Métodos Computacionales - Trabajo Práctico 1

Resoluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales

Mariño Martina, Martinez Kiara
Universidad Torcuato Di Tella

23 de septiembre de 2025

Índice

1. Ecuación del Calor

1.1. Formulación matemática - Derivación de los métodos explícito e implícito

En esta sección vamos a ver cómo se llega a las fórmulas de los métodos explícito e implícito para resolver la ecuación del calor usando diferencias finitas. La idea es empezar de la ecuación original, discretizarla, y después aproximar las derivadas.

La ecuación que queremos resolver, la ecuación del calor en una dimensión es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0,1), \quad t > 0$$

Donde:

- $u(x,t)$ representa la temperatura en el punto x y tiempo t.
- $\alpha > 0$ es la constante de difusión térmica.

Además, tenemos condiciones de frontera de Dirichlet:

$$u(0,t) = 0, \quad u(1,t) = 0$$

y una condición inicial que nos da la distribución de temperatura al inicio:

$$u(x,0) = f(x).$$

En palabras, se trata de una barra de longitud 1 donde los extremos se mantienen a temperatura cero. Sabemos cómo estaba la temperatura al comienzo y queremos ver cómo cambia con el tiempo.

Discretización: malla de espacio y tiempo. Para resolver el problema de forma numérica dividimos el espacio y el tiempo en puntos separados por pasos fijos:

- Dividimos el intervalo espacial $[0,1]$ en N puntos con separación Δx. Así, las posiciones son:

  $$x_j = j\Delta x, \quad j = 0, 1, \ldots, N$$

  donde $\Delta x = \frac{1}{N}$.

- El tiempo se divide en pasos de tamaño Δt. Los instantes de tiempo quedan como:

  $$t_n = n\Delta t, \quad n = 0, 1, 2, \ldots, M$$

  con $M\Delta t = T$ siendo el tiempo final de simulación.

Notación: llamamos u_j^n a la aproximación numérica de $u(x_j, t_n)$. Los nodos de frontera son $j = 0$ y $j = N$ (donde ya conocemos u gracias a las condiciones de borde). Los nodos internos son $j = 1, \ldots, N-1$, que son los que vamos a actualizar.

Aproximación de las derivadas con diferencias finitas. Vamos a reemplazar las derivadas por aproximaciones usando diferencias finitas:

- Para la derivada temporal usamos una **diferencia hacia adelante**:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

- Para la segunda derivada espacial usamos **diferencias centradas**:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}.$$

Esto introduce un error, pero mientras Δx y Δt sean pequeños, la aproximación es bastante buena.

Sustitución en la ecuación original - Derivación explícito. Si reemplazamos las aproximaciones en la ecuación del calor, nos queda:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}.$$

Definimos un parámetro muy útil llamado r:

$$r = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2}.$$

Este parámetro combina la constante física α con el paso de tiempo Δt y el paso espacial Δx.

Reemplazando esta definición en la ecuación anterior:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = r\big(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\big).$$

El siguiente objetivo es aislar u_j^{n+1} para que quede explícito. Sumamos u_j^n en ambos lados:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r\big(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\big).$$

Expandimos el paréntesis:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r\,u_{j+1}^n - 2r\,u_j^n + r\,u_{j-1}^n.$$

Agrupando términos similares, en especial los que dependen de u_j^n:

$$u_j^{n+1} = (1 - 2r)u_j^n + r\,u_{j-1}^n + r\,u_{j+1}^n.$$

Esta última ecuación muestra que el nuevo valor de temperatura en la posición j y tiempo $n+1$ se calcula como una combinación lineal de:

- El valor previo en la misma posición, u_j^n, ponderado por $(1 - 2r)$.
- El vecino de la izquierda, u_{j-1}^n, ponderado por r.
- El vecino de la derecha, u_{j+1}^n, también ponderado por r.

Así, nos queda el esquema **explícito** completo:

$$\boxed{u_j^{n+1} = (1 - 2r)u_j^n + r\,u_{j-1}^n + r\,u_{j+1}^n},$$

Condición de estabilidad: Este método solo funciona bien si se cumple:

$$r = \frac{\alpha\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}.$$

Si no se cumple, la solución explota y empieza a oscilar de manera irreal.

Interpretación: La temperatura en j tiende a "suavizarse" dependiendo de cómo están los vecinos $j-1$ y $j+1$. Es como un promedio que se va corrigiendo paso a paso.

Derivación Método implícito.

