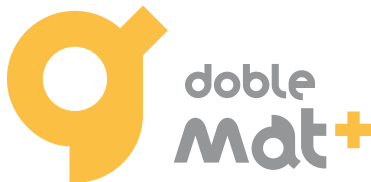


Tema 5: Resolución numérica de EDPs parabólicas

Resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales

Alicia Cordero, Juan R. Torregrosa



- ➊ Problemas de contorno parabólicos
- ➋ Diferencias finitas
- ➌ Método explícito
 - Convergencia y Estabilidad
- ➍ Método implícito
 - Convergencia y Estabilidad
- ➎ Método de Crank-Nicolson
 - Convergencia y Estabilidad
- ➏ Casos especiales
 - Ecuación parabólica multidimensional
 - Ecuación parabólica en coordenadas polares
 - Ecuación parabólica en coordenadas cilíndricas y esféricas
 - Ecuaciones de convección-difusión
- ➐ Referencias

Distribución de temperatura en un cuerpo isotrópico, es decir, en el que la conductividad térmica en cada punto es independiente de la dirección del flujo de calor, $u = u(x, y, z, t)$.

Problema modelizado por la ecuación parabólica

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(h \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(h \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(h \frac{\partial u}{\partial z} \right) = cg \frac{\partial u}{\partial t},$$

donde f , g y c son funciones de x , y y z .

- $h(x, y, z)$ denota la conductividad térmica en (x, y, z) ,
- $g(x, y, z)$ es la densidad del cuerpo en (x, y, z) ,
- $c(x, y, z)$ calor específico

Una ecuación parabólica con condiciones iniciales ($t = 0$) y de contorno recibe el nombre de **Problema Parabólico**.

El problema concreto en el que vamos a iniciar el estudio numérico es

Distribución de temperatura en una varilla de longitud L

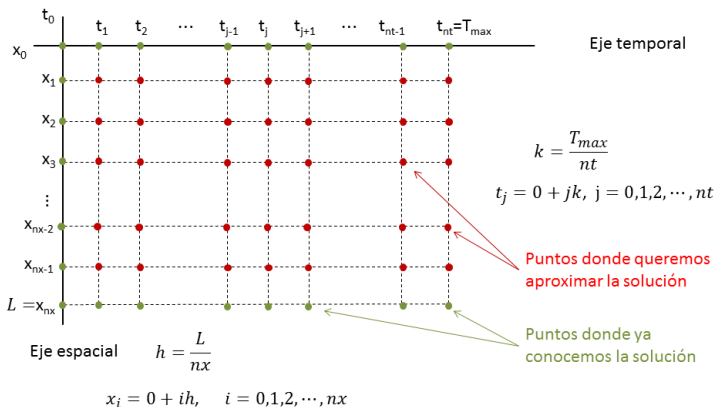
$$u_t = c^2 u_{xx}, \quad 0 \leq x \leq L, t \geq 0,$$

Condiciones de contorno $u(0, t) = \varphi(t)$, $u(L, t) = \phi(t)$, $t > 0$,

Condición inicial $u(x, 0) = f(x)$, $x \in [0, L]$.

Problemas parabólicos

La solución numérica de estos problemas consiste en transformarlos, mediante **diferencias finitas**, en **sistemas de ecuaciones** lineales o no lineales, cuyas incógnitas son valores aproximados de la solución en los puntos elegidos en el dominio espacial y temporal.



Discretización

Proceso por el que cualquier **ecuación en derivadas parciales** se convierte en una **ecuación en diferencias**. Éstas suelen ser sistemas lineales o no lineales.

Los métodos en diferencias finitas suelen ser de dos tipos:

- Métodos explícitos
 - Sencillos y fáciles de implementar
 - Inestables
 - Requieren condiciones de convergencia
- Métodos implícitos
 - Más complejos
 - Estables
 - Sin condiciones de convergencia

Cuando trabajamos en un dominio regular (en general, rectángulo, cubo, ...) los resultados proporcionados por los métodos en diferencias finitas son satisfactorios.

$$u_t(x, t) = c^2 u_{xx}(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, t \geq 0,$$

$$u(0, t) = \varphi(t), \quad u(L, t) = \phi(t), t > 0; \quad u(x, 0) = f(x), x \in [0, L]$$

Diferencias progresivas en u_t y centrales en u_{xx}

- Transformación del problema

$$\frac{u(x, t+k) - u(x, t)}{k} = c^2 \frac{u(x+h, t) - 2u(x, t) + u(x-h, t)}{h^2},$$

- Discretización del problema Evaluando la expresión anterior en los puntos (x_i, t_j) , $i = 1, 2, \dots, nx - 1$, $j = 0, 1, \dots, nt - 1$, $u(x_i, t_j) = u_{i,j}$

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}, \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 0, 1, \dots, nt - 1.$$

Llamando $\lambda = \frac{kc^2}{h^2}$ y despejando las incógnitas del instante mayor

$$u_{i,j+1} = (1 - 2\lambda)u_{i,j} + \lambda(u_{i+1,j} + u_{i-1,j}), \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 0, 1, \dots, nt - 1.$$

Para $j = 0$

$$u_{i,1} = (1 - 2\lambda)u_{i,0} + \lambda(u_{i+1,0} + u_{i-1,0}), \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1,$$

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ \vdots \\ u_{nx-1,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2\lambda & \lambda & \cdots & 0 \\ \lambda & 1 - 2\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 - 2\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ u_{2,0} \\ \vdots \\ u_{nx-1,0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varphi(0) \\ 0 \\ \vdots \\ \phi(0) \end{pmatrix}$$

Para $j = 1$

$$u_{i,2} = (1 - 2\lambda)u_{i,1} + \lambda(u_{i+1,1} + u_{i-1,1}), \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1,$$

$$\begin{pmatrix} u_{1,2} \\ u_{2,2} \\ \vdots \\ u_{nx-1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2\lambda & \lambda & \cdots & 0 \\ \lambda & 1 - 2\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 - 2\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,1} \\ u_{2,1} \\ \vdots \\ u_{nx-1,1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varphi(t_1) \\ 0 \\ \vdots \\ \phi(t_1) \end{pmatrix}$$

