

## SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES CON CONDICIONES DE CONTORNO ABIERTAS POR EL MÉTODO DE MONTE CARLO

### SOLUTION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS WITH OPEN BOUNDARY CONDITIONS BY THE MONTE CARLO METHOD

V. FRANZ SUXO MAMANI<sup>†</sup>

Carrera de Física

Universidad Mayor de San Andrés

c. 27 Cota-Cota, Campus Universitario, Casilla de Correos 8635

La Paz - Bolivia

(Recibido 17 de junio de 2016; aceptado 15 de diciembre de 2016)

#### RESUMEN

El método estocástico de Monte Carlo se aplica para resolver ecuaciones diferenciales parciales que tienen condiciones de contorno abiertas, es decir, ecuaciones cuyo dominio de solución es infinito. Aplicamos este método a la ecuación de Laplace y a la ecuación de difusión, las cuales modelan fenómenos estacionarios y fenómenos de evolución temporal respectivamente, que son de mucho interés en la física. Como un primer paso se comprueba la eficacia del método de Monte Carlo al comparar los resultados numéricos con las soluciones analíticas de problemas conocidos. El siguiente paso fue aplicar el método a problemas físicos más complejos que no tienen solución analítica. Encontramos que en el caso de la ecuación de difusión, el método de Monte Carlo se aplica directamente sobre el dominio infinito del problema, mientras que en los métodos numéricos más comunes se requiere acotar el dominio del problema.

Código(s) PACS: 02.70.c — 02.70.Bf — 02.70.Uu

*Descriptores:* Técnicas computacionales y simulaciones — Método de diferencias finitas — Aplicaciones de métodos de Monte Carlo

#### ABSTRACT

The stochastic Monte Carlo method is applied to solve partial differential equations with open boundary conditions, i.e., equations that have solutions in an infinite domain. First, we test the effectiveness of the Monte Carlo method by comparing results with the analytical solutions of known problems. Next, we applied the method to more complex physical problems that have no analytical solution. We found that in the case of the diffusion equation, the Monte Carlo method is applied directly on the infinite domain of the problem, while in the most popular numerical methods a bound solution domain is required.

*Subject headings:* Computational techniques and simulations — Finite-difference methods — Applications of Monte Carlo methods

#### 1. INTRODUCCIÓN

Fenómenos físicos en estado estacionario o en evolución temporal son expresados y modelados a través de EDP's elípticas y parabólicas respectivamente. Dependiendo de la complejidad de las condiciones de contorno y las condiciones iniciales, existen soluciones analíticas sólo para casos simples y/o situaciones ideales. El grado de complejidad es aún mayor cuando las condiciones de contorno son abiertas, es decir cuando ciertos fenómenos físicos presentan el dominio de solución extendiéndose hasta el infinito, localizando las condiciones de contorno de manera parcial o total en el infinito.

Para fenómenos que tienen dominios de solución finito, existen varios métodos numéricos como por ejemplo: Diferencias Finitas, Elementos Finitos y Redes de Boltzmann sólo por mencionar algunos. Mientras que, para fenómenos con dominios de solución infinito no se cuenta con una metodología numérica específica, pero en éstos casos aún se pueden utilizar los métodos numéricos citados.

La metodología numérica trabaja sólo sobre EDP's que tienen dominios de solución discretizado y finito, debido a que generalmente se recurre al uso de matrices para representar el dominio de solución, que obviamente debe ser finito. Por tanto, al aplicar algún método numérico para resolver una EDP que tiene un dominio de solución infinito, es necesario

<sup>†</sup>email: fsuxo@fiumsa.edu.bo

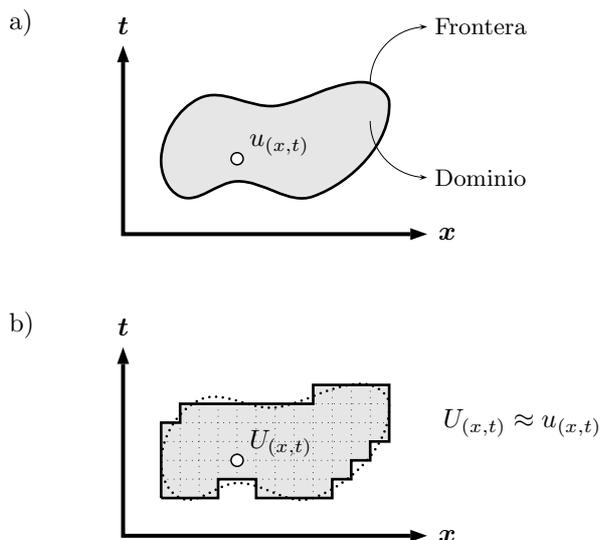


FIG. 1.— Dominio de solución de una EDP de variable espacio-temporal. a) Dominio de solución continuo, y su respectivo b) Dominio de solución discretizado.

acotar de alguna manera su dominio de solución. En Sanjinés (2006) se resuelve la ecuación de Laplace que tiene un contorno abierto mediante el método de Diferencias Finitas, previamente acotando el dominio de solución infinito hasta una distancia razonable con respecto al centro del dominio.

Otra alternativa numérica un tanto diferente para resolver EDP's es el método de Monte Carlo, en ésta metodología se discretiza la EDP mediante Diferencias Finitas, pero no se requiere del uso de matrices para resolver la ecuación en ningún momento. El proceso de discretización por Diferencias Finitas sólo es necesario para obtener las Probabilidades de Transición, que se utilizan en los Paseos Aleatorios que se simulan a través de todo el dominio de solución, tal como se puede ver en Suxo (2011). En síntesis, la solución de una EDP por Monte Carlo se resume a: conteos, sumas y promedios, además no es necesario resolver globalmente el dominio de solución como en los otros métodos citados, se puede resolver sólo una parte de interés, e inclusive un sólo punto del dominio.

El método de Monte Carlo con las características intrínsecas que tiene, resulta ser un buen candidato para abordar fenómenos físicos que presentan un dominio de solución infinito. En este trabajo se aplica ésta metodología estocástica a dos fenómenos específicos: el potencial y la difusión, procesos que son gobernados por las ecuaciones de Laplace y Difusión respectivamente. En primera instancia, se resuelven problemas bien conocidos que tienen soluciones analíticas con el fin de comparar resultados y observar la confiabilidad del método, y finalmente, el método se aplica a situaciones más complejas y reales que no cuentan con solución analítica alguna.

## 2. SOLUCIÓN NUMÉRICA DE UNA EDP Y CONDICIONES DE CONTORNO

### 2.1. Solución numérica de una EDP

Si un determinado fenómeno físico  $u = u(x,y,z,t)$  es expresado mediante una EDP, las condiciones de contorno y/o las condiciones iniciales de la ecuación se encargan de particularizar y definir por completo la naturaleza del fenómeno. Las condiciones de contorno están relacionadas a las variables espaciales  $(x, y, z)$ , mientras que, las condiciones iniciales sólo a la variable temporal  $(t)$ , pero entre ambas condiciones forman la frontera<sup>1</sup> del dominio de solución de la EDP (véase Fig:1a, para el caso  $u(x,t)$ ), siendo la condición inicial también un contorno.

Resolver una EDP mediante métodos numéricos, significa discretizar el dominio de solución y su respectiva frontera (véase Fig:1b, para el caso  $U(x,t)$ ). Este proceso genera un sesgo de error en las soluciones halladas por el método numérico  $U(x,t)$  respecto a la solución exacta  $u(x,t)$ . Pero siempre es posible aproximar la solución numérica a la exacta  $U(x,t) \approx u(x,t)$ , reduciendo el error de la solución hasta un grado de tolerancia según la forma de discretización<sup>2</sup> (Sheid (1968), Kreyszig (2006)).

