
Modelización y Simulación Computacional de Materiales

Ecuaciones diferenciales en
Derivadas Parciales:
Diferencias Finitas

Ecuaciones diferenciales, ejemplos

- Segunda ley de Newton

$$F = m \frac{d^2 x}{dt^2}$$

- Ecuación de Poisson (calor)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -\rho(x, y)$$

- Ley de difusión de Fick

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- Ecuación de ondas

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi$$

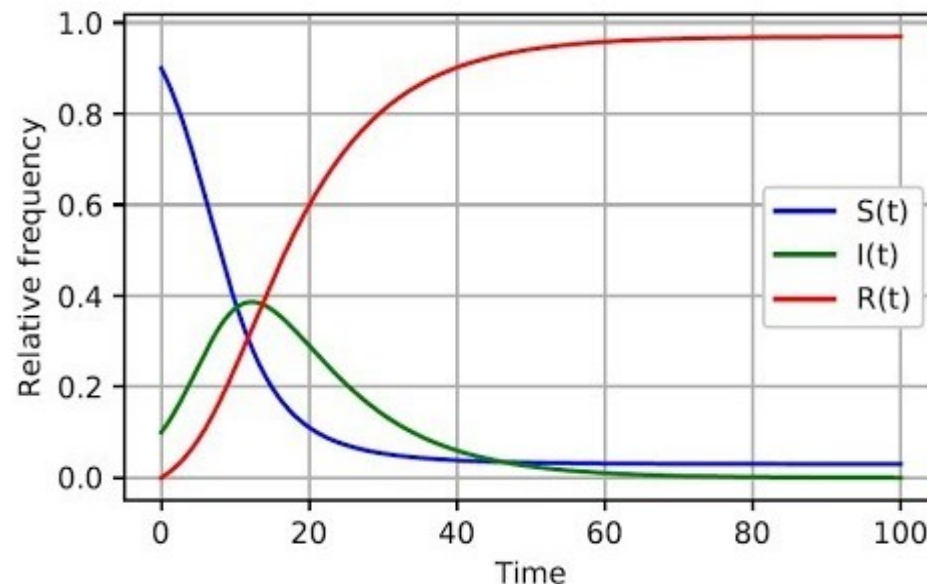
Modelización epidemiológica

Hay muchos modelos y variaciones.
El más común, para empezar, es el modelo SIR

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\beta IS}{N}$$

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\beta IS}{N} - \gamma I$$

$$\frac{dR}{dt} = \gamma I$$



Ecuaciones diferenciales, clasificación

- Ordinarias
(tendremos **una sola** variable independiente)

$$F = m \frac{d^2 x}{dt^2}$$

- En derivadas parciales
(**varias** variables independientes)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -\rho(x, y)$$

En muchos casos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales pueden llevarse a ecuaciones diferenciales ordinarias

Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

Las funciones dependen de dos o más variables independientes: (x,y,z) o (x,y,z,t)

Por su uso amplio, nos restringiremos a las ecuaciones lineales de segundo orden.

Si las escribimos en forma general:

$$A \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} + C \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + D \frac{\partial f}{\partial x} + E \frac{\partial f}{\partial y} + Ff = G$$

la clasificación dependerá del signo de $B^2 - 4AC$

EDP, clasificación

$B^2 - 4AC$	Categoría	Ejemplo
<0	Elíptica	Ecuación de Laplace $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$
$=0$	Parabólica	Ecuación de cond. calor $\frac{\partial T}{\partial t} = k' \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$
>0	Hiperbólica	Ecuación de onda $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}$

Clasificación física de los problemas

Tenemos la misma clasificación que antes:

- Equilibrio
- Propagación
- Autofunciones

Problemas de equilibrio

En general son ecuaciones elípticas,
definidas en un contorno cerrado

Ej: Ecuación de Laplace

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Problemas de propagación

El dominio de la solución es abierto,
al menos en una de las variables
independientes (t)

Ej: transmisión de calor

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k' \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

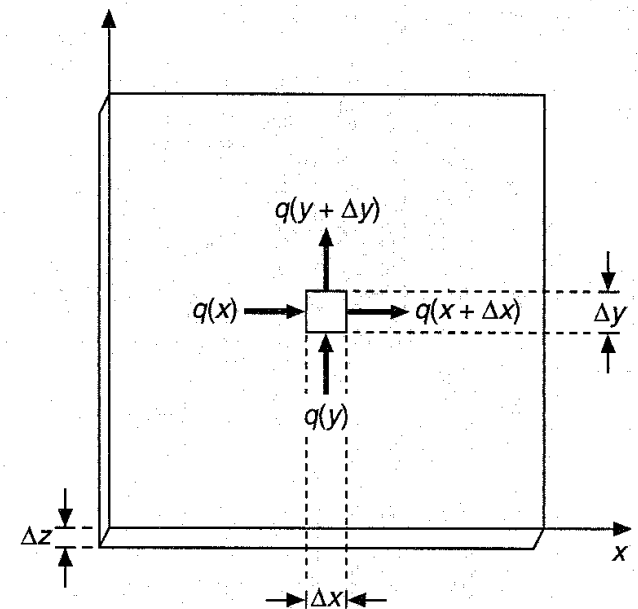
Ecuaciones elípticas

Ecuación de Laplace

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Uso: fluidos, difusión de masa,
difusión de calor,
electrostática, etc.

Tomaremos como ejemplo el
problema de conducción de
calor, en dos dimensiones.