En general:

$$u^{(j+1)} = Au^{(j)} + d_j, \quad j = 0, 1, \dots, nt - 1,$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} 1-2\lambda & \lambda & \cdots & 0 \\ \lambda & 1-2\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1-2\lambda \end{pmatrix}, \quad u^{(j)} = \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{nx-1,j} \end{pmatrix}, \quad u^{(0)} = \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ u_{2,0} \\ \vdots \\ u_{nx-1,0} \end{pmatrix}$$

Método explícito ya que calculamos la solución en el instante t_{j+1} a partir de la solución en el instante t_j , directamente, sin resolver ningún sistema

CARACTERISTICAS: El orden de convergencia es $O(k) + O(h^2)$,

A priori, no sabemos si la convergencia está garantizada.

$U(x, t)$ solución exacta de la EDP y $u_{i,j}$ solución exacta de la ecuación en diferencias finitas $F(u_{i,j}) = 0$.

El esquema en diferencias finitas se dice que es **convergente** si

$$u_{i,j} \rightarrow U(x_i, t_j), \quad \text{cuando } h, k \rightarrow 0.$$

La diferencia

$$e_{i,j} = U_{i,j} - u_{i,j} = U(x_i, t_j) - u_{i,j},$$

recibe el nombre de **error de truncamiento o de discretización**.

En general, este error se minimiza a medida que los pasos h y k disminuyen. Sin embargo, no sólo depende de h y de k si no también en el número de términos en el truncamiento de la serie de Taylor.

Si la solución exacta del esquema en diferencias $u_{i,j}$ es reemplazada por $U_{i,j}$ en los puntos $P_{i,j}$, entonces el valor $F(U_{i,j})$ se llama error de truncamiento local en $P_{i,j}$.

El esquema en diferencias finitas se dice que es **consistente** si

$$F(U_{i,j}) \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad h, k \rightarrow 0.$$

No debemos olvidar el **error de redondeo**, que depende del tipo de ordenador. En la práctica, la solución computada es $u_{i,j}^*$ no $u_{i,j}$. El error de redondeo en el punto $P_{i,j}$ es

$$r_{i,j} = u_{i,j} - u_{i,j}^*.$$

Este error no se reduce cuando los pasos espacial y temporal tienden a cero, más bien se produce el efecto contrario.

El **error total** que aparece en un esquema en diferencias finitas en $P_{i,j}$ es

$$U_{i,j} - u_{i,j}^* = (U_{i,j} - u_{i,j}) + (u_{i,j} - u_{i,j}^*) = e_{i,j} + r_{i,j}.$$

Usualmente, el error de discretización $e_{i,j}$ está acotado cuando $u_{i,j}$ está acotada, ya que $U_{i,j}$ es fija para una EDP dada. Este hecho es asumido para introducir el concepto de estabilidad.

El esquema en diferencias finitas se dice que es **estable** si el error de redondeo es suficientemente pequeño para todo i, j tendiendo a $+\infty$, es decir, el crecimiento de $r_{i,j}$ está acotado.

Lax en 1954 estableció la siguiente relación entre estos conceptos.

Teorema de Lax

Dado un problema contorno-inicial modelizado por una EDP lineal y su correspondiente aproximación en diferencias finitas que satisfaga el criterio de consistencia, entonces **estabilidad y convergencia son equivalentes**.

Convergencia del método explícito

$$u_t(x, t) = c^2 u_{xx}(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, t \geq 0,$$

$$u(0, t) = \varphi(t), \quad u(L, t) = \phi(t), t > 0; \quad u(x, 0) = f(x), x \in [0, L]$$

El **método explícito** nos lleva al esquema en diferencias finitas

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}. \quad (1)$$

Para cada punto del mallado:

$$u_{i,j} = U_{i,j} - e_{i,j}, \quad u_{i,j+1} = U_{i,j+1} - e_{i,j+1}, \dots$$

Sustituyendo en (1)

$$\begin{aligned} e_{i,j+1} &= \lambda e_{i-1,j} + (1 - 2\lambda)e_{i,j} + \lambda e_{i+1,j} \\ &\quad + U_{i,j+1} - U_{i,j} + \lambda(2U_{i,j} - U_{i-1,j} - U_{i+1,j}), \end{aligned} \quad (2)$$

donde $\lambda = \frac{c^2 k}{h^2}$, que recibe el nombre de **parámetro de Courant**.

Desarrollamos por Taylor cada uno de los términos $U_{i,j}$ que aparecen en la expresión:

$$\begin{aligned}U_{i+1,j} &= U(x_i + h, t_j) = U_{i,j} + h (U_x)_{i,j} + \frac{h^2}{2} U_{xx}(x_i + \theta_1 h, t_j), \\U_{i-1,j} &= U(x_i - h, t_j) = U_{i,j} - h (U_x)_{i,j} + \frac{h^2}{2} U_{xx}(x_i - \theta_2 h, t_j), \\U_{i,j+1} &= U(x_i, t_j + k) = U_{i,j} + k U_t(x_i, t_j + \theta_3 k),\end{aligned}$$

donde $\theta_1, \theta_2, \theta_3 \in]-1, 1[$. Sustituyendo estos desarrollos en (2)

$$\begin{aligned}e_{i,j+1} &= \lambda e_{i-1,j} + (1 - 2\lambda) e_{i,j} + \lambda e_{i+1,j} \\&\quad + k [U_t(x_i, t_j + \theta_3 k) - c^2 U_{xx}(x_i + \theta_4 h, t_j)],\end{aligned}\tag{3}$$

donde $\theta_4 \in]-1, 1[$. Esta es la llamada **ecuación en diferencias para $e_{i,j}$** .

Sea E_j el valor máximo de $|e_{i,j}|$ a lo largo del instante t_j y M el máximo módulo de la expresión [], para todo i y j .

