MÉTODOS COMPUTACIONALES 2025 Trabajo Práctico 1:

Resoluciones Numéricas de Ecuaciones Diferenciales

1. Presentación del problema

Descripción del problema

Muchos comportamientos físicos, sociales, económicos y más se modelan mediante ecuaciones diferenciales. Estas ecuaciones no solo relacionan una función con sus variables independientes (como el tiempo o el espacio), sino que también incluyen sus derivadas, que representan tasas de cambio.

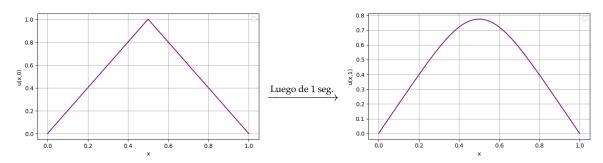
Estas son herramientas poderosas porque permiten modelar cómo evoluciona un sistema a lo largo del tiempo o cómo varía en diferentes puntos del espacio. Por ejemplo, en física, las ecuaciones diferenciales describen el movimiento de partículas, la propagación del calor o el flujo de fluidos. En economía, ayudan a estudiar el crecimiento poblacional, las variaciones de precios o la evolución de inversiones. Incluso en las ciencias sociales, pueden emplearse para modelar la difusión de información o el comportamiento colectivo de grupos humanos.

En este trabajo práctico nos vamos a enfocar en el ejemplo clásico es la **ecuación del calor**, que modela la difusión de temperatura en un medio. Sea u(x,t) la cantidad de calor en un punto del espacio $x \in \mathbb{R}$ en un instante de tiempo $t \in \mathbb{R}^+$. A partir de experimentos físicos se observa que u satisface la siguiente ecuación diferencial parcial:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad u: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R},$$

donde $\alpha > 0$ es una constante de difusión térmica.

Aquí u(x,t) evoluciona a medida que t aumenta



La resolución analítica de este tipo de ecuaciones suele ser muy compleja, por lo que se han desarrollado diversos métodos numéricos para aproximar sus soluciones. En este trabajo introduciremos algunos de estos métodos y mostraremos la estrecha relación que guardan con conceptos de álgebra lineal.

Diferencias finitas

El primer paso en la aproximación numérica consiste en reemplazar las derivadas por aproximaciones discretas. Recordemos que la derivada de una función f en un punto x se define como:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Las aproximaciones por diferencias finitas de la primera derivada, para un h > 0 fijo, son:

■ Diferencia hacia adelante (forward):

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

■ Diferencia hacia atrás (backward):

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x - h)}{h}.$$

■ Diferencia centrada (central):

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

De manera análoga, para la segunda derivada se obtiene la aproximación:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$

Parte 1: Ecuación del calor

Aproximación de la ecuación del calor

Reemplazando las expresiones anteriores en la ecuación del calor, se obtiene una solución aproximada del problema

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

con condiciones de frontera de Dirichlet

$$u(0,t) = u(1,t) = 0,$$
 $t > 0,$

y condición inicial

$$u(x,0) = f(x) = 1 - |2x - 1|, \qquad x \in (0,1).$$

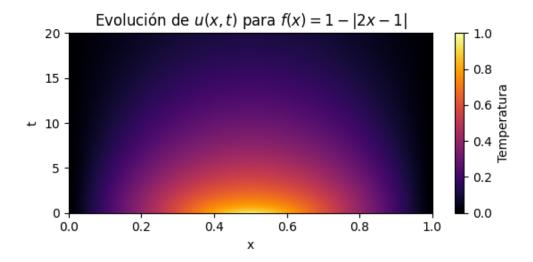


Figura 1: Evolución temporal de la temperatura en la barra (ejemplo).

Sea una malla con N nodos espaciales, paso espacial Δx y paso temporal Δt . Según la discretización utilizada en la derivada temporal, se definen dos métodos principales:

■ Método explícito (forward en el tiempo):

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

■ Método implícito (backward en el tiempo):

$$u_i^{n+1} - r\left(u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}\right) = u_i^n,$$

donde, en ambos casos,

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

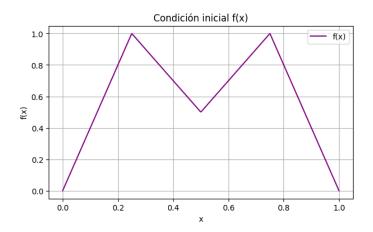
lo que conduce a resolver un sistema lineal en cada paso temporal.