Ecuaciones elípticas: Ec. de Laplace

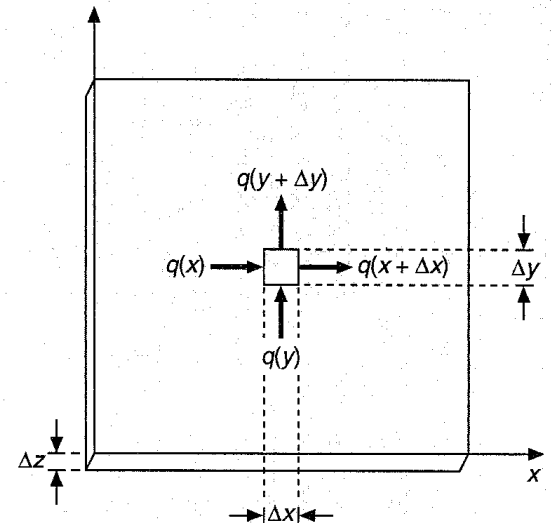
$$q(x) \Delta y \Delta z \Delta t + q(y) \Delta x \Delta z \Delta t =$$

$$q(x + \Delta x) \Delta y \Delta z \Delta t + q(y + \Delta y) \Delta x \Delta z \Delta t$$

Reordenando y dividiendo por $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$

$$\frac{[q(x) - q(x + \Delta x)]}{\Delta x} + \frac{[q(y) - q(y + \Delta y)]}{\Delta y} = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial q}{\partial x} - \frac{\partial q}{\partial y} = 0$$



Ecuaciones elípticas: Ec. de Laplace

La ecuación de Fourier nos dice:

$$q_i = -k \rho C \frac{\partial T}{\partial i}$$

donde

k = coeficiente de difusión térmica

ρ = densidad del material

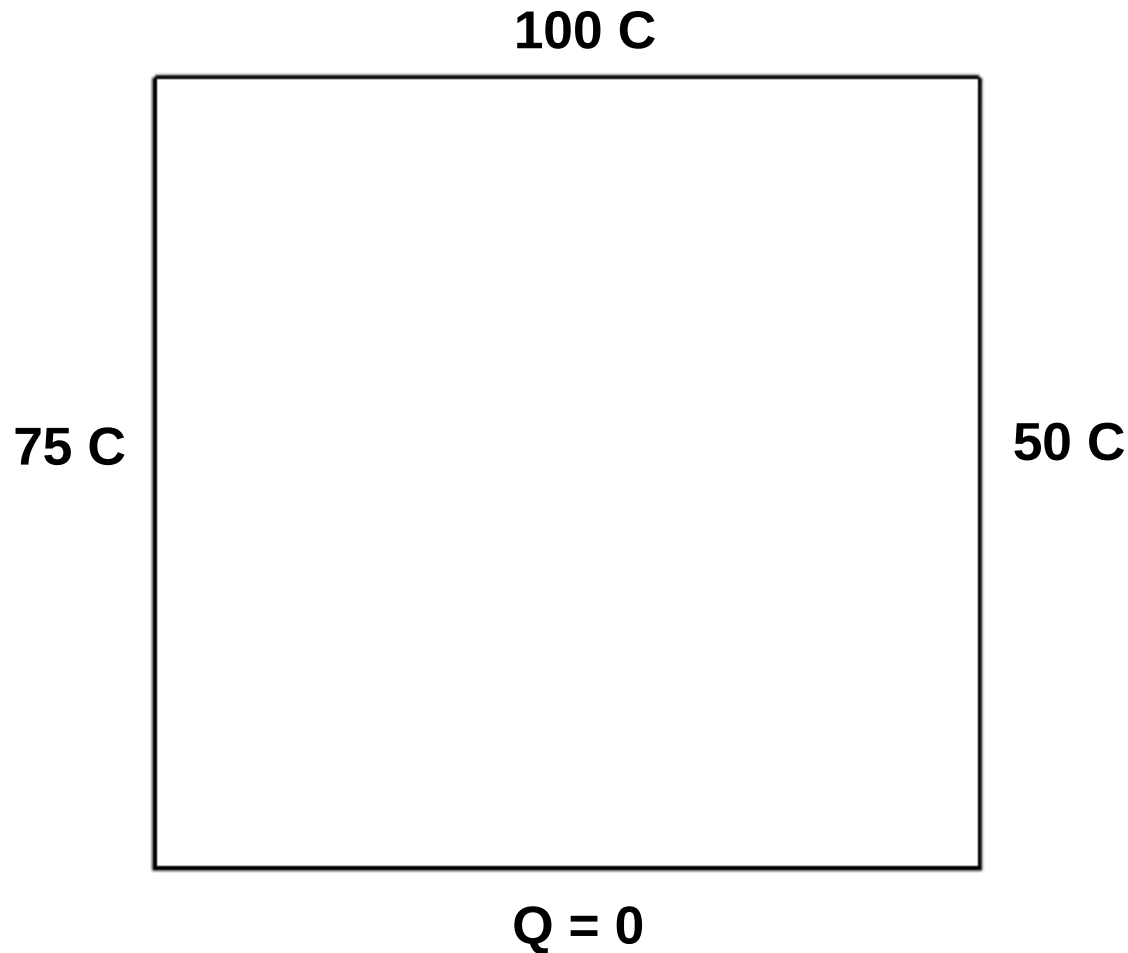
C = capacidad calorífica

se define: $k' = k \rho C$ = coef. de conductividad térmica

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Ec. de Laplace, ejemplo (guia-2)