Cuando $\lambda \leq \frac{1}{2}$, todos los coeficientes de $e_{i,j}$ en (3) son no negativos, por tanto

$$\begin{aligned}|e_{i,j+1}| &\leq \lambda|e_{i-1,j}| + (1-2\lambda)|e_{i,j}| + \lambda|e_{i+1,j}| + kM \\ &\leq \lambda E_j + (1-2\lambda)E_j + \lambda E_j + kM = E_j + kM.\end{aligned}$$

Como esto es cierto para un índice i arbitrario, también será cierto para $\max_i |e_{i,j+1}|$, luego

$$E_{j+1} \leq E_j + kM \leq (E_{j-1} + kM) + kM = E_{j-1} + 2kM,$$

de donde se sigue que

$$E_{j+1} \leq E_0 + jkM = t_{j+1}M, \quad \text{ya que } E_0 = 0.$$

Cuando $h \rightarrow 0$, entonces $k = \frac{\lambda h^2}{c^2} \rightarrow 0$, y M tiende a

$$(U_t - c^2 U_{xx})_{i,j}.$$

Como U es la solución de la EDP, entonces E_j tiende a cero. Además,

$$|U_{i,j} - u_{i,j}| \leq E_j,$$

lo que nos permite afirmar que u converge a U cuando h tiende a cero y t es un valor finito, siempre y cuando $\lambda \leq 1/2$.

Error de truncamiento del método explícito

$$u_t(x, t) = c^2 u_{xx}(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, t \geq 0,$$

$$u(0, t) = \varphi(t), \quad u(L, t) = \phi(t), t > 0; \quad u(x, 0) = f(x), x \in [0, L]$$

Vamos a calcular el error de truncamiento en el punto $P(ih, jk)$. Como sabemos, las ecuaciones en diferencias finitas son

$$F_{i,j}(u) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} = 0, \quad (4)$$

por tanto

$$T_{i,j} = F_{i,j}(U) = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - c^2 \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}.$$

Desarrollando por Taylor

$$\begin{aligned} U_{i+1,j} &= U(x_i + h, t_j) \\ &= U_{i,j} + h(U_x)_{i,j} + \frac{h^2}{2}(U_{xx})_{i,j} + \frac{h^3}{6}(U_{xxx})_{i,j} + \cdots \end{aligned}$$

Haciendo lo mismo con los demás términos y sustituyendo en $T_{i,j}$, resulta

$$\begin{aligned}T_{i,j} &= (U_t - c^2 U_{xx})_{i,j} + \frac{k}{2}(U_{tt})_{i,j} - \frac{h^2}{12}(U_{xxxx})_{i,j} \\ &\quad + \frac{k^2}{6}(U_{ttt})_{i,j} - \frac{h^4}{360}(U_{xxxxxx})_{i,j} + \cdots\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que el primer sumando es nulo, la parte principal de este error de truncamiento es

$$\left(\frac{k}{2}U_{tt} - \frac{h^2}{12}U_{xxxx} \right)_{i,j},$$

por lo que

$$T_{i,j} = O(k) + O(h^2).$$

El esquema en diferencias para las ecuaciones parabólicas podemos expresarlo de la forma:

$$\begin{aligned}
 & \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nx-2,nx-2} & a_{nx-2,nx-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nx-1,nx-2} & a_{nx-1,nx-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ u_{3,j+1} \\ \vdots \\ u_{nx-2,j+1} \\ u_{nx-1,j+1} \end{pmatrix} = \\
 & = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_{32} & b_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{nx-2,nx-2} & b_{nx-2,nx-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{nx-1,nx-2} & b_{nx-1,nx-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ u_{3,j} \\ \vdots \\ u_{nx-2,j} \\ u_{nx-1,j} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ d_{nx-1} \end{pmatrix},
 \end{aligned}$$

es decir, $Au^{(j+1)} = Bu^{(j)} + d_j$ que podemos expresar como $u^{(j+1)} = Cu^{(j)} + f_j$.

Aplicando el esquema recursivamente:

$$\begin{aligned}
 u^{(j)} &= Cu^{(j-1)} + f_{j-1} = C(Cu^{(j-2)} + f_{j-2}) + f_{j-1} \\
 &= C^2u^{(j-2)} + Cf_{j-2} + f_{j-1} \\
 &\vdots \\
 &= C^ju^{(0)} + C^{j-1}f_0 + C^{j-2}f_1 + \cdots + Cf_{j-2} + f_{j-1},
 \end{aligned}$$

donde $u^{(0)}$ es la condición inicial y los vectores f_0, f_1, \dots, f_{j-1} son conocidos.

Perturbamos la condición inicial $u^{(0)}$ a $u^{*(0)}$. La solución en el instante t_j será

$$u^{*(j)} = C^ju^{*(0)} + C^{j-1}f_0 + C^{j-2}f_1 + \cdots + f_{j-1}.$$

Si definimos el **error de perturbación** como $e = u^* - u$, resulta

$$e_j = u^{*(j)} - u^{(j)} = C^j(u^{*(0)} - u^{(0)}) = C^je_0, \quad j = 1, 2, \dots, nt,$$

es decir, una perturbación e_0 en los valores iniciales se propaga de acuerdo a la ecuación

$$e_j = Ce_{j-1} = C^2e_{j-2} = \cdots = C^je_0, \quad j = 1, 2, \dots, nt$$

y, por tanto,

$$\|e_j\| \leq \|C^j\| \|e_0\|.$$

Lax y Richtmyer definieron un **esquema en diferencias estable**, cuando existe una constante positiva M , independiente de j , h y k tal que

$$\|C^j\| \leq M, \quad j = 1, 2, \dots, nt.$$

Como $\|C^j\| \leq \|C\|^j$ se sigue que la definición de estabilidad de Lax y Richtmyer se satisface para $\|C\| \leq 1$.