Partimos de las aproximaciones Usamos la misma aproximación temporal (diferencia hacia adelante en el numerador) pero evaluamos la segunda derivada espacial en el tiempo $n+1$:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} \approx \alpha \, \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}.$$

Paso 1. Multiplicar por Δt Multiplicamos ambos lados por Δt para quitar el denominador:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \alpha \, \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \big(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}\big).$$

Paso 2. Definir r y sustituir Como antes definimos

$$r := \frac{\alpha \, \Delta t}{(\Delta x)^2},$$

y reemplazamos:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = r\big(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}\big).$$

Paso 3. Llevar todos los términos con u^{n+1} al mismo lado Queremos agrupar las incógnitas de tiempo $n+1$ a la izquierda y dejar el término conocido u_j^n a la derecha. Para eso pasamos el término de la derecha al lado izquierdo:

$$u_j^{n+1} - r\big(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}\big) = u_j^n.$$

Paso 4. Expandir el paréntesis

$$u_j^{n+1} - r \, u_{j+1}^{n+1} + 2r \, u_j^{n+1} - r \, u_{j-1}^{n+1} = u_j^n.$$

Paso 5. Agrupar coeficientes según cada incógnita Agrupamos los coeficientes de $u_{j-1}^{n+1}, u_j^{n+1}, u_{j+1}^{n+1}$:

$$(-r) \, u_{j-1}^{n+1} + (1+2r) \, u_j^{n+1} + (-r) \, u_{j+1}^{n+1} = u_j^n.$$

De forma más explícita:

$$-r \, u_{j-1}^{n+1} + (1+2r) \, u_j^{n+1} - r \, u_{j+1}^{n+1} = u_j^n.$$

Paso 6. Interpretación local Para cada nodo interior j la ecuación relaciona al nuevo valor u_j^{n+1} con sus vecinos en el mismo nuevo tiempo $n+1$. No hay una fórmula directa para u_j^{n+1} en términos solo de valores en n; por eso hay que resolver un sistema.

1.2. Sistemas lineales y forma matricial

Recordemos el dominio: Tenemos $N+1$ puntos en el espacio, numerados de $j=0$ a $j=N$. Los extremos ($j=0$ y $j=N$) son conocidos por las condiciones de frontera $u(0,t)=u(1,t)=0$. Los valores desconocidos están en los puntos internos $j=1,2,\ldots,N-1$. Eso significa que en cada instante de tiempo tenemos que trabajar con un vector de tamaño $N-1$.

—

1. Método explícito como sistema lineal

El método explícito tiene esta fórmula final:

$$u_j^{n+1} = (1-2r)u_j^n + r\,u_{j-1}^n + r\,u_{j+1}^n, \quad j = 1,2,\ldots,N-1.$$

Esto se puede escribir como un producto matricial:

$$U^{n+1} = B\,U^n,$$

donde:

$$U^n = \begin{bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{N-2}^n \\ u_{N-1}^n \end{bmatrix}$$

es el vector con los valores de los nodos internos en el tiempo t_n.

La matriz B tiene forma tridiagonal:

$$B = \begin{bmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & \cdots & 0 \\ 0 & r & 1-2r & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & r \\ 0 & 0 & 0 & r & 1-2r \end{bmatrix}.$$

Interpretación: Esto significa que para pasar del tiempo t_n al tiempo t_{n+1}, basta con multiplicar el vector actual U^n por la matriz B. —

2. Método implícito como sistema lineal

En el método implícito, la ecuación final para cada nodo es:

$$-r\,u_{j-1}^{n+1} + (1+2r)\,u_j^{n+1} - r\,u_{j+1}^{n+1} = u_j^n, \quad j = 1,2,\ldots,N-1.$$

Esto se puede ver como un sistema lineal:

$$A\,U^{n+1} = U^n,$$

donde U^{n+1} es el vector de incógnitas en el nuevo tiempo, igual que antes:

$$U^{n+1} = \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-2}^{n+1} \\ u_{N-1}^{n+1} \end{bmatrix}.$$

La matriz A también es tridiagonal, pero con valores diferentes:

$$A = \begin{bmatrix} 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & \cdots & 0 \\ 0 & -r & 1+2r & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -r \\ 0 & 0 & 0 & -r & 1+2r \end{bmatrix}.$$

Interpretación: En este caso, no podemos calcular U^{n+1} directamente porque está "mezclado"dentro de la ecuación. Para avanzar un paso en el tiempo hay que resolver el sistema lineal $A\,U^{n+1} = U^n$. Esto se puede hacer en Python con:

```
U_next = numpy.linalg.solve(A, U)
```

2. Ecuación de transporte

La ecuación es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\,\frac{\partial u}{\partial x}, \quad x \in (0,1), \quad t > 0.$$

1. Discretización del dominio Dividimos el espacio y el tiempo en pasos uniformes:

- Posiciones: $x_j = j\Delta x$, con $j = 0, 1, \ldots, N$, donde $\Delta x = \frac{1}{N}$.
- Tiempos: $t_n = n\Delta t$, con $n = 0, 1, \ldots, M$, donde $M\Delta t = T$.