Supongamos que queremos resolver el siguiente problema

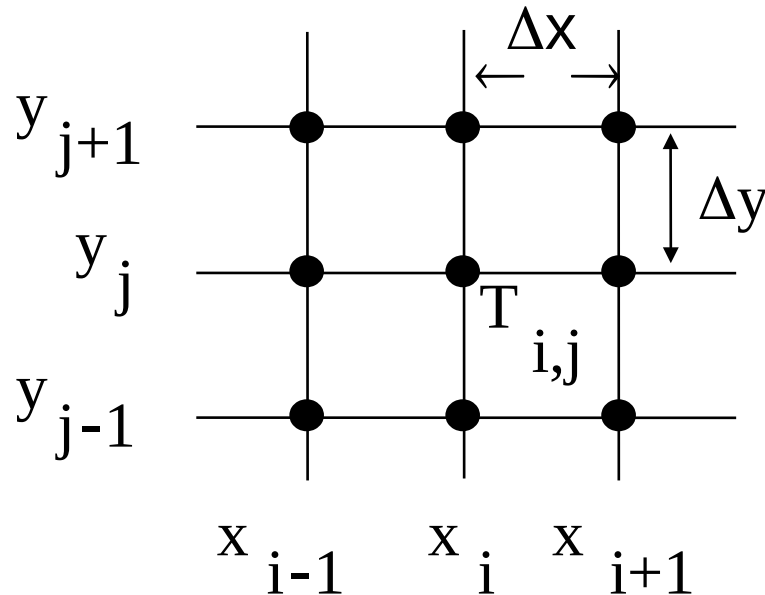


Ec. de Laplace: diferencias finitas

Apliquemos el método de
diferencias finitas centradas

Supongamos un problema plano y tomemos, por
ejemplo, un grilla como esta:

$$T_{i,j} = T(x_i, y_j)$$



Ec. de Laplace: diferencias finitas

En la clase anterior, para un problema unidimensional, habíamos usado:

$$\frac{d^2T}{dx^2} \approx \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Para nuestro problema, ahora en dos dimensiones, haremos lo mismo **para cada coordenada**:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

y

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

Ec. de Laplace: diferencias finitas

$$\text{Teníamos entonces: } \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1,j} - 2 T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2} \quad y \quad \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j+1} - 2 T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

$$\Rightarrow \frac{T_{i+1,j} - 2 T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2 T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0$$

Si definimos $\beta = \frac{\Delta x}{\Delta y}$ (si la grilla es cuadrada, $\beta = 1$):

$$\Rightarrow T_{i-1,j} + \beta^2 T_{i,j-1} - 2(1 + \beta^2) T_{i,j} + T_{i+1,j} + \beta^2 T_{i,j+1} = 0$$

Ec. de Laplace: diferencias finitas

$$T_{i-1,j} + \beta^2 T_{i,j-1} - 2(1 + \beta^2) T_{i,j} + T_{i+1,j} + \beta^2 T_{i,j+1} = 0$$

La ecuación es similar a la obtenida para el método de diferencias finitas en una dimensión, sólo que debemos reordenar los elementos, **para llevar (i,j) a un solo índice**

Por ejemplo, si la red la tomamos como de $n_x \otimes n_y$

y numeramos $0 \leq i \leq n_x - 1$; $0 \leq j \leq n_y - 1$

$$k = i + j \cdot n_x \Leftrightarrow \begin{cases} j = k // n_x \\ i = k - j \cdot n_x \end{cases}$$

Ec. de Laplace: diferencias finitas

Con este cambio la ecuación queda de la forma:

$$T_{k-1} + \beta^2 T_{k-N_x} - 2(1 + \beta^2) T_k + T_{k+1} + \beta^2 T_{k+N_x} = 0$$

Tendremos que resolver un sistema de ecuaciones

$$[A]\{T\} = \{b\} \quad \text{donde } [A] \text{ será generalmente}$$

$$[A] = \begin{bmatrix} \dots & 0 & \dots & -2(1+\beta^2) & 1 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \beta^2 & \dots & 1 & -2(1+\beta^2) & 1 & \dots & \beta^2 & \dots \\ \dots & 0 & \dots & 0 & 1 & -2(1+\beta^2) & \dots & 0 & \dots \end{bmatrix}$$

y $\{b\}$ dependerá de las condiciones de contorno

Tener mucho cuidado con las condiciones de contorno!!

Ec. de Laplace: diferencias finitas – CC Dirichlet

La matriz anterior será válida solo en los puntos **interiores**.

En los bordes debo aplicar **las condiciones de contorno**.

Si son valores de la función, **temperatura**, tendré lo que se llaman condiciones de Dirichlet.

Para estos puntos vale directamente, como antes,

$$T_k = T_{dato}$$

Con lo que se modificará esa fila en la matriz **A**, mientras que el vector **{b}** tendrá la información del dato respectivo.

Ec. de Laplace: diferencias finitas

Nos queda un sistema de ecuaciones

$$[A]\{T\} = \{b\}$$

Notar que los sistemas pueden ser muy grandes, de tamaño $(N_x \otimes N_y) \times (N_x \otimes N_y)$

Método de Liebmann

$$T_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + \beta^2 T_{i,j+1} + \beta^2 T_{i,j-1}}{2(1 + \beta^2)}$$

Muchas veces debe usarse *relajación*

$$T_{i,j}^{propuesta} = \lambda T_{i,j}^{resultado} + (1 - \lambda) T_{i,j}^{anterior}$$

Ec. de Laplace: diferencias finitas – CC Newmann

¿Qué pasa si las condiciones de contorno se dan en las derivadas (**calor**)? (cond. de Neumann)

Supongamos que tengo la derivada en los puntos del borde inferior ($i, j = 0$); si planteamos la ecuación para ellos y nos **inventamos** un punto ficticio abajo de los mismos, " $j = (0 - 1)$ ", la ecuación queda (cuidado con la notación y python):

$$T_{i-1,0} + \beta^2 T_{i,(0-1)} - 2(1 + \beta^2) T_{i,0} + T_{i+1,0} + \beta^2 T_{i,j+1} = 0 \quad ,$$

aproximando ahora la derivada primera como:

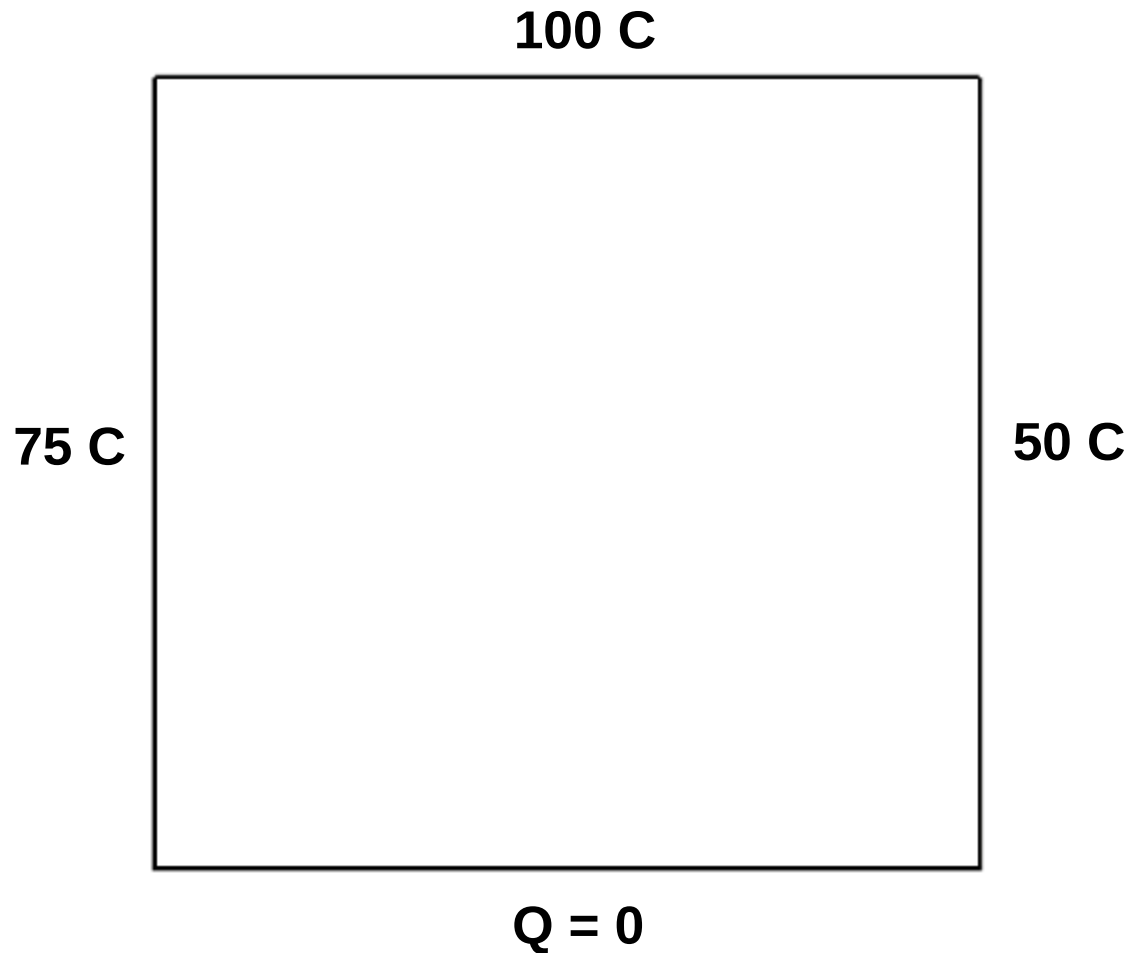
$$\frac{\partial T}{\partial y} \approx \frac{T_{i,1} - T_{i,(0-1)}}{2 \Delta y} \Rightarrow T_{i,(0-1)} \approx T_{i,1} - 2 \Delta y \frac{\partial T}{\partial y}$$

y reemplazando para esta línea:

$$T_{i-1,j} + 0 T_{i,(0-1)} - 2(1 + \beta^2) T_{i,j} + T_{i+1,j} + 2 \beta^2 T_{i,j+1} = 0$$