$\|C\| \leq 1$ es una **condición necesaria y suficiente** para que el esquema en diferencias sea estable cuando la solución de la EDP no crece al crecer el tiempo, $t \rightarrow +\infty$

El esquema en diferencias finitas es en este caso

$$u_{i,j+1} = \lambda u_{i-1,j} + (1 - 2\lambda)u_{i,j} + \lambda u_{i+1,j}, \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1,$$

por lo que la matriz C es

$$C = \begin{pmatrix} 1 - 2\lambda & \lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \lambda & 1 - 2\lambda & \lambda & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 - 2\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 - 2\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda & 1 - 2\lambda \end{pmatrix},$$

donde $\lambda = c^2 k / h^2$. Observemos que $\|C\|_\infty = \lambda + (1 - 2\lambda) + \lambda = 1$. Cuando $\lambda > 1/2$ resulta $\|C\|_\infty > 1$. Por tanto, el esquema es estable para $0 < \lambda \leq 1/2$.

A modo de resumen podemos constatar:

El método explícito para las EDPs parabólicas genera un esquema en diferencias finitas consistente y

- Es estable cuando $\lambda \leq \frac{1}{2}$, los errores no crecen pero, en algunos casos oscilan. Además,
 - Si $\lambda \leq \frac{1}{4}$, la solución no oscila.
 - Si $\lambda = \frac{1}{6}$, se tiende a minimizar los errores de truncamiento, pero el coste computacional puede no ser asumible.
- Cuando el método es estable, el error es de orden $O(k) + O(h^2)$.
- Si $\lambda > \frac{1}{2}$ el esquema en diferencias finitas es inestable, el proceso puede no converger.

Ejemplo

$$\begin{aligned}u_t(x,t) - u_{xx}(x,t) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \\u(0,t) = u(1,t) &= 0, \quad t > 0; \quad u(x,0) = \sin \pi x, \quad x \in [0,1]\end{aligned}$$

Solución exacta: $u(x,t) = e^{-\pi^2 t} \sin \pi x$

Buscamos la solución aproximada en $T_{max} = 0,5$ mediante el método explícito con:

(a) $h = 0,1$, $k = 0,0005$

(b) $h = 0,1$, $k = 0,01$.

x_i	$u_{i,1000}$	$ u(x_i, 0,5) - u_{i,1000} $	$u_{i,50}$	$ u(x_i, 0,5) - u_{i,50} $
0.0	0	-	-	-
0.1	0.002287	6.41e-5	8.20e+7	8.20e+7
0.2	0.004349	1.22e-4	-1.56e+8	1.56e+8
0.3	0.005986	1.68e-4	2.14e+8	2.14e+8
0.4	0.007037	1.97e-4	-2.51e+8	2.51e+8
0.5	0.007399	2.08e-4	2.63e+8	2.63e+8
0.6	0.007037	1.97e-4	-2.49e+8	2.49e+8
0.7	0.005986	1.68e-4	2.11e+8	2.11e+8
0.8	0.004349	1.22e-4	-1.53e+8	1.53e+8
0.9	0.002287	6.51e-5	8.04e+7	8.04e+7
1.0	0	-	0	-

$$u_t(x, t) = c^2 u_{xx}(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0,$$

$$u(0, t) = \varphi(t), \quad u(L, t) = \phi(t), \quad t > 0; \quad u(x, 0) = f(x), \quad x \in [0, L]$$

Diferencias regresivas en u_t y centrales en u_{xx}

- Transformación del problema

$$\frac{u(x, t) - u(x, t - k)}{k} = c^2 \frac{u(x + h, t) - 2u(x, t) + u(x - h, t)}{h^2},$$

- Discretización del problema Evaluando la expresión anterior en los puntos (x_i, t_j) , $i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 1, \dots, nt$,

$$\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{k} = c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}, \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 1, 2, \dots, nt.$$

Llamando $\lambda = \frac{kc^2}{h^2}$ y llevando a la izquierda las incógnitas del instante mayor

$$(1 + 2\lambda)u_{i,j} - \lambda u_{i+1,j} - \lambda u_{i-1,j} = u_{i,j-1}, \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 1, 2, \dots, nt.$$

Para encontrar la solución en el instante t_j debemos resolver un sistema lineal

$$Au^{(j)} = u^{(j-1)} + d_j, \quad j = 1, 2, \dots, nt,$$

donde los términos independientes son la solución en el instante anterior,

$$d_j = (\lambda\varphi(t_j), 0, \dots, 0, \lambda\phi(t_j))^T$$

y la matriz de coeficientes es

$$A = \begin{pmatrix} 1+2\lambda & -\lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 1+2\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1+2\lambda & -\lambda \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda & 1+2\lambda \end{pmatrix}, \quad u^{(j)} = \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{nx-1,j} \end{pmatrix}.$$

CARACTERÍSTICAS: El proceso no necesita condiciones de convergencia, ya que es sencillo demostrar que $\|A^{-1}\| \leq 1$.

El error de truncamiento es de orden $O(k) + O(h^2)$.

Estabilidad

De la expresión matricial se deduce:

$$\|A\|_{\infty} = \max\{|1 + 2\lambda| + |\lambda|, |1 + 2\lambda| + 2|\lambda|\} = 1 + 4\lambda \geq 1, \quad \lambda > 0,$$

luego $\|A^{-1}\|_{\infty} \leq 1$ y el método es incondicionalmente estable.