La solución numérica  $U(x,t)$  es un conjunto discreto y finito que se expresa mediante una matriz:

$$U(x,t) = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & \cdots & U_{1m} \\ U_{21} & U_{22} & & & U_{2m} \\ U_{21} & & & & \\ \vdots & & & & \vdots \\ U_{n1} & U_{n2} & & \cdots & U_{nm} \end{pmatrix}$$

donde, la configuración de los elementos de ésta matriz depende del tipo de EDP y su respectiva forma de discretización. Para hallar la solución  $U(x,t)$  se procede a través de operaciones matriciales o resolver directamente el sistema de ecuaciones lineales (Sheid (1968), Press (2007)).

### 2.2. Condición de Contorno Abierto (CCA)

Existen fenómenos físicos que tienen propiedades infinitas o fenómenos que interactúan con un entorno infinito, como por ejemplo: materia de dimensiones infinita ó materia que se encuentra en un medio infinito, respectivamente. Las EDP's que representan éstos fenómenos físicos, manifiestan el dominio de solución de forma infinita ubicando la frontera en el infinito, es decir la frontera es abierta y el dominio es infinito.

Si un dominio de solución infinito es sometido a una discretización, tanto el dominio como la frontera resultan ser también infinitos. Por tanto las condiciones de contorno discretizadas son abiertas, pero están referidas especialmente a la dimensión espacial y no a la dimensión temporal que es en sí un contorno abierto natural, que se extiende desde el presente  $(t = 0)$  hasta un tiempo futuro  $(t \rightarrow \infty)$ .

<sup>1</sup> En el caso más general la frontera encierra a un hiper-espacio  $xyzt$  y en un caso sencillo-didáctico encierra a un plano  $xt$ .

<sup>2</sup> Por ejemplo: en EDP's elípticas se utiliza el método de discretización de Liebmann, mientras que, en las parabólicas se hace uso del método de Crank-Nicolson.

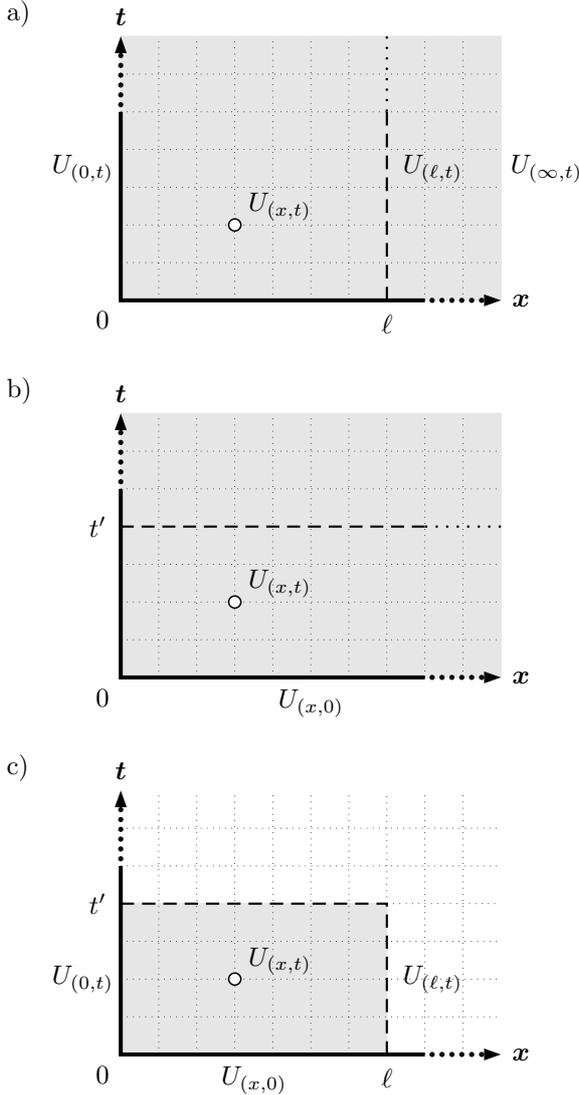


FIG. 2.— Procedimiento para acotar un dominio de solución infinito y discretizado de una EDP de variable espacio-temporal. Proceso: a) espacial y b) temporal. c) Dominio de solución acotado.

### 2.3. Solución Numérica de EDP's con CCA's

Para resolver numéricamente EDP's con CCA's que previamente fué discretizado, es necesario acotar el dominio de solución infinito: espacialmente y temporalmente. En el proceso de acotamiento del dominio infinito, es importante diferenciar entre el acotamiento debido a la parte: *espacial* y *temporal*.

En el acotamiento espacial el contorno  $U_{(\infty,t)}$  es trasladado desde el infinito hasta una posición finita  $x = \ell$  (véase Fig:2a), y ésta acción implica realizar una nueva aproximación  $U_{(\infty,t)} \approx U_{(\ell,t)}$  en la solución de la EDP, además de la aproximación debido a la discretización numérica. Mientras que, en el acotamiento temporal el contorno de la condición inicial  $U_{(x,0)}$  se ubican en  $t = 0$ , y el contorno ubicado en una posición  $t' > 0$  no contiene datos del problema (véase Fig:2b), lo que indica que sólo se realiza un corte (No es un proceso de traslado de contorno!) en el dominio de solución sin generar aproximación alguna en la solución de la EDP.

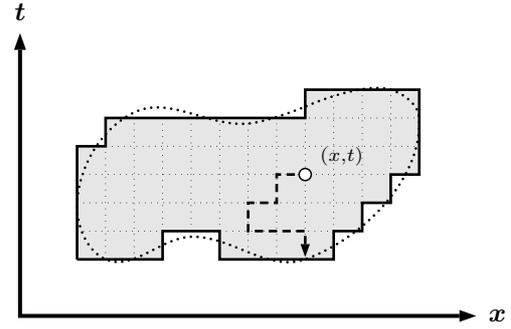


FIG. 3.— Paseo aleatorio sobre un dominio de solución discretizado de una partícula que emerge del punto  $(x,t)$  y termina en la frontera del dominio.

La razón principal para acotar el dominio de solución de una EDP con CCA, es transformar el dominio infinito a un dominio finito, con el fin de obtener un conjunto de solución  $U_{(x,t)}$  finito (véase Fig:2c). A continuación, para hallar la solución de la EDP se puede proceder de la misma manera estandar, tal como se describió para la solución de una EDP con dominio de solución finito.

## 3. CONDICIONES DE CONTORNO ABIERTAS Y EL MÉTODO MONTE CARLO

### 3.1. Solución de EDP's por Monte Carlo

El método Monte Carlo es otra metodología numérica para resolver EDP's y es una conjunción de dos métodos: Diferencias Finitas y Paseos Aleatorios (Random Walk). La discretización de una EDP y su dominio de solución a través de Diferencias Finitas, otorga las *Probabilidades de Transición* que requieren los Paseos Aleatorios que se simulan computacionalmente en el dominio de solución discretizado. Para más detalles ver Suxo (2011).

Según el método Monte Carlo, el dominio de solución es el ámbito donde se realizan los paseos aleatorios de un número de partículas  $N$  que emergen de un determinado punto del dominio  $(x,t)$ . Termina el paseo de una partícula cuando llega a la frontera del dominio (véase Fig:3), y finalmente se procede a: contar, sumar y promediar los valores de la frontera donde llegaron las partículas para obtener la solución  $U_{(x,t)}$ . A medida que se incrementa el número de partículas  $N$  se obtiene un mayor grado de exactitud en las soluciones  $U_{(x,t)}$  (Sheid (1968)).