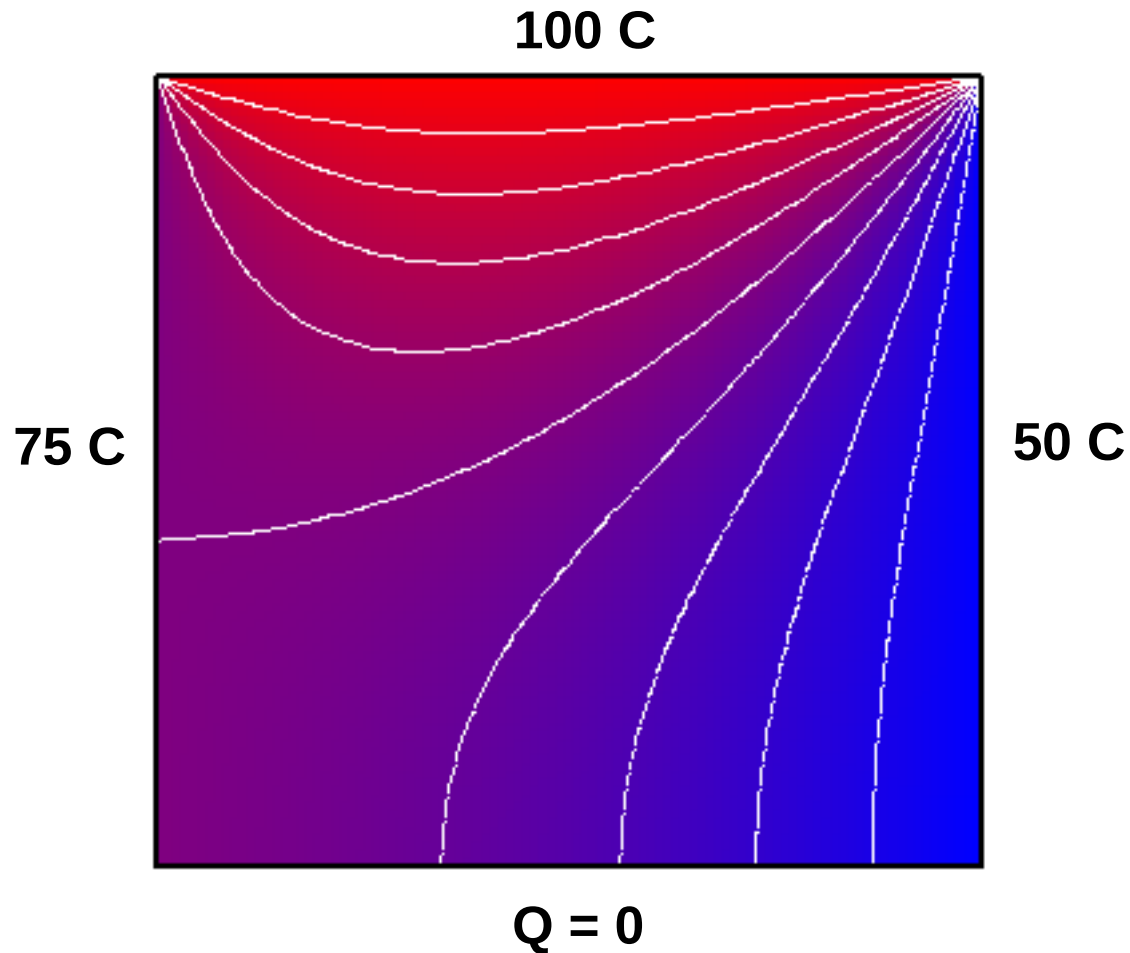
Ec. de Laplace, ejemplo

Entonces, queríamos resolver el siguiente problema

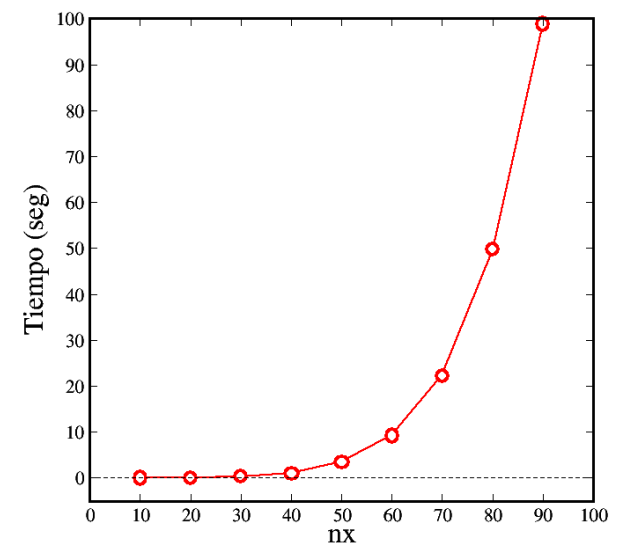
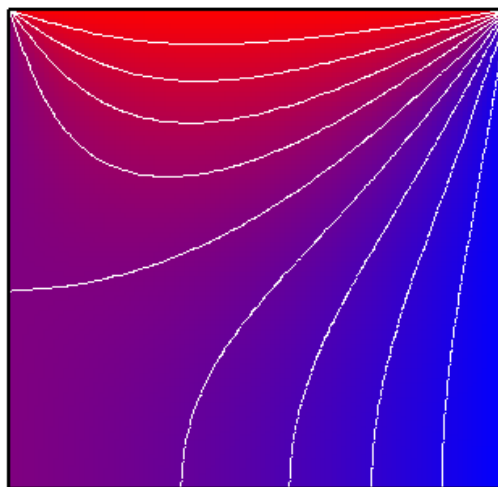
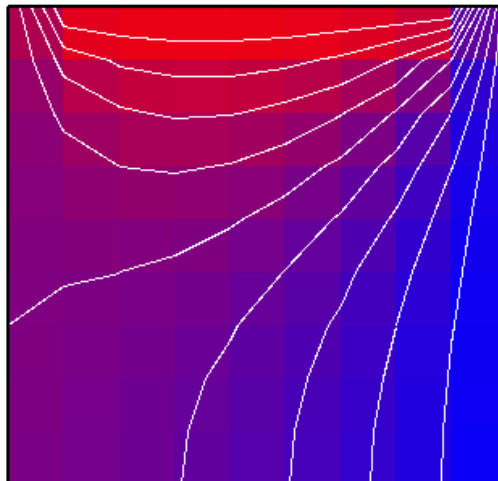
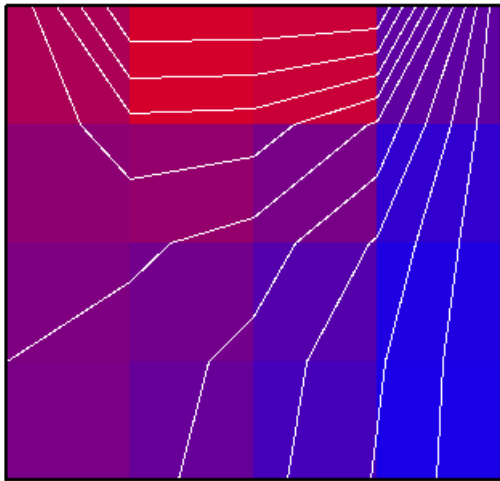


Ec. de Laplace, ejemplo

Resultado posible y curvas de nivel:

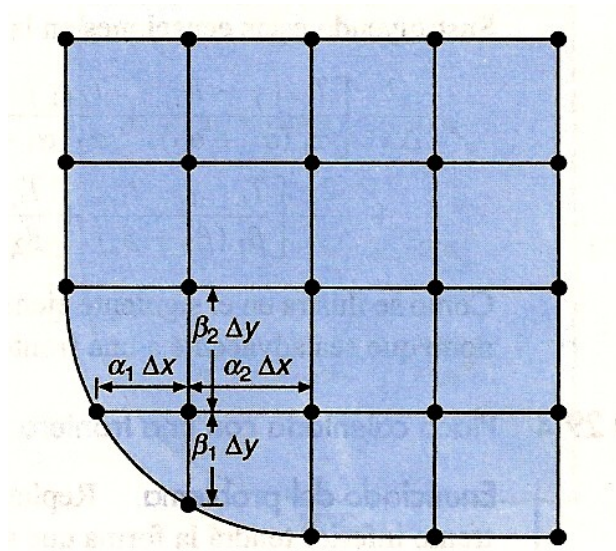


Ec. de Laplace, ejemplo



Ec. de Laplace, fronteras irregulares

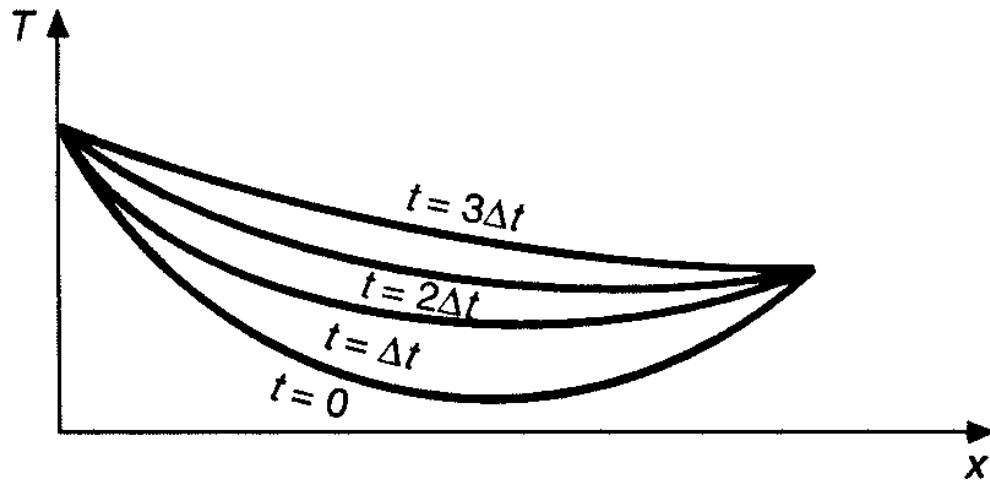
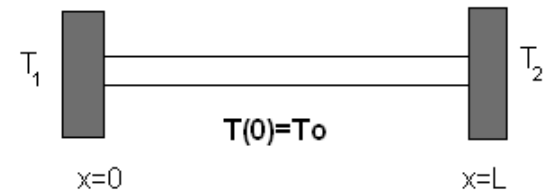
¿Qué pasa si las fronteras no son regulares?



Ecuaciones parabólicas

Supongamos ahora que queremos estudiar la evolución de la temperatura en una varilla
(no el problema estacionario como hicimos antes).

Sería el problema de la clase de EDO, pero con una condición inicial para la temperatura de la varilla



Ecuaciones parabólicas

Tendremos que considerar la cantidad de calor que se almacena/pierde en un cierto tiempo Δt

$$q(x) \Delta y \Delta z \Delta t - q(x + \Delta x) \Delta y \Delta z \Delta t = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \rho C \Delta T$$

Reordenando y dividiendo por $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$

$$\frac{[q(x) - q(x + \Delta x)]}{\Delta x} = \rho C \frac{\Delta T}{\Delta t}$$

$$\Rightarrow -\frac{\partial q}{\partial x} = \rho C \frac{\partial T}{\partial t}$$

Sustituyendo con la ley de Fourier

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

Ecuaciones parabólicas: diferencias finitas

Volvamos a pensar en diferencias finitas

Notar que ahora el eje de los tiempos no está acotado!!

Si llamamos $T(x_i, t_l) = T_i^l$

Podemos escribir como antes $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2}$

Pero para la derivada temporal tenemos: $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$

Reemplazando $k \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$

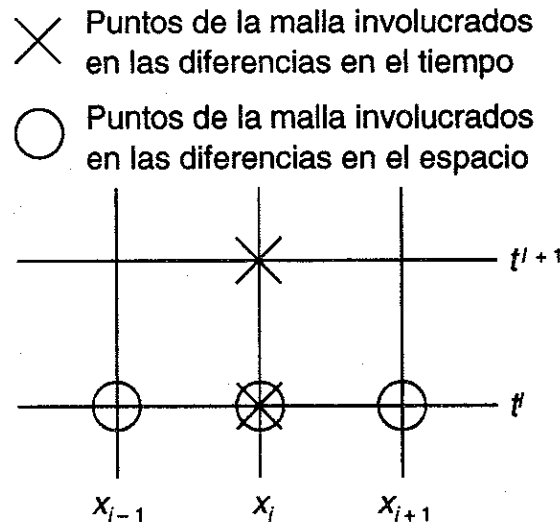
$$\Rightarrow T_i^{l+1} = T_i^l + \lambda (T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l) \quad \text{con } \lambda = k\Delta t / (\Delta x)^2$$

Ecuaciones parabólicas, método explícito

Método **explícito**: con las temperaturas a t saco las correspondientes a $(t+\Delta t)$

$$T_i^{l+1} = T_i^l + \lambda (T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l) \quad \text{con } \lambda = k\Delta t / (\Delta x)^2$$

Esquemáticamente esto se representa como:



Ecuaciones parabólicas, método explícito

¿Cómo ver si lo que hago está bien?

Debo analizar:

- **Convergencia**: Cuando Δt y Δx tienden a cero los resultados se aproximan a la solución verdadera
- **Estabilidad**: Los errores no son amplificados o atenuados a medida que el cálculo avanza.

Se puede demostrar que el método explícito es **convergente**, pero es **estable** sólo si $\lambda \leq 1/2$,
 $\lambda \leq 1/4$ (errores no oscilan)
 $\lambda \leq 1/6$ (errors se minimizan)

Ecuaciones parabólicas, método explícito

La falta de estabilidad es un problema!!