Consistencia

Calculamos el error de truncamiento:

$$F_{i,j}(u) = (1 + 2\lambda)u_{i,j} - \lambda u_{i+1,j} - \lambda u_{i-1,j} - u_{i,j-1} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 1, 2, \dots, nt,$$

luego $T_{i,j} = F_{i,j}(U)$ y, desarrollando por Taylor cada sumando:

$$\begin{aligned} T_{i,j} &= k (U_t - c^2 U_{xx})_{i,j} - k \left(\frac{k}{2} U_{tt} + c^2 \frac{h^2}{12} U_{xxxx} \right)_{i,j} + \dots \\ &= O(k + h^2). \end{aligned}$$

Algoritmo del método implícito

- **ENTRADA** funciones que describen las condiciones de contorno $CC1$, $CC2$, y la condición inicial CI ; extremo L ; constante c ; números naturales nx y nt ; tiempo máximo T .
- **SALIDA** matriz de aproximaciones $U_{i,j}$ de $u(x_i, t_j)$ para $i = 1, 2, \dots, nx - 1$, $j = 1, 2, \dots, nt$.
- **Paso 1** Tomamos, $h = \frac{L}{nx}$; $k = \frac{T}{nt}$; $\lambda = \frac{c^2 k}{h^2}$.
- **Paso 2** Para $i = 0, 1, \dots, nx$ tomar $U_{i,0} = CI(ih)$ (Condición inicial).
- **Paso 3** Para $j = 0, 1, \dots, nt$ tomar $U_{0,j} = CC1(jk)$, $U_{nx+1,j} = CC2(jk)$.
- **Paso 4** Para $j = 1, 2, \dots, nt$ hacer los pasos 5 - 7:
 - **Paso 5** Tomar $t = jk$.
 - **Paso 6** Resolver el sistema tridiagonal $Az = u^{j-1}$.
 - **Paso 7** Para $i = 1, 2, \dots, nx - 1$ tomar $U_{i,j} = z_i$.
- **Paso 8** Parar. SALIDA x, t, U

¿ Cómo resolvemos estos nt sistema lineales? Con el algoritmo de Crout

Ejemplo

$$\begin{aligned}u_t(x, t) - u_{xx}(x, t) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \\u(0, t) = u(1, t) &= 0, \quad t > 0; \quad u(x, 0) = \sin \pi x, \quad x \in [0, 1]\end{aligned}$$

Solución exacta: $u(x, t) = e^{-\pi^2 t} \sin \pi x$

Buscamos la solución aproximada en $T_{max} = 0,5$ mediante el método implícito con:
(a) $h = 0,1$, $k = 0,01$.

x_i	$u_{i,50}$	$u(x_i, 0,5)$	$ u(x_i, 0,5) - u_{i,50} $
0.0	0	0	-
0.1	0.002898	0.002222	6.76e-4
0.2	0.005512	0.004227	1.29e-3
0.3	0.007587	0.005818	1.77e-3
0.4	0.008919	0.006840	2.10e-3
0.5	0.009378	0.007192	2.19e-3
0.6	0.008919	0.006840	2.10e-3
0.7	0.007587	0.005818	1.77e-3
0.8	0.005512	0.004227	1.29e-3
0.9	0.002898	0.002222	6.76e-4
1.0	0	0	-

$$u_t(x, t) = c^2 u_{xx}(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0,$$

$$u(0, t) = \varphi(t), \quad u(L, t) = \phi(t), \quad t > 0; \quad u(x, 0) = f(x), \quad x \in [0, L]$$

¿Cómo aumentar el orden de convergencia de un método implícito?

u_t → Diferencia central

u_{xx} → Diferencia central

Se obtiene

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2k} - c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

Orden $O(k^2 + h^2)$, pero:

- El instante t_{j+1} está en función de t_j y de t_{j-1}
- Importantes problemas de estabilidad

$$u_t(x, t) = c^2 u_{xx}(x, t), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0,$$

$$u(0, t) = \varphi(t), \quad u(L, t) = \phi(t), \quad t > 0; \quad u(x, 0) = f(x), \quad x \in [0, L]$$

El **método de Crank-Nicolson** es un método en diferencias implícito que se obtiene al hacer la **media aritmética** entre el método de diferencia progresiva en el instante t_j

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} = 0$$

y el método de diferencia regresiva en el instante t_{j+1}

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - c^2 \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2} = 0$$

obteniendo la expresión en diferencias

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - \frac{c^2}{2} \left[\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2} \right] = 0$$

para $i = 1, 2, \dots, nx - 1$ y $j = 0, 1, \dots, nt - 1$

Llamando $\lambda = \frac{kc^2}{h^2}$ y llevando las variables correspondientes a instantes más altos a la izquierda, obtenemos el método implícito

$$(1 + \lambda)u_{i,j+1} - \frac{\lambda}{2}(u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j+1}) = (1 - \lambda)u_{i,j} + \frac{\lambda}{2}(u_{i+1,j} + u_{i-1,j})$$

para $i = 1, 2, \dots, nx - 1$ y $j = 0, 1, \dots, nt - 1$

Fijando el índice j y escribiendo todas las ecuaciones para $i = 1, 2, \dots, nx - 1$ obtenemos la expresión matricial del método

$$Au^{(j+1)} = Bu^{(j)} + d_j, \quad j = 0, 1, \dots, nt - 1,$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} 1 + \lambda & -\lambda/2 & 0 & \cdots & 0 \\ -\lambda/2 & 1 + \lambda & -\lambda/2 & \cdots & 0 \\ 0 & -\lambda/2 & 1 + \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\lambda/2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 + \lambda \end{pmatrix}, u^{(j)} = \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{nx-1,j} \end{pmatrix}, u^{(0)} = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{nx-1}) \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 1-\lambda & \lambda/2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \lambda/2 & 1-\lambda & \lambda/2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda/2 & 1-\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1-\lambda & \lambda/2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda/2 & 1-\lambda \end{pmatrix},$$

$$d_j = \left(\frac{\lambda}{2}\varphi(t_{j+1}) + \frac{\lambda}{2}\varphi(t_j), 0, \dots, 0, \frac{\lambda}{2}\phi(t_{j+1}) + \frac{\lambda}{2}\phi(t_j) \right)^T,$$

siendo tanto la matriz A como B tridiagonales.

Para encontrar la solución en el instante t_{j+1} resuelvo el sistema lineal en el que A es la matriz de coeficientes y $Bu^{(j)} + d_j$ los términos independientes.