Introducir Diferencias Finitas en Monte Carlo para resolver una EDP, no significa realizar un tratamiento matricial en dicho proceso. En el método de Monte Carlo, no es necesario el uso de matrices u otro recurso matemático para representar el dominio de solución, siendo ésta la diferencia fundamental con las demás metodologías, como ser: Diferencias Finitas, Elementos Finitos, Volúmenes Finitos, Redes de Boltzmann, . . . , etc (Sheid (1968), Press (2007), Mohamad (2011)). Otra particularidad crucial del método Monte Carlo, radica en que no es necesario resolver simultáneamente la totalidad del dominio de solución (discreto), porque se procede a resolver el dominio punto a punto, es decir se puede resolver el dominio de solución de manera: total, par-

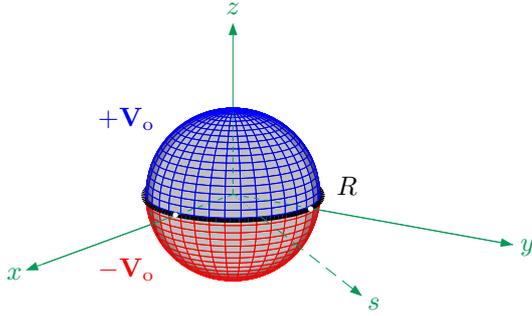


FIG. 4.— Capacitor esférico de radio  $R$  conformado por dos hemisferios cargados contrariamente a un mismo potencial  $V_0$ .

cial o un punto individual.

### 3.2. Solución de EDP's con CCA's por Monte Carlo

Con las características expuestas que tiene el proceso de Monte Carlo más las diferencias mencionadas con otras metodologías, el método Monte Carlo es el adecuado para resolver (numéricamente) EDP's con CCA's por las siguientes razones:

- Es posible abordar EDP's que poseen dominios de solución infinitos a través de simulaciones computacionales, porque no se requieren herramientas matriciales. Caso contrario se necesitan matrices (arreglos) infinitas que no existen e imposibles en un computador.
- No es necesario resolver de manera total el dominio de solución de una EDP. Es posible resolver sólo una región de interés, evitando así el alto costo computacional, es decir: largos tiempos de simulación—ejecución.
- Es posible programar el paseo aleatorio de partículas sobre un dominio de solución infinito, debido a que durante la trayectoria no se realiza registro de datos. Sólo se verifica el punto de la frontera al cuál llega una partícula para proceder a sumar su valor.

Para resolver satisfactoriamente EDP's con CCA's mediante el método de Monte Carlo, es imperativo garantizar que: **los paseos aleatorios arriben a buen puerto**, es decir *las partículas que emergen de un punto del dominio deben terminar necesariamente en la frontera* (en una condición de contorno ó condición inicial). De lo contrario, el paseo aleatorio de una partícula no terminaría jamás.

La forma de proceder para garantizar que un paseo aleatorio arribe a buen puerto, depende del fenómeno físico (tipo de EDP: elíptica, parabólica o hiperbólica). A continuación, se ilustra en detalle la manera de garantizar el requisito mencionado, resolviendo las ecuaciones de: Laplace y Difusión, que modelan fenómenos estacionarios y de evolución temporal respectivamente.

### 3.3. Ecuación de Laplace

La ecuación de Laplace pertenece al tipo EDP elíptica, por tanto representa a fenómenos estacionarios y tiene como frontera del dominio sólo condiciones de contorno.

*Problema:* Capacitor esférico de radio  $R$  conformado por dos hemisferios que se encuentran a un mismo potencial eléctrico  $V_0$  pero de signo contrario (véase Fig:4). Hallar el potencial fuera del capacitor.

*Solución:* Debido a la geometría del capacitor, el potencial eléctrico se expresa en coordenadas esféricas  $u = u(r, \theta, \phi)$  y por su simetría azimutal ( $\phi = \text{cte}$ ) finalmente es expresado como:  $u = u(r, \theta)$ . La EDP que modela el potencial eléctrico y sus respectivas condiciones de contorno se muestran a continuación:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) = 0 \quad (1)$$

$$u_{(R, \theta)} = f(\theta) = \left. \begin{array}{l} +V_0 \quad 0 \leq \theta < \frac{\pi}{2} \\ -V_0 \quad \frac{\pi}{2} < \theta \leq \pi \end{array} \right\} \quad (2)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u(r, \theta) = 0$$

donde, la ecuación representa a una EDP con CCA.

Para resolver el problema mediante el método de Monte Carlo, en primer lugar se debe discretizar la EDP (Ec:1) a través del método de Diferencias Finitas utilizando las siguientes aproximaciones:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \approx \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{(\Delta r)^2} \\ \frac{\partial u}{\partial r} \approx \frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2 \Delta r} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \approx \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{(\Delta \theta)^2} \\ \frac{\partial u}{\partial \theta} \approx \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j-1}}{2 \Delta \theta} \end{array} \right\} \quad (3)$$

donde, el valor discreto:  $U_{i,j} \equiv U_{(i\Delta r, j\Delta \theta)} \approx u_{(r, \theta)}$  y de manera semejante se relacionan los valores vecinos. Las derivadas angulares se desarrollan en *diferencias finitas centrales* para obtener una simetría polar (necesaria en el contorno periódico, ver Fig:5), mientras que, en las derivadas radiales es indiferente cualquier desarrollo.

Reemplazando las Ecs:3 en la Ec:1 y despejando el punto central  $U_{i,j}$  se obtiene la ecuación que otorga las Probabilidades de Transición (Ec:4) hacia los cuatro puntos vecinos:

$$U_{i,j} = \frac{1 + \alpha}{2(1 + \beta)} U_{i+1,j} + \frac{1 - \alpha}{2(1 + \beta)} U_{i-1,j} + \frac{\beta + \gamma}{2(1 + \beta)} U_{i,j+1} + \frac{\beta - \gamma}{2(1 + \beta)} U_{i,j-1} \quad (4)$$

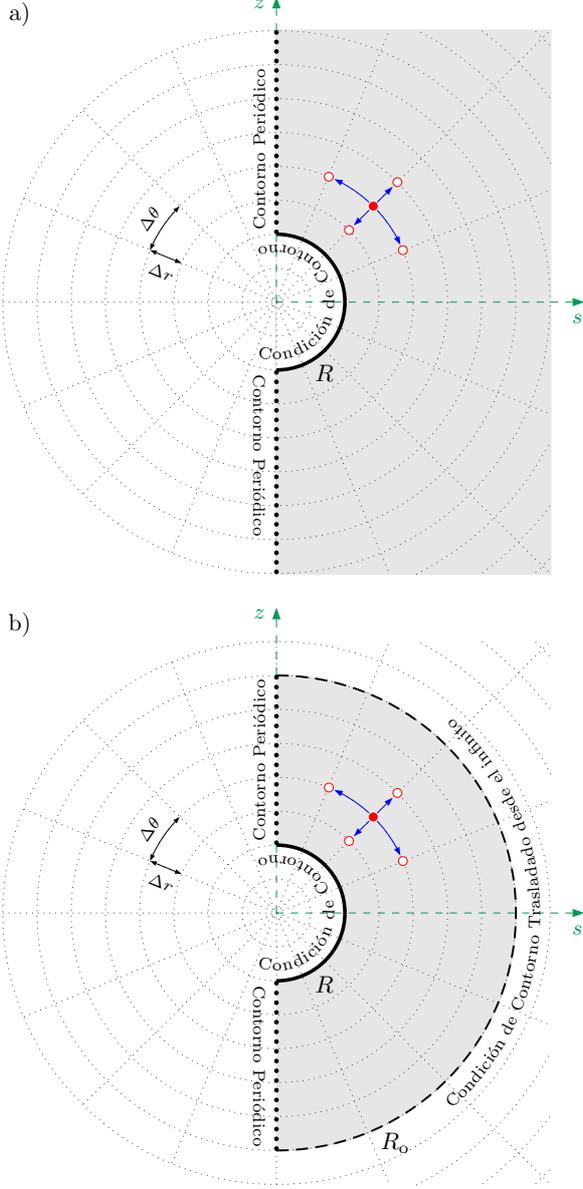


FIG. 5.— Proceso para acotar un dominio de solución infinito más sus respectivas condiciones de contorno. Dominio: a) Semi-anillo infinito y b) Semi-anillo acotado.