Como antes, usaremos la notación $u_j^n \approx u(x_j, t_n)$.

Derivada temporal (forward):

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}.$$

Derivada espacial: Hay varias formas de aproximarla. Para la versión más simple usamos una **diferencia hacia atrás**:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) \approx \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}.$$

Esto significa que el valor en j depende de él mismo y de su vecino de la izquierda.

Sustituimos las aproximaciones en la ecuación de transporte:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = a\,\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}.$$

Definimos r nuevamente:

$$r := \frac{a\,\Delta t}{\Delta x}.$$

Reemplazando r en la ecuación, queda:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = r\,(u_j^n - u_{j-1}^n).$$

Método explícito Aislamos u_j^{n+1} para obtener la fórmula explícita:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r\,(u_j^n - u_{j-1}^n).$$

Si expandimos el paréntesis:

$$u_j^{n+1} = (1+r)u_j^n - r\,u_{j-1}^n.$$

Interpretación: El valor en la posición j y tiempo $n+1$ depende del valor actual u_j^n y del vecino a la izquierda u_{j-1}^n. Es como si la información se fuera "moviendo"hacia la derecha con velocidad a.

Condición de estabilidad: Para que la solución sea estable, el r debe cumplir:

$$r = \frac{a\,\Delta t}{\Delta x} \leq 1.$$

Si no se cumple, la simulación genera oscilaciones y se vuelve inestable.

Método implícito Ahora evaluamos la derivada espacial en el **tiempo futuro** $n+1$. Partimos de:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = a\,\frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}.$$

Multiplicamos por Δt y reemplazamos $r = \frac{a\,\Delta t}{\Delta x}$:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = r\,(u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}).$$

Reordenamos para dejar todos los términos con u^{n+1} a la izquierda:

$$u_j^{n+1} - r\,u_j^{n+1} + r\,u_{j-1}^{n+1} = u_j^n.$$

Simplificamos términos semejantes:

$$(1-r)u_j^{n+1} + r\,u_{j-1}^{n+1} = u_j^n.$$

2.1. Sistemas Lineales y Forma Matricial

1. Método implícito como sistema lineal

Agrupamos todas las incógnitas $u_1^{n+1}, \ldots, u_{N-1}^{n+1}$ en un vector:

$$U^{n+1} = \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-1}^{n+1} \end{bmatrix}.$$

Así, la ecuación implícita se puede escribir como un sistema lineal:

$$A\,U^{n+1} = U^n,$$

donde A es una matriz **triangular inferior**:

$$A = \begin{bmatrix} 1-r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c & 1-r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c & 1-r & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 1-r \end{bmatrix}.$$

En cada paso temporal hay que resolver este sistema para encontrar U^{n+1}.

2. Método explícito como sistema lineal

El método explícito tiene esta fórmula final:

$$u_j^{n+1} = (1+r)u_j^n - r\,u_{j-1}^n.$$

Esto se puede escribir como un producto matricial:

$$U^{n+1} = B\,U^n,$$

donde:

$$U^n = \begin{bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{N-2}^n \\ u_{N-1}^n \end{bmatrix}$$

es el vector con los valores de los nodos internos en el tiempo t_n.

La matriz B tiene forma tridiagonal:

$$B = \begin{bmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & \cdots & 0 \\ 0 & r & 1-2r & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & r \\ 0 & 0 & 0 & r & 1-2r \end{bmatrix}.$$

Interpretación: Esto significa que para pasar del tiempo t_n al tiempo t_{n+1}, basta con multiplicar el vector actual U^n por la matriz B. —

2.2. Discusión

Comparando los métodos explícito e implícito se observa que...

3. Ecuación de Transporte

3.1. Formulación

La ecuación de transporte está dada por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\frac{\partial u}{\partial x}, \quad u(x,0) = \sin(\pi x) \tag{1}$$

3.2. Resultados y análisis

4. Conclusiones

En este trabajo se implementaron métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales parciales. Se concluye que...