Las características del método son:

- No necesita condiciones de convergencia
- El orden de convergencia es $O(k^2) + O(h^2)$

La expresión matricial del esquema en diferencias de Crank-Nicolson

$$Au^{(j+1)} = Bu^{(j)} + d_j, \quad j = 0, 1, \dots, nt - 1,$$

se puede expresar en la forma

$$(2I_{nx-1} - \lambda T)u^{(j+1)} = (2I_{nx-1} + \lambda T)u^{(j)} + d_j$$

y, por tanto,

$$C = (2I_{nx-1} - \lambda T)^{-1}(2I_{nx-1} + \lambda T).$$

Si A y B son matrices simétricas, no singulares, tales que $AB = BA$, entonces $A^{-1}B$, AB^{-1} y $A^{-1}B^{-1}$ son simétricas.

Aplicando este resultado concluimos que C es una matriz simétrica. A partir de los valores propios de T podemos afirmar que los valores propios de C son

$$\mu_s = \left(2 + 4\lambda \sin^2 \left(\frac{s\pi}{2nx}\right)\right)^{-1} \left(2 - 4\lambda \sin^2 \left(\frac{s\pi}{2nx}\right)\right).$$

Por tanto,

$$\|C\|_2 = \rho(C) = \max \left| \frac{1 - 2\lambda \sin^2 \left(\frac{s\pi}{2nx} \right)}{1 + 2\lambda \sin^2 \left(\frac{s\pi}{2nx} \right)} \right| < 1,$$

para cualquier valor de $\lambda > 0$, lo que permite afirmar que el **esquema de Crank-Nicolson es incondicionalmente estable**.

También podemos comprobar que su error de truncamiento es de orden $O(k^2) + O(h^2)$.

El esquema en diferencias es

$$F_{i,j}(u) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} - \frac{c^2}{2} \left[\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2} \right],$$

por tanto,

$$T_{i,j} = F_{i,j}(U) = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} - \frac{c^2}{2} [\delta_x^2 U_{i,j} + \delta_x^2 U_{i,j+1}],$$

donde

$$\delta_x^2 U_{i,j} = \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}, \quad \delta_x^2 U_{i,j+1} = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2}.$$

Desarrollando por Taylor

$$\begin{aligned} U_{i+1,j} &= U(x_i + h, t_j) = U_{i,j} + h(U_x)_{i,j} + \frac{h^2}{2}(U_{xx})_{i,j} + \frac{h^3}{6}(U_{xxx})_{i,j} + O(h^4), \\ U_{i-1,j} &= U(x_i - h, t_j) = U_{i,j} - h(U_x)_{i,j} + \frac{h^2}{2}(U_{xx})_{i,j} - \frac{h^3}{6}(U_{xxx})_{i,j} + O(h^4), \end{aligned}$$

luego

$$\delta_x^2 U_{i,j} = h^2(U_{xx})_{i,j} + \frac{1}{12}h^4(U_{xxxx})_{i,j} + O(h^6).$$

Análogamente,

$$\delta_x^2 U_{i,j+1} = \delta_x^2 U_{i,j} + k \frac{\partial}{\partial t} \delta_x^2 U_{i,j} + O(k^2).$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} T_{i,j} &= [U_x - c^2 U_{xx}]_{i,j} + \frac{1}{2} k \frac{\partial}{\partial t} [U_x - c^2 U_{xx}]_{i,j} \\ &\quad - \frac{1}{12} h^2 (U_{xxxx})_{i,j} + O(k^2) + O(h^4) + O(kh^2) \\ &= O(k^2) + O(h^2). \end{aligned}$$

Algoritmo del método de Crank-Nicolson

- ✓ Definir los elementos $h = \frac{L}{nx}$, $k = \frac{T}{nt}$, $\lambda = \frac{\alpha^2 k}{h^2}$
- ✓ Construimos la matriz B de tamaño $nx - 1$:
$$dp = (1 - \lambda)ones(nx - 1, 1)$$
$$dps = (\lambda/2)ones(nx - 2, 1)$$
$$B = diag(dp) + diag(dps, 1) + diag(dps, -1)$$
- ✓ Solución en el instante inicial t_0
$$u^{(0)} = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_{nx-1}))^T$$
- ✓ Construcción de los vectores de la matriz A :
$$a = (1 + \lambda)ones(nx - 1, 1)$$
$$b = (-\lambda/2)ones(nx - 2, 1)$$
$$c = b$$
- ✓ Para $j = 0, 1, 2, \dots, nt - 1$
$$d = Bu^{(j)}$$
$$u^{(j+1)} = Crout(a, b, c, d)$$

↑
aproximación de la solución $u(x, t)$ en los puntos
 $(x_1, t_{j+1}), (x_2, t_{j+1}), \dots, (x_{nx-1}, t_{j+1})$

Ejemplo

$$\begin{aligned}u_t(x, t) - u_{xx}(x, t) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \\u(0, t) = u(1, t) &= 0, \quad t > 0; \quad u(x, 0) = \sin \pi x, \quad x \in [0, 1]\end{aligned}$$

Solución exacta: $u(x, t) = e^{-\pi^2 t} \sin \pi x$

Buscamos la solución aproximada en $T_{max} = 0,5$ mediante el método de Crank-Nicolson con:
(a) $h = 0,1$, $k = 0,01$.

x_i	$u_{i,50}$	$u(x_i, 0,5)$	$ u(x_i, 0,5) - u_{i,50} $
0.0	0	0	-
0.1	0.002305	0.002222	8.27e-5
0.2	0.004385	0.004227	1.57e-4
0.3	0.006035	0.005818	2.17e-4
0.4	0.007094	0.006840	2.55e-4
0.5	0.007495	0.007192	2.68e-4
0.6	0.007094	0.006840	2.55e-4
0.7	0.006035	0.005818	2.17e-4
0.8	0.004385	0.004227	1.57e-4
0.9	0.002305	0.002222	8.27e-5
1.0	0	0	-

- Llamamos **términos de difusión** de la EDP a los de segundo orden.
 - Un caso especial de ecuación de difusión es cuando todos los coeficientes de los términos de difusión son iguales a 1. Así llegamos a la ecuación del calor en forma multidimensional,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.$$

que analizaremos tanto en coordenadas cartesianas como en polares.