donde, las variables  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  tienen valores igual a:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{i} \\ \beta &= \frac{1}{(i \Delta\theta)^2} \\ \gamma &= \frac{1}{2 i^2 \Delta\theta \tan(j \Delta\theta)} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Las Probabilidades de Transición (Ec:4) son la herramienta del método de Monte Carlo para resolver la ecuación de Laplace (Ec:1), simulando paseos aleatorios sobre el dominio de solución: el semi-anillo infinito adherido al plano  $sz$  (véase Fig:5a). La fron-

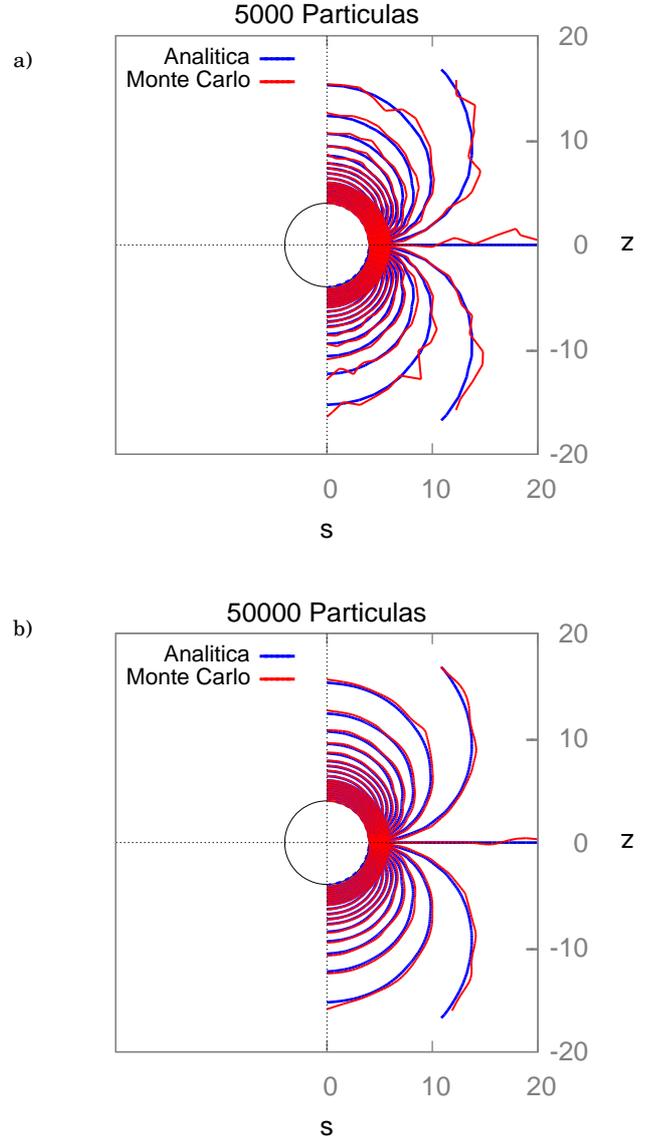


FIG. 6.— Líneas equipotenciales (del potencial eléctrico) obtenidas via: Monte Carlo Vs. Solución Analítica. Simulación: a) 5000 partículas y b) 50000 partículas.

tera del dominio está conformada por: a) un contorno periódico a lo largo del eje  $z$ , más dos contornos semi-circulares de b) radio  $R$  y c) radio infinito<sup>3</sup>.

El paseo aleatorio acaba su recorrido sólo cuando arriba al contorno semi-circular de radio  $R$ , si por el contrario en su paso se encuentra con un contorno periódico, el paseo sufre una reflexión especular debido a la simetría polar continuando su recorrido<sup>4</sup>.

<sup>3</sup> El radio infinito no es posible representar gráficamente. Por otra parte, el eje  $s$  se encuentra confinado al plano  $xy$  y puede asignarse cualquier dirección debido a la simetría azimutal.

<sup>4</sup> Sumando los términos angulares  $U_{i,j+1}$  y  $U_{i,j-1}$  se genera el término de reflexión especular  $U_{i,j\pm 1}$ . Por tanto, cuando la partícula se encuentra en el eje  $z$  se utiliza la ecuación:

$$U_{i,j} = \frac{1+\alpha}{2(1+\beta)} U_{i+1,j} + \frac{1-\alpha}{2(1+\beta)} U_{i-1,j} + \frac{2\beta}{2(1+\beta)} U_{i,j\pm 1}$$

Pero, debido a las cuatro direcciones posibles de transición, el paseo puede realizar un recorrido hacia el contorno de radio infinito sin poder alcanzarlo, lo que significaría un recorrido sin fin.

Para garantizar que: *un paseo aleatorio arribe a buen puerto*, se sigue la técnica sugerida en Sanjinés (2006). Trasladar el contorno de radio infinito hasta un radio razonable pero finito  $R_o$  (véase Fig:5b), lo que significa realizar una aproximación en los valores del contorno:  $U_{(R_o,\theta)} \approx U_{(\infty,\theta)} = 0$ . La precisión está en función del valor asignado al radio  $R_o$ .

**Resultado:** El potencial eléctrico exterior al capacitor encontrado es una superficie  $u = u_{(r,\theta)}$ , pero se representa a través de líneas equipotenciales (curvas de nivel de la superficie), con el fin de comparar con la solución analítica (Simmons (2002), Kreyszig (2006)) siguiente:

$$u_{(r,\theta)} = 2V_o \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(4k-1)}{4k} P_{2k-2(0)} \left(\frac{R}{r}\right)^{2k} P_{2k-1}(\cos\theta) \quad (6)$$

donde, se utilizan los valores:  $R = 4 \text{ cm}$  y  $V_o = 100 \text{ v}$ .

El dominio es acotado hasta un radio  $R_o = 100 \text{ cm}$ , formando un dominio para los paseos aleatorios igual a:  $R \leq r \leq R_o$  y  $0 \leq \theta \leq \pi$ , donde para un determinado punto del dominio  $(i\Delta r, j\Delta\theta)$  se simulan:  $N = 5000$  y  $50000$  partículas. En el proceso de discretización del dominio de solución, en la parte radial:  $\Delta r = R_o/50$  con  $i = 2, 3, 4, \dots, 50$  y en la parte angular:  $\Delta\theta = \pi/31$  con  $j = 0, 1, 2, \dots, 31$ .