Supongamos que quiero mejorar el cálculo tomando $\Delta x/2$

Para mantener el mismo error debo tomar $\Delta t/4$

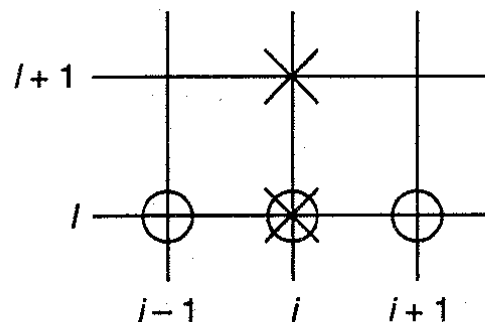
El cálculo total será **8 veces más caro!!**

Ecuaciones parabólicas, método implícito

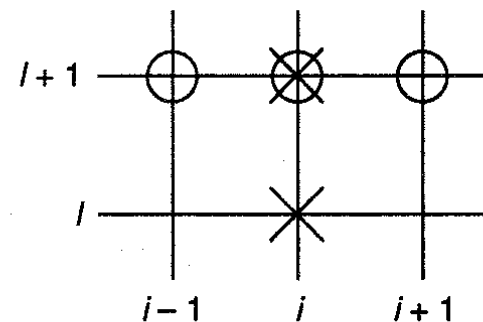
Es una alternativa para resolver el problema de falta de estabilidad del método explícito.

La idea es aproximar mejor la derivada espacial a tiempo $t + \Delta t$

- ✕ Puntos de la malla involucrados en las diferencias en el tiempo
○ Puntos de la malla involucrados en las diferencias en el espacio



a) Explícito



b) Implícito

Ecuaciones parabólicas, método implícito

O sea para la parte espacial tendré: $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2}$

Para la derivada temporal tendremos: $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$

Reemplazando $k \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$

$$\Rightarrow -\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = T_i^l \quad \text{con } \lambda = k\Delta t / (\Delta x)^2$$

Debo resolver un **sistema de ecuaciones** donde el término independiente son las temperaturas a un tiempo anterior!!

Ecuaciones parabólicas, Crank-Nicolson

El método implícito es estable y convergente, aunque debe resolver un sistema de ecuaciones y es por lo tanto más costoso.

Tiene un inconveniente y es que la derivada temporal es exacta sólo a **primer orden** mientras que la espacial lo es a **segundo orden**.

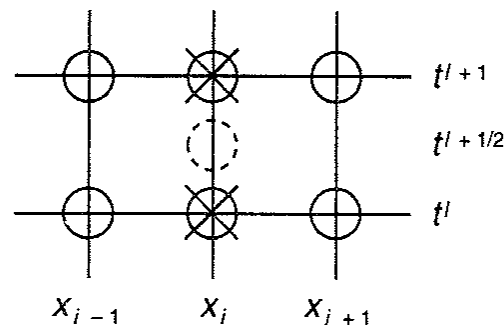
La solución es el método de **Crank-Nicolson**

La idea es desarrollar las aproximaciones alrededor del punto medio de la grilla de tiempos.

Ecuaciones parabólicas, Crank-Nicolson

Esquemáticamente será

- ✕ Puntos de la malla involucrados en las diferencias en el tiempo
- Puntos de la malla involucrados en las diferencias en el espacio



Es exacto a segundo orden tanto en la escala de tiempos como de posiciones

Ecuaciones parabólicas, Crank-Nicolson

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\Delta x^2} \right)$$

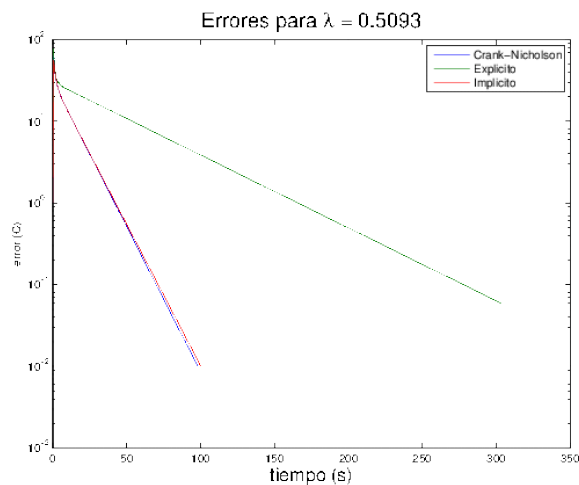
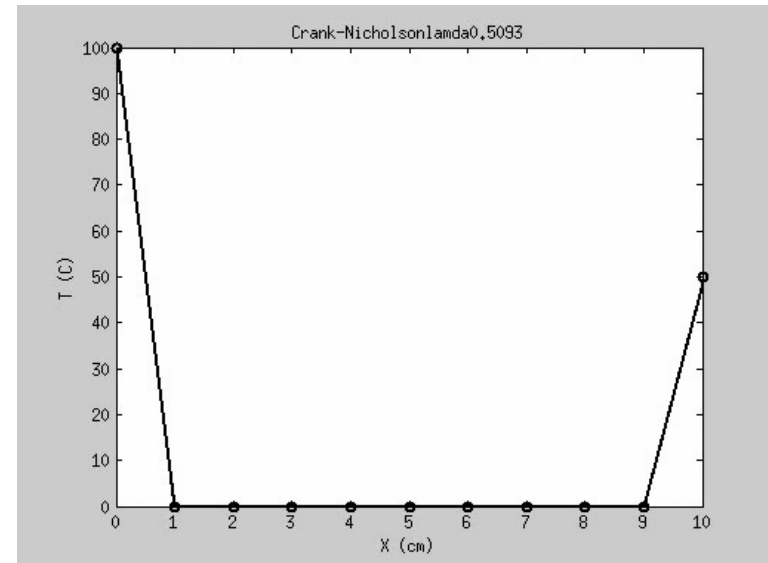
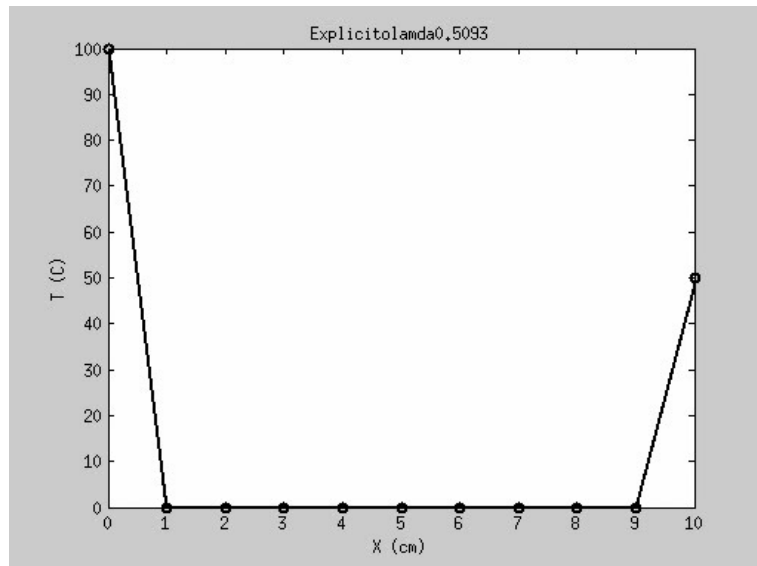
Sustituyendo