- Si los términos de difusión son nulos obtenemos una ecuación hiperbólica de primer orden de convección.
- Llamamos **términos de convección** de la EDP a los de primer orden.
 - Si los términos de convección son nulos llegamos a una ecuación de difusión.
- Un caso especial de ecuaciones es el llamado de **convección-difusión**. Un ejemplo típico unidimensional es

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} + b(x, t)u.$$

- En finanzas, las ecuaciones de convección-difusión modelizan el comportamiento de los problemas de valoración de opciones de un solo factor.

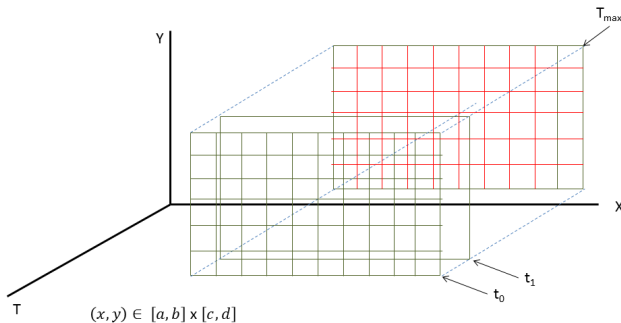
Ecuación parabólica bidimensional

Ejemplo

$$u_t(x, y, t) = \alpha^2 u_{xx}(x, y, t) + \beta^2 u_{yy}(x, y, t), \quad (x, y) \in R = [a, b] \times [c, d], \quad t \geq 0$$

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

$$u(a, y, t) = h1(y, t), \quad u(b, y, t) = h2(y, t), \quad u(x, c, t) = h3(x, t), \quad u(x, d, t) = h4(x, t).$$



$$h = \frac{b-a}{nx} \quad k = \frac{d-c}{ny} \quad p = \frac{T_{max}}{nt}$$

$$u_t(x, y, t) = \alpha^2 u_{xx}(x, y, t) + \beta^2 u_{yy}(x, y, t), \quad (x, y) \in R = [a, b] \times [c, d], \quad t \geq 0$$

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

$$u(a, y, t) = h1(y, t) \quad u(b, y, t) = h2(y, t), u(x, c, t) = h3(x, t), u(x, d, t) = h4(x, t).$$

Diferencias progresivas en u_t y centrales en u_{xx} y u_{yy}

- Transformación del problema

$$\begin{aligned} \frac{u(x, y, t + p) - u(x, y, t)}{p} &= \alpha^2 \frac{u(x + h, y, t) - 2u(x, y, t) + u(x - h, y, t)}{h^2} \\ &\quad + \beta^2 \frac{u(x, y + k, t) - 2u(x, y, t) + u(x, y - k, t)}{k^2}, \end{aligned}$$

- Discretización del problema Evaluando la expresión anterior en los puntos (x_i, y_j, t_l) , $i = 1, 2, \dots, nx - 1$, $j = 1, 2, \dots, ny - 1$, $l = 0, 1, \dots, nt - 1$, $u(x_i, y_j, t_l) = u_{i,j,l}$

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j,l+1} - u_{i,j,l}}{p} &= \alpha^2 \frac{u_{i+1,j,l} - 2u_{i,j,l} + u_{i-1,j,l}}{h^2} + \beta^2 \frac{u_{i,j+1,l} - 2u_{i,j,l} + u_{i,j-1,l}}{k^2}, \\ i &= 1, 2, \dots, nx - 1, j = 1, 2, \dots, ny - 1, l = 0, 1, \dots, nt - 1. \end{aligned}$$

Llamando $\lambda = \frac{\alpha^2 p}{h^2}$, $\mu = \frac{\beta^2 p}{k^2}$ y despejando las incógnitas del instante mayor

$$u_{i,j,l+1} = (1 - 2\lambda - 2\mu)u_{i,j,l} + \lambda(u_{i+1,j,l} + u_{i-1,j,l}) + \mu(u_{i,j+1,l} + u_{i,j-1,l}),$$
$$i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 1, 2, \dots, ny - 1, l = 0, 1, \dots, nt - 1.$$

Implementación: Matrices tridimensionales en Matlab

```
U=zeros(nx+1,ny+1,nt+1);
```

```
function [U]=expcalor3D(CC1x,CC2x,CC1y,CC2y,CI1,a,b,nx,c,d,ny,Tmax,nt,alfa,beta)

hx=(b-a)/nx;    x=a:hx:b;
hy=(b-a)/ny;    y=c:hy:d;
k=Tmax/nt;      t=0:k:Tmax;

U=zeros(nx+1,ny+1,nt+1);

for j=1:ny+1
    for l=1:nt+1
        U(1,j,l)=feval(funcionCC1x,y(j),t(l));
        U(nx+1,j,l)=feval(funcionCC2x,y(j),t(l));
    end
end

for j=1:nx+1
    for l=1:nt+1
        U(j,1,l)=feval(funcionCC1y,x(j),t(l));
        U(j,ny+1,l)=feval(funcionCC2y,x(j),t(l));
    end
end
```

```
for i=1:nx+1
    for j=1:ny+1
        U(i,j,1)=feval(funcionCI1,x(i),y(j));
    end
end

lambda=k*alfa/hx^2;

mu=k*beta/hy^2;

for l=1:nt

    U(2:nx,2:ny,l+1)=(1-2*lambda-2*mu)*U(2:nx,2:ny,l)...
        +lambda*(U(3:nx+1,2:ny,l)+U(1:nx-1,2:ny,l))+...
        mu*(U(2:nx,3:ny+1,l)+U(2:nx,1:ny-1,l));

end
```