Debe notarse que, existe indeterminación en la variable  $\gamma$  de las Ecs:5 cuando  $j = 0, 31$  ( $\theta = 0, \pi$ )<sup>5</sup> debido al término trigonométrico  $\tan(j\Delta\theta)$ . Sin embargo, ambas posiciones corresponden al contorno periódico donde ocurre la reflexión especular del paseo aleatorio, proceso en el cual se simplifica la variable  $\gamma$  al sumar los coeficientes angulares (probabilidades de transición: horario y antihorario) de la Ec:4.

Se obtuvieron resultados  $U_{(i\Delta r, j\Delta\theta)}$  para una parte central del dominio:  $R < r \leq 5R$  y  $0 \leq \theta \leq \pi$ , que se exponen en la Fig:6 en comparación con la solución analítica (Ec:6). En la figura se observa la efectividad del método Monte Carlo, así como también su precisión a medida que se incrementa el número de partículas.

### 3.4. Ecuación de Difusión

La ecuación de Difusión perteneciente al tipo de EDP parabólica representa matemáticamente a fenómenos físicos de evolución temporal, y la frontera del dominio está conformada por: condiciones de contorno y una condición inicial.

**Problema:** Una varilla delgada de longitud infinita y aislada lateralmente se encuentra a una temperatura igual a cero, excepto en una parte de longitud  $L$  ubicada en el centro y tiene una temperatura  $T_o$  (véase Fig:7). Hallar la difusión de la temperatura

<sup>5</sup> Existe la posibilidad de indeterminación para  $\theta = \pi/2$ , pero es evitado dividiendo el rango angular  $\pi$  por un número impar.

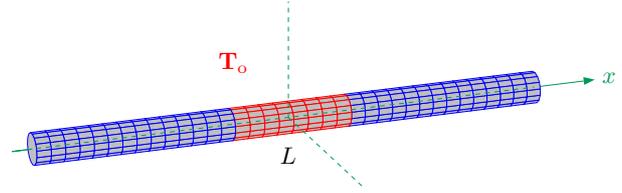


FIG. 7.— Varilla delgada e infinita a temperatura cero excepto en una parte central de longitud  $L$  que tiene una temperatura  $T_o$ .

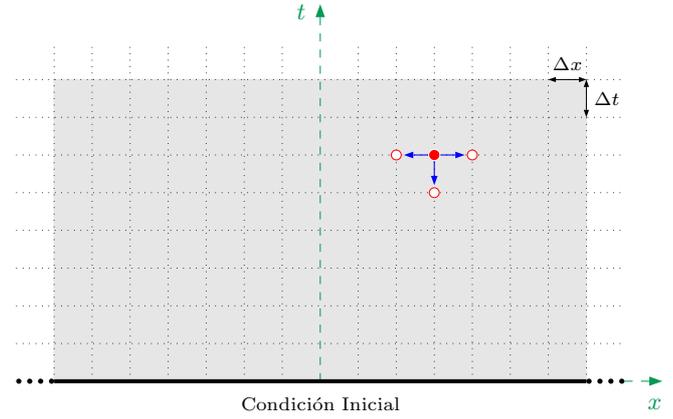


FIG. 8.— Dominio de solución discreto e infinito: con una condición inicial también infinita ubicada en el eje  $x$ , y con condiciones de contorno ubicados en el infinito.

en la varilla para cinco instantes de tiempo (con un coeficiente de difusión del material<sup>6</sup>:  $\lambda$ ).

**Solución:** La temperatura en la varilla es expresado en coordenadas cartesianas:  $u = u_{(x,t)}$ . La EDP que modela la temperatura más sus respectivas condiciones de contorno y condición inicial, es la siguiente:

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (7)$$

$$\left. \begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \pm\infty} u_{(x,t)} &= 0 \\ u_{(x,0)} = f(x) &= \begin{cases} T_o & |x| \leq \frac{1}{2}L \\ 0 & |x| > \frac{1}{2}L \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

donde, la ecuación representa a una EDP con CCA.

Para resolver el problema primero discretizamos la EDP (Ec:7) mediante Diferencias Finitas utilizando las siguientes aproximaciones:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &\approx \frac{U_{i,k} - U_{i,k-1}}{\Delta t} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\approx \frac{U_{i+1,k} - 2U_{i,k} + U_{i-1,k}}{(\Delta x)^2} \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

donde, el valor discreto:  $U_{i,k} \equiv U_{(i\Delta x, k\Delta t)} \approx u_{(x,t)}$  y

<sup>6</sup> Definido por:  $\lambda = \frac{\kappa}{\sigma\rho}$  donde,  $\kappa$  es la conductividad térmica,  $\sigma$  el calor específico y  $\rho$  la densidad del material.

de manera similar se relacionan los valores vecinos. Es necesario utilizar *diferencias finitas hacia atrás* en la derivada temporal, para obtener el sentido de la dirección temporal (eje vertical) hacia el pasado

(abajo), ver Fig:8.

Reemplazando las Ecs:9 en la Ec:7 y despejando el punto central  $U_{i,k}$  se obtiene la ecuación que otorga las Probabilidades de Transición (Ec:10) hacia los tres puntos vecinos:

$$U_{i,k} = \frac{\alpha}{2\alpha+1} U_{i+1,k} + \frac{\alpha}{2\alpha+1} U_{i-1,k} + \frac{1}{2\alpha+1} U_{i,k-1} \quad (10)$$

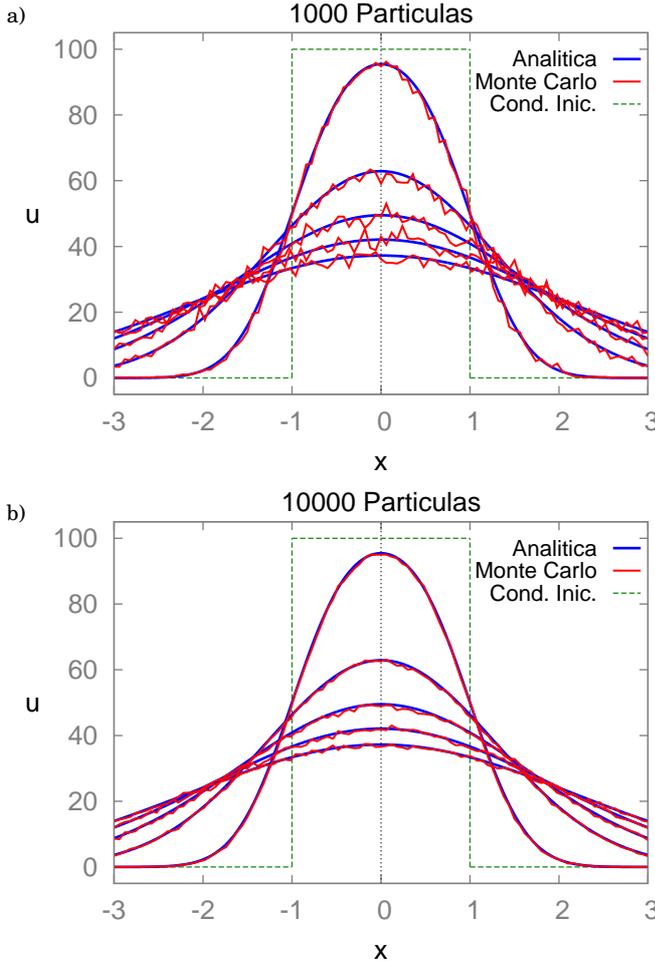


FIG. 9.— Evolución temporal de la temperatura en la varilla obtenido via: Monte Carlo Vs. Solución Analítica. Simulación: a) 1000 partículas y b) 10000 partículas.

donde, el valor  $\alpha$  es el criterio de convergencia<sup>7</sup> igual:

$$\alpha = \lambda \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad (11)$$

Las Probabilidades de Transición (Ec:10) usados en Monte Carlo resuelven la ecuación de Difusión (Ec:7), simulando paseos aleatorios sobre el dominio de solución: el semi-plano infinito  $xt$  (véase Fig:8). La frontera del dominio está conformada por: a) Dos condiciones de contorno (líneas verticales infinitas) ubicados en el infinito positivo y negativo del eje

<sup>7</sup> El método Diferencias Finitas impone que se cumpla:  $\alpha < \frac{1}{2}$ .

