfectly matched layers, group velocities and anisotropic waves*, J. Comp. Phys., Vol. 188, 399-433, (2003).
- [6] J.P. Berenger, *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, J. Comput. Phys., vol. 114, pp. 185-200.
- [7] L.L. Bonilla, A. Carpio, J.C. Neu, W.G. Wolfer, *Kinetics of helium bubble formation in nuclear materials*, Physica D, 222, 131-140, (2006).
- [8] J.Q. Broughton, F.F. Abraham, N. Bernstein, E. Kaxiras, *Concurrent coupling of length scales: methodology and application*, Phys. Rev. B, Vol. 60, pp. 2391-2403, (1999).
- [9] W. Cai, M. Koning, V.V. Bulatov, S. Yip, *Minimizing boundary reflections in coupled-domain simulations* Phys. Rev. Lett., vol. 85, pp. 3213-3216. (2000).

- [10] A. Carpio, L.L. Bonilla, *Discrete models for dislocations and their motion in cubic crystals*, Phys. Rev. B Vol. 12, pp. 1087-1097, (2005).
- [11] A. Carpio, *Nonlinear stability of oscillatory wavefronts in chains of coupled oscillators*, Phys. Rev. E, 69, 046601, (2004).
- [12] A. Carpio, B. Tapiador, *Modelos de crecimiento de burbujas en residuos radiactivos*, Actas de XX CEDYA (X Congreso de Matemática Aplicada), Sevilla, 24-28 Septiembre 2007, ISBN 978-84-690-7182-3.
- [13] A. Carpio, B. Tapiador, *Condiciones de contorno no reflectantes para dinámica de defectos en cristales*, Actas del ‘Congress on Numerical Methods in Engineering’ (CMNE 2007) y el ‘Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering’ (XXVIII CIL-AMCE). Editores: A. Rodriguez-Ferran, J. Oliver, P.R.M.Lyra, J. L.D. Alves, Oporto, Portugal, 13-15 junio, 2007.
- [14] A. Carpio, B. Tapiador, *Nonreflecting boundary conditions for discrete waves*, enviado, (2008).
- [15] A. Carpio, B. Tapiador, *Matched layers for discrete waves*, preprint, (2008).
- [16] A. Carpio, B. Tapiador, *Helium bubble growth in radioactive waste*, preprint, (2008).
- [17] F. Collino, C. Tsogka, *Application of the PML absorbing layer model to the linear elastodynamics problem in anisotropic heterogeneous media*, Geophysics, vol. 66, pp. 294-307, (2001).
- [18] C. Corduneanu, *Integral Equations and Applications*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, (1991).
- [19] B.Engquist, A. Madja, *Absorbing boundary conditions on the numerical simulation of waves*, Math. Comput., 31 pp. 629-651. (1977)
- [20] B.Engquist, A. Madja, *Radiation boundary conditions for acoustic and elastic waves calculations*, Commun. Pure Appl. Math. XXXII pp. 313-357. (1979)
- [21] T.M. Flett, *Differential Analysis*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, (1980).

- [22] B. Gustafsson, *Far-field boundary conditions for time-dependent hyperbolic problems*, SIAM J. Sci. Statist. Comput., Vol. 9, pp. 812-828, (1988).
- [23] B. Gustafsson, *Inhomogeneous conditions at open boundaries for wave propagation problems*, Appl. Numer. Math., Vol. 4, pp. 3-19, (1988).
- [24] M.J. Grote, J.B. Keller, *On non-reflecting boundary conditions*, J. Comput. Phys., Vol. 122, pp. 231-243, (1995).
- [25] T.M. Hangstrong, H.B. Keller, *Asymptotic Boundary Conditions and Numerical Methods for Nonlinear Elliptic Problems in Unbounded Domains*, Math. Comput. 48, pp. 449-470 (1987).
- [26] R.L. Higdon, *Absorbing boundary conditions for difference approximations to the multidimensional wave equation*, Math. Comput., Vol. 47, pp. 437-459, (1986).
- [27] B.L. Holian, R. Ravelo, *Fracture simulations using large scale molecular dynamics*, Phys. Rev. B, vol. 51, pp. 11275-11288, (1995).
- [28] W.E.Z. Huang, *Matching conditions in atomistic-continuum modeling of materials*, Phys. Rev. Lett., vol. 85, 135501, 1-4, (2001).
- [29] J.B. Keller, D. Givoli, *Exact non-reflecting boundary conditions* J. Comput. Phys. 82 172–192, (1989).
- [30] A.I. Landau, *Application of a model of interacting chains for the description of edge dislocations*, Phys. Stat. Sol. (b), Vol. 183, 407-417, (1994).
- [31] P. Linz, *Linear multistep methods for Volterra integro-differential equations*, J. Assoc. Comput. Mach., 16, pp. 295-301 (1969).
- [32] W.L. Mokarsky, *Convergence of step-by-step methods for nonlinear integro-differential equations*, J. Inst. Math. Appl. 8, 235, (1971).
- [33] M. Moseler, J. Nordiek, H. Haberland, *Reduction of the reflected pressure wave in the molecular dynamics simulation of energetic particle-solid collisions*, Phys. Rev. B, vol 56, pp 15439-15445, (1997).

- [34] K. Ohsawa, E. Kuramoto, *Flexible boundary condition for a moving dislocation*, J. Appl. Phys., Vol. 86, pp. 179-185, (1999).
- [35] V.S. Ryaben'kii, S.V. Tsynkov, V.I. Turchaninov, *Global discrete artificial boundary conditions for time-dependent wave propagation*, J. Comp. Phys., Vol. 174, pp. 712-758 (2001).
- [36] E. Schrodinger, *The dynamics of elastically coupled point systems*, Annalen der Physik, Vol. 44, pp. 916-934, (1914).
- [37] B. Shiari, R.E. Miller, W.A. Curtin, *Coupled atomistic/discrete dislocation simulations of nanoindentation at finite temperature*, Trans. ASME, 127, pp. 358-368, (2005).
- [38] L.N. Trefethen, L. Halpern, *Well-posedness of one way wave equations and absorbing boundary conditions*, Math. Comput., Vol. 47, pp. 421-435, (1986).
- [39] C.M. Schaldach, W.G. Wolfer, *Kinetics of Helium bubble formation in nuclear and structural materials*, in *Effects of Radiation Materials:21st Symposium*. M.L. Grossbeck; T.R. Allen; R.G. Lott; A.S. Kumar, eds ASTM STP 1447, ASTM International, West Conshohocken.