Implementación Computacional

- P1 / P2 1. A partir de la ecuación del calor y su formulación mediante diferencias finitas, explicar cómo se obtienen los métodos explícito e implícito para su resolución numérica.
- P1 / P2 2. Transcribir los métodos propuestos como un sistema de ecuaciones lineales y su forma matricial.
- P1 / P2 3. Implementar una función en Python para cada uno de los métodos numéricos presentados para la ecuación del calor. Cada función debe recibir como parámetros de entrada:
 - α : coeficiente de difusión,
 - f(x): condición inicial,
 - Δx : paso en el espacio,
 - Δt : paso en el tiempo,
 - *T*: tiempo final de simulación.

La función debe devolver una matriz cuya entrada en la posición (i,j) represente la aproximación numérica de la solución en el instante de tiempo $t=i\cdot \Delta t$ y en la posición espacial $x=j\cdot \Delta x$.

P1 / P2 4. Evaluar las funciones anteriores con los siguientes parámetros: $\alpha = 1$, $\Delta t = 0.001$, $\Delta x = 0.05$, T = 0.1 y



$$f(x) = \begin{cases} 4x & \text{si } 0 \le x < \frac{1}{4}, \\ -2x + \frac{3}{2} & \text{si } \frac{1}{4} \le x < \frac{1}{2}, \\ 2x - \frac{1}{2} & \text{si } \frac{1}{2} \le x < \frac{3}{4}, \\ -4x + 4 & \text{si } \frac{3}{4} \le x \le 1. \end{cases}$$

Figura 2: Condición inicial u(x,0) = f(x).

P1 / P2 5. Con los valores devueltos en el caso anterior realizar un GIF de como al variar el instante de tiempo evolucionan los valores en cada lugar espacial. Incluir un pequeño análisis sobre el comportamiento de los métodos según los diferentes parámetros.

Parte 2: Ecuación de transporte

La ecuación de transporte

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial u}{\partial x}, \qquad u(x,0) = f(x),$$

describe cómo una cantidad u se desplaza a lo largo del eje x con velocidad constante a.

El término u(x,t) puede modelar distintos fenómenos, como la concentración de un contaminante en un río, la densidad de vehículos en una carretera o la propagación de una onda sin atenuación. La condición inicial u(x,0)=f(x) fija la **distribución inicial** de la magnitud transportada.

En este caso, la información inicial $f(x_0)$ se propaga siguiendo las trayectorias rectas

$$x(t) = x_0 + at,$$

de modo que el valor esperado en el punto (x,t) es aproximadamente

$$u(x,t) \approx f(x-at).$$

Es importante notar que, al evaluar f(x - at), pueden aparecer valores de x fuera del intervalo [0,1]. Esto no representa un problema teórico, aunque en la práctica restringiremos la visualización y el análisis de los resultados al dominio de interés (por ejemplo, [0,1]).

4

Implementación Computacional

Se deben resolver las mismas consignas de la Parte 1, pero ahora para la ecuación de transporte, considerando las observaciones anteriores. Como condición inicial sugerimos

$$u(x,0) = f(x) = \sin(\pi x),$$

aunque pueden emplear otras funciones si lo consideran más conveniente. Además realicen un estudio de como evoluciona la función según el parámetro α , para $\Delta x = 0.01$ y $\Delta t = 0.005$.

2. Condiciones de entrega

Fecha final de entrega: 28 de septiembre hasta las 23:59

Modalidad de entrega: Via campus

El trabajo debe realizarse en grupos de a tres. El método de entrega es a través del campus y debe consistir de tres archivos:

- 1. *informe.pdf*: un informe en el cual se explique el problema, se detalle las tareas realizadas (y cómo fueron resueltas) y los resultados de sus experimentos, es decir gráficos, tablas y cualquier otra información que quieran proveer (el GIF puede ser entregado aparte);
- 2. *codigo.ipynb*: el código *Python* utilizado en formato jupyter-notebook (.ipynb), el cuál debe poder ejecutarse completamente sin errores;

Pueden utilizar todas las bibliotecas que usamos en la materia (*numpy, matplotlib, pandas*), excepto aquellas librerías que incluyen funciones que resuelven las consignas directamente.

Las consignas sirven como guía del trabajo, pero esperamos que profundicen más allá de lo que se pide, investiguen y experimenten.