$x$ , más b) una condición inicial (línea horizontal infinita) extendida a lo largo del eje  $x$ .

Los paseos aleatorios tienen tres direcciones de transición: dos horizontales (izquierda–derecha) y una vertical hacia abajo (véase Fig:8). Por tanto, los paseos aleatorios en su recorrido van bajando gradualmente para finalmente terminar en la condición inicial, y no en las condiciones de contorno ubicadas en el infinito<sup>8</sup>. En conclusión, *que un paseo aleatorio arribe a buen puerto: ¡está garantizada!* sin la necesidad de acotar el dominio de solución infinito.

*Resultado:* La evolución temporal de la temperatura en la varilla infinita es una superficie  $u = u(x,t)$ , pero se representa mediante la función  $u = u(x)$  por cada  $t$  con el fin de comparar con la solución analítica (Simmons (2002), Kreyszig (2006)) siguiente:

$$u_{(x,t)} = \frac{T_0}{2} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{L/2 - x}{2\sqrt{\lambda t}} \right) - \operatorname{erf} \left( -\frac{L/2 + x}{2\sqrt{\lambda t}} \right) \right] \quad (12)$$

donde, los datos:  $L = 2 \text{ cm}$ ,  $T_0 = 100^\circ \text{C}$  y  $\lambda = 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .

Los paseos aleatorios se realizan sobre un dominio semi–infinito (sin acotar) igual a:  $|x| < \infty$  y  $0 \leq t \leq \frac{17}{8} \text{ s}$ , donde para un determinado punto del dominio ( $i\Delta x, k\Delta t$ ) se simulan:  $N = 1000$  y  $10000$  partículas. En el proceso de discretización del dominio de solución, en la parte espacial:  $\Delta x = 3L/100$  con  $i = -50, -49, \dots, 0, \dots, 49, 50$  y en la parte temporal:  $\Delta t = (\frac{17}{8} \text{ s})/1190$  con  $k = 0, 1, 2, \dots, 1190$ .

Se obtuvieron resultados  $U_{(i\Delta x, k\Delta t)}$  para una parte central de la varilla:  $|x| \leq \frac{3}{2}L$  para cinco instantes de tiempo:  $t = \frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \frac{9}{8}, \frac{13}{8}, \text{ y } \frac{17}{8} \text{ s}$ , que se exponen en la Fig:9 en comparación con la solución analítica (Ec:12). La figura muestra la efectividad del método Monte Carlo, y también su precisión a medida que se incrementa el número de partículas simuladas computacionalmente.

#### 4. APLICACIONES

La efectividad del método Monte Carlo para resolver EDP's con CCA's ha sido comprobada, ahora se aplica la metodología descrita para resolver problemas que no cuentan solución analítica.

##### 4.1. Potencial eléctrico entre una Esfera hueca y una Varilla delgada

<sup>8</sup> Respetando el criterio de convergencia, la probabilidad de un paso hacia abajo es:  $P_{(\alpha < \frac{1}{2})} > 50\%$ . Es decir, es más probable el movimiento vertical (hacia la condición inicial) a los horizontales.

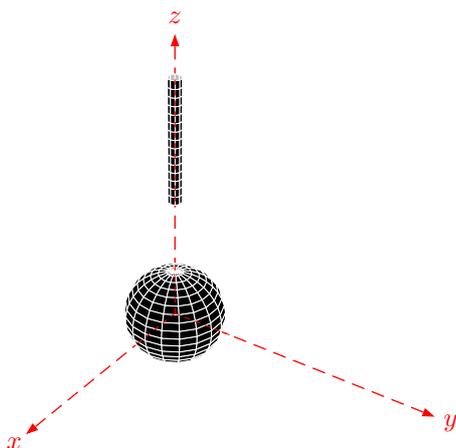


FIG. 10.— Sistema conformado por una esfera y una varilla.

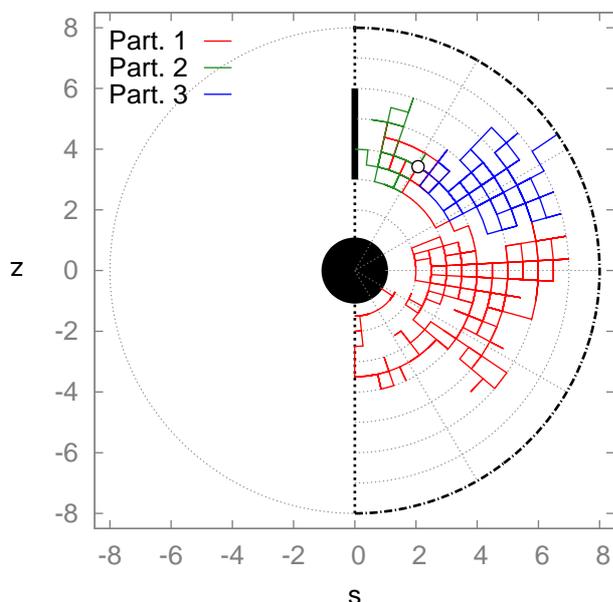


FIG. 11.— Paseos aleatorios simulados computacionalmente sobre el dominio (acotado) del sistema de la Fig:10.

El estudio realizado al capacitor esférico en la Sec:3.3 es la base de este problema. Ahora, el capacitor es la esfera hueca y una varilla delgada se incluye radialmente al sistema (véase Fig:10). El problema consiste en encontrar el potencial eléctrico de interacción entre ambos objetos.

En el dominio de solución (previamente acotado) donde se producen los paseos aleatorios se incluye la varilla<sup>9</sup>, tal como se ve en la Fig:11. La figura muestra tres paseos aleatorios (de partículas) simulados computacionalmente: 1) la roja arriba a la esfera previamente pasando por un contorno periódico, 2) la verde arriba a la varilla y 3) la azul arriba al con-

<sup>9</sup> La inclusión de la varilla en el dominio, no rompe la simetría azimutal del problema debido a su posición estratégica.

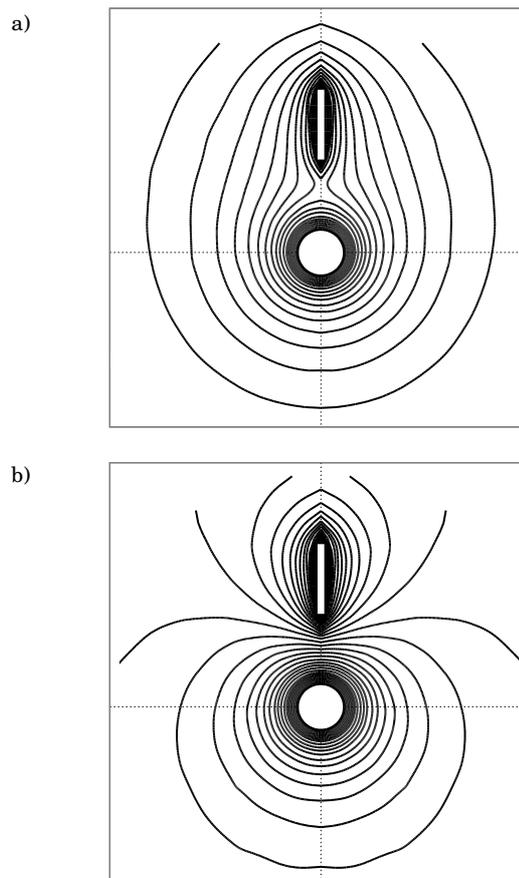


FIG. 12.— Líneas equipotenciales (del potencial eléctrico) entre una esfera y una varilla obtenido via Monte Carlo. a) Ambas del mismo signo y b) de signo contrario.

torno trasladado desde el infinito.