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + 2(1+\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = \lambda T_{i-1}^l + 2(1-\lambda)T_i^l + \lambda T_{i+1}^l$$

con $\lambda = k\Delta t / (\Delta x)^2$

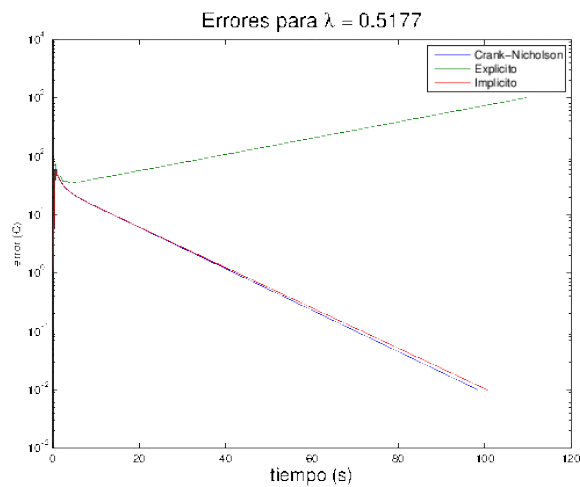
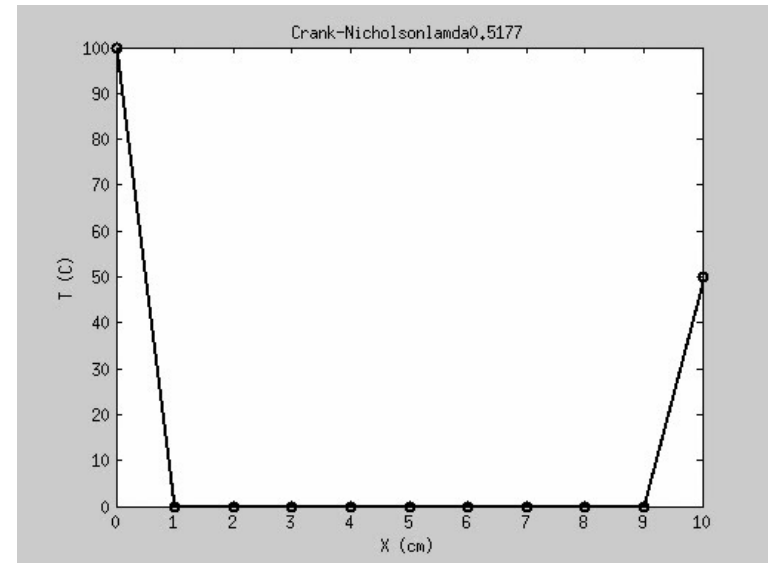
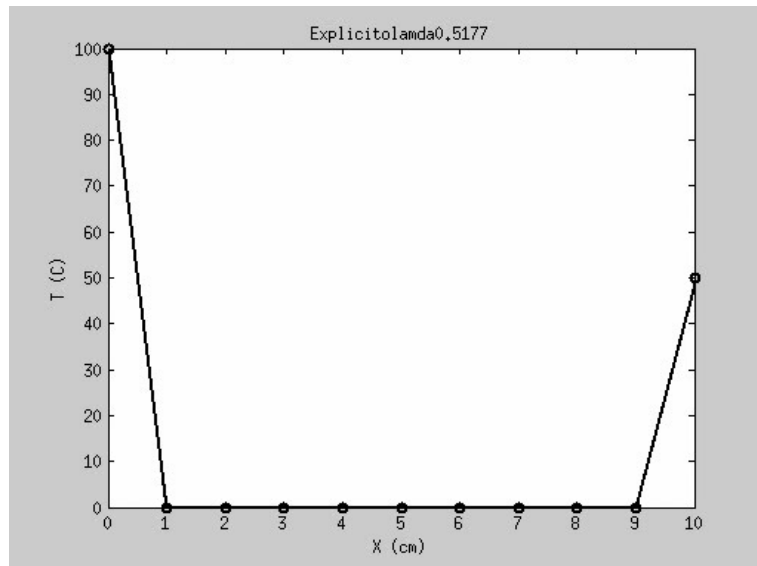
Como se ve, el método no requiere más esfuerzo que el método implícito simple, pero es más preciso y estable

Ecuaciones parabólicas, comparación



$$\lambda = 0.5093$$

Ecuaciones parabólicas, comparación



$$\lambda = 0.5177$$

Ecuaciones parabólicas, convergencia por flujo