En el estudio, los contornos Esfera–Varilla se encuentran a un mismo potencial eléctrico  $\pm V_0$  en dos casos diferentes: a) ambas del mismo signo y b) de signo contrario. Los resultados obtenidos en ambas situaciones se exponen en la Fig:12, los cuales se representan por líneas equipotenciales.

#### 4.2. Difusión de la Concentración de un sector circular en el Plano

Se estudia la ecuación de Difusión en coordenadas polares, y los detalles para transformar la EDP en una ecuación de Probabilidades de Transición se expone en el Ape:A. El problema consiste en encontrar la evolución temporal de una determinada configuración de concentración:  $u = u(r, \theta, t)$ , que en un inicio tiene la forma de un sector circular (véase Fig:13).

El dominio de solución es un volumen cilíndrico infinito (que descansa sobre el plano  $xy$ ), por tanto su frontera está conformada por: a) el área lateral cilíndrica (de radio y altura infinita) ubicada en el infinito como *condición de contorno*, más b) el círculo (de radio infinito) ubicado sobre el plano  $xy$  como *condición inicial* (véase Fig:14).

Un paso aleatorio tiene cinco posibles direcciones de transición: cuatro espaciales–polares (horizon-

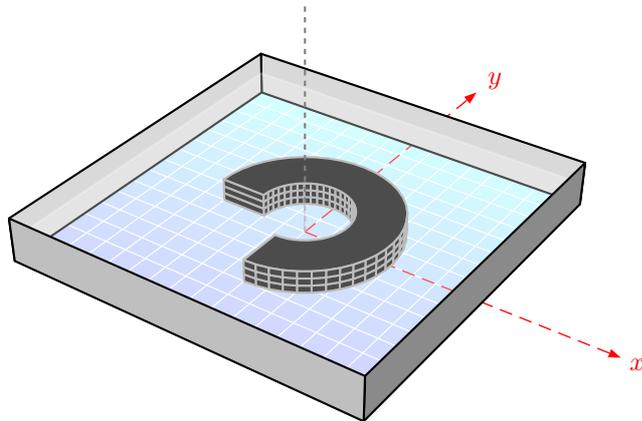


FIG. 13.— Concentración (tinta en agua) de forma circular.

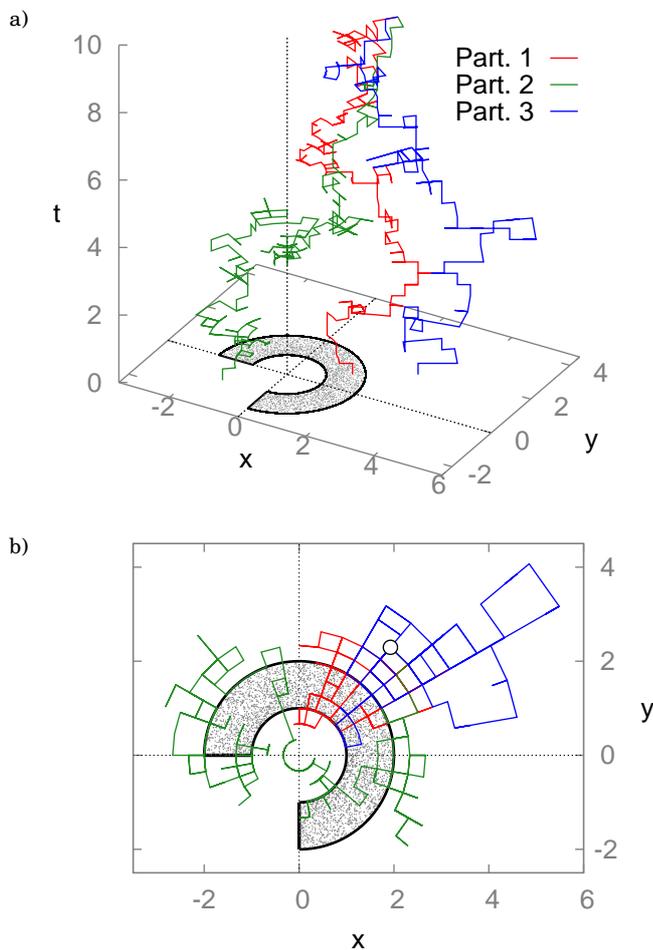
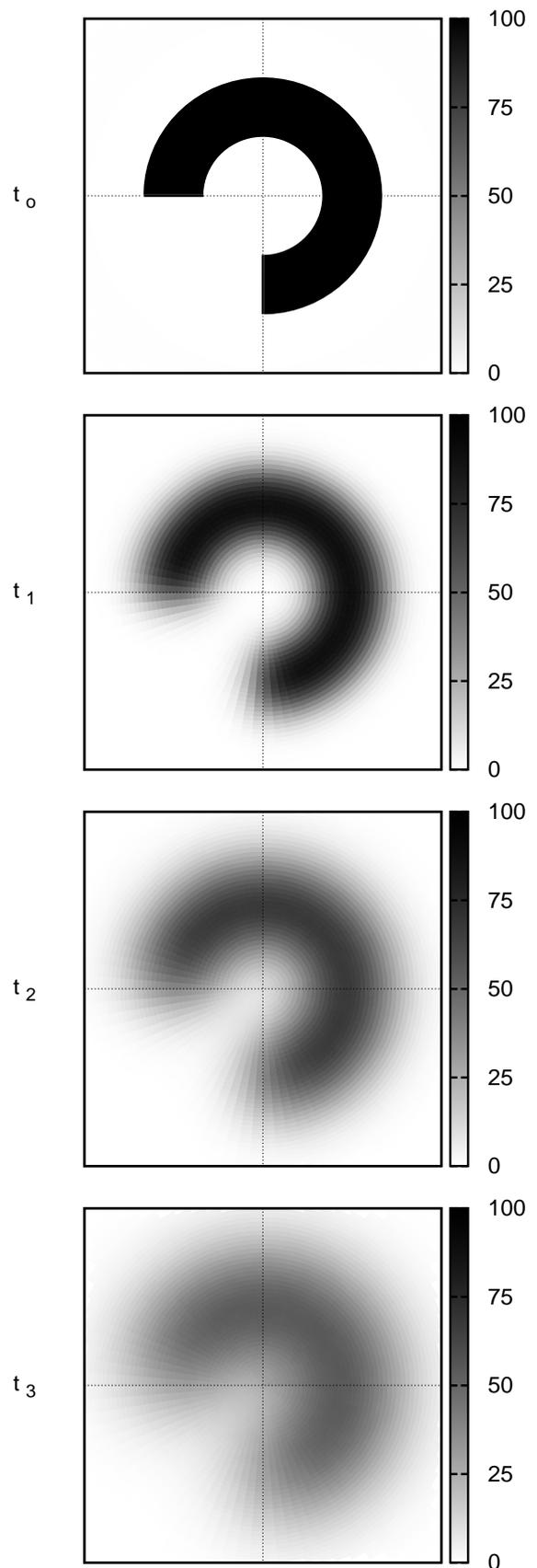


FIG. 14.— Paseos aleatorios simulados computacionalmente sobre el dominio (infinito) del sistema de la Fig:13. Paseos aleatorios: a) simulados en 3D y su respectiva b) proyección en 2D.

tales paralelos al plano  $xy$ ) y una temporal (vertical hacia abajo). En la Fig:14a, se muestran tres paseos aleatorios sobre el dominio infinito que fueron simulados computacionalmente: todas arriban a la condición inicial, donde sólo una de ellas (partícula

FIG. 15.— Difusión de la concentración de un sector circular. Concentración inicial en  $t_0$  y su respectiva evolución temporal para tres instantes de tiempo:  $t_1$ ,  $t_2$  y  $t_3$ .

roja) llega al sector circular, mientras las restantes acaban fuera del sector (partículas, verde y azul).

En el estudio, el sector circular tiene una concentración  $C_0$  que puede representar a una mancha de tinta presente en agua, donde el recipiente es extremadamente amplio pero de muy poca profundidad. Se obtuvieron resultados sobre el proceso de difusión de la concentración para tres instantes de tiempo, que se exponen en la Fig:15.

## 5. CONCLUSIONES

Es posible resolver las ecuaciones de: Laplace y Difusión que tienen condiciones de contorno abiertas mediante el método Monte Carlo. 1) En la ecuación de Laplace es necesario acotar el dominio de solución infinito previamente para su posterior solución por Monte Carlo, mientras que, 2) en la ecuación de Difusión el método Monte Carlo trabaja directamente sobre el dominio de solución infinito, sin la necesidad de acotar el dominio.

Justamente, en los resultados del caso dos radica la importancia de este trabajo, porque las metodologías numéricas popularmente usadas no pueden trabajar sobre dominios infinitos directamente, deben acotar siempre el dominio de cualquier EDP incluido la ecuación de Difusión.

## 6. PERSPECTIVAS

La posibilidad de trabajar con la ecuación de Difusión sin someterlo a procesos de acotamiento, nos motiva a explorar procesos de difusión más complejos, como ser: a) difusión en tres dimensiones ó b) difusión en presencia de obstáculos físicos c) para su posterior aplicación a difusión en conductos porosos abiertos e infinitos.

También existe la posibilidad de estudiar fenómenos de transporte más complejos como ser: procesos difusivos y advectivos simultáneamente, en el cual la ecuación que gobierna estos procesos es la ecuación de difusión-advención:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \nabla^2 u - \nu \nabla u$$

donde,  $\lambda$  es el coeficiente de difusión y  $\nu$  la velocidad del sistema. Esta ecuación es la base de los modelos que describen la propagación de contaminantes en el aire, derramamientos de petróleo en el mar, etc, procesos que son de relevada importancia en la actualidad debido a los problemas ambientales que atraviesa el planeta.

## APÉNDICE

### A. MÉTODO DE MONTE CARLO PARA: ECUACIÓN DE DIFUSIÓN EN COORDENADAS POLARES

La ecuación de Difusión en coordenadas polares que modela un fenómeno físico  $u = u(r, \theta, t)$ , es expresado de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\lambda} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \quad (A1)$$

El método Monte Carlo requiere discretizar la EDP para obtener un dominio de solución discreto, para el ámbito de los paseos aleatorios, por tanto se desarrolla la EDP en Diferencias Finitas a través de las siguientes aproximaciones:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} &\approx \frac{U_{i+1,j,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i-1,j,k}}{(\Delta r)^2} \\ \frac{\partial u}{\partial r} &\approx \frac{U_{i,j,k} - U_{i-1,j,k}}{\Delta r} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} &\approx \frac{U_{i,j+1,k} - 2U_{i,j,k} + U_{i,j-1,k}}{(\Delta \theta)^2} \\ \frac{\partial u}{\partial t} &\approx \frac{U_{i,j,k} - U_{i,j,k-1}}{\Delta t} \end{aligned} \right\} \quad (A2)$$

donde, el valor  $U_{i,j,k} \equiv U_{(i\Delta r, j\Delta \theta, k\Delta t)} \approx u_{(r, \theta, t)}$  y de manera semejante se relacionan los demás valores vecinos:  $U_{i+1,j,k}$ ,  $U_{i-1,j,k}$ ,  $U_{i,j+1,k}$ ,  $U_{i,j-1,k}$  y  $U_{i,j,k-1}$ . Es necesario hacer uso de *diferencias finitas hacia atrás* en la parte temporal y en la primera derivada de la parte radial. En el primer caso, para obtener el sentido de la dirección temporal hacia el pasado para que los paseos aleatorios siempre terminen en la condición inicial del problema (ver Fig:14a). En el segundo caso, el objetivo es impedir que los paseos aleatorios se encuentren con el origen de coordenadas (punto indeterminado), es decir que la probabilidad de transición hacia el origen sea igual a cero cuando se encuentren a un paso del origen (ver Fig:14b y Ec:A3).

Reemplazando las aproximaciones (A2) en la EDP (A1) y dejando el término central  $U_{i,j,k}$  se obtiene la ecuación que otorga las Probabilidades de Transición (A3) hacia los cinco puntos vecinos.

Las direcciones de transición son de dos tipos: las espaciales y la temporal. En las espaciales dos son radiales (hacia: adentro y fuera del origen) y las otras dos son angulares (dirección: horario y antihorario), mientras que, la temporal es hacia atrás ó hacia el pasado (vertical hacia abajo).

$$\begin{aligned}
U_{i,j,k} = & \frac{\alpha}{\alpha(2-\beta+2\gamma)+1} U_{i+1,j,k} + \frac{\alpha(1-\beta)}{\alpha(2-\beta+2\gamma)+1} U_{i-1,j,k} \\
& + \frac{\alpha\gamma}{\alpha(2-\beta+2\gamma)+1} U_{i,j+1,k} + \frac{\alpha\gamma}{\alpha(2-\beta+2\gamma)+1} U_{i,j-1,k} + \frac{1}{\alpha(2-\beta+2\gamma)+1} U_{i,j,k-1} \quad (\text{A3})
\end{aligned}$$

donde, las variables  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  tienen los valores:

$$\left. \begin{aligned}
\alpha &= \lambda \frac{\Delta t}{(\Delta r)^2} \\
\beta &= \frac{1}{i} \\
\gamma &= \frac{1}{(i \Delta \theta)^2}
\end{aligned} \right\} \quad (\text{A4})$$

vergenza impuesto por la utilización del método de Diferencias Finitas:

$$\alpha \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{(\Delta \theta)^2} \right] < \frac{1}{2} \quad (\text{A5})$$

y las variables  $\alpha$  y  $\Delta \theta$  indican el criterio de con-

#### REFERENCIAS

- Kreyszig E. (2006), *Advanced Engineering Mathematics* (John Wiley & Sons)
- Mohamad A. (2011), *Lattice Boltzmann Method – Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes* (Springer)
- Press W. (2007), *Numerical Recipes 3rd Edition* (Oxford University Press)
- Sanjinés D. (2006), *Revista Boliviana de Física* **12**, 17
- Sheid F. (1968), *Numerical Analysis* (McGraw-Hill)
- Simmons G. (2002), *Differential Equations with Applications and Historical Notes* (McGraw-Hill)
- Suxo F. (2011), *Revista Boliviana de Física* **19**, 24