Ejemplo

$$u_t(x, y, t) = u_{xx}(x, y, t) + u_{yy}(x, y, t), \quad (x, y) \in R = [0, 1] \times [0, 1], \quad t \geq 0$$

$$u(x, y, 0) = \sin(\pi(x + y)),$$

$$u(a, y, t) = \exp(-2\pi^2 t) \sin(\pi y), \quad u(b, y, t) = \exp(-2\pi^2 t) \sin(\pi(1 + y)),$$

$$u(x, c, t) = \exp(-2\pi^2 t) \sin(\pi x), \quad u(x, d, t) = \exp(-2\pi^2 t) \sin(\pi(1 + x)).$$

Solución exacta:

$$u(x, y, t) = e^{-2\pi^2 t} \sin(\pi(x + y)).$$

Resolvemos el problema para $nx = ny = 5$, $nt = 100$, $Tmax = 1$ con el método explícito:

```
>> [U] = expcalor3D(@(y,t) exp(-2*pi^2*t).*sin(pi*y),...  
@(y,t) exp(-2*pi^2*t).*sin(pi*(1+y)),...  
@(x,t) exp(-2*pi^2*t).*sin(pi*x),...  
@(x,t) exp(-2*pi^2*t).*sin(pi*(1+x)),...  
@(x,y) sin(pi*(x+y)),0,1,5,0,1,5,1,100,1,1);
```

Solución en el último instante:

1.0e-08 *

0	0.1572	0.2544	0.2544	0.1572	0.0000
0.1572	0.2437	0.2429	0.1515	0	-0.1572
0.2544	0.2429	0.1480	-0.0000	-0.1515	-0.2544
0.2544	0.1515	-0.0000	-0.1480	-0.2429	-0.2544
0.1572	0.0000	-0.1515	-0.2429	-0.2437	-0.1572
0.0000	-0.1572	-0.2544	-0.2544	-0.1572	-0.0000

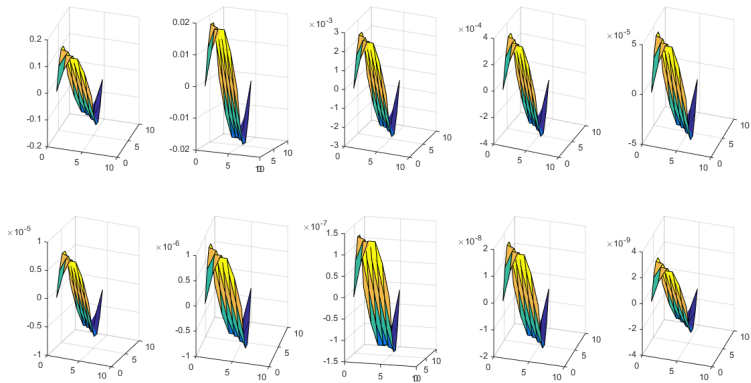
```
for i=1:nx+1
    for j=1:ny+1
        solex(i,j)=exp(-2*pi^2*Tmax)*sin(pi*(x(i)+y(j)));
    end
end
error = abs(solex-U(:, :, end))
```

Error exacto en el último instante:

```
error =
    1.0e-09 *
```

0	0	0	0	0	0
0	0.1069	0.1152	0.0578	0.0000	0
0	0.1152	0.0928	0.0000	0.0578	0
0	0.0578	0.0000	0.0928	0.1152	0
0	0.0000	0.0578	0.1152	0.1069	0
0	0	0	0	0	0

Ecuación parabólica bidimensional



Ejemplo

$$u_t(x, y, t) = \alpha^2 u_{xx}(x, y, t) + \beta^2 u_{yy}(x, y, t), \quad (x, y) \in R = [a, b] \times [c, d], \quad t \geq 0$$

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

$$u(a, y, t) = h1(y, t), \quad u(b, y, t) = h2(y, t), \quad u(x, c, t) = h3(x, t), \quad u(x, d, t) = h4(x, t).$$

Ecuación parabólica en coordenadas polares

Supongamos $\alpha^2 = 1$ y $\beta^2 = 1$,

$$u_t(x, y, t) = u_{xx}(x, y, t) + u_{yy}(x, y, t),$$

y un recinto circular, por ejemplo $x^2 + y^2 = \rho^2$. Lo mejor es transformar la EDP a coordenadas polares $r \in [0, \rho]$, $\theta \in [0, 2\pi]$, teniendo en cuenta la relación entre sendos sistemas de coordenadas:

$$\begin{aligned}x &= r \cos(\theta), \\ y &= r \sin(\theta).\end{aligned}$$

Aplicando la regla de la cadena,

$$\begin{aligned}u_r &= u_x x_r + u_y y_r = u_x \cos(\theta) + u_y \sin(\theta), \\ u_\theta &= u_x x_\theta + u_y y_\theta = u_x r \sin(\theta) + u_y r \cos(\theta).\end{aligned}$$

Partiendo de la relación

$$\begin{aligned}u_r &= u_x x_r + u_y y_r = u_x \cos(\theta) + u_y \sin(\theta), \\u_\theta &= u_x x_\theta + u_y y_\theta = u_x r \sin(\theta) + u_y r \cos(\theta).\end{aligned}$$

se deduce por reducción,

$$\begin{aligned}u_x &= u_r \cos(\theta) - \frac{1}{r} u_\theta \sin(\theta), \\u_y &= u_r \sin(\theta) + \frac{1}{r} u_\theta \cos(\theta).\end{aligned}$$

Derivando una segunda vez y reduciendo:

$$\begin{aligned}u_{xx} &= \cos(\theta) \frac{\partial u_x}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin(\theta) \frac{\partial u_x}{\partial \theta}, \\u_{yy} &= \sin(\theta) \frac{\partial u_y}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos(\theta) \frac{\partial u_y}{\partial \theta}.\end{aligned}$$

Ecuación parabólica en coordenadas polares

Partimos de la relación:

$$\begin{aligned}u_{xx} &= \cos(\theta) \frac{\partial u_x}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin(\theta) \frac{\partial u_x}{\partial \theta}, \\u_{yy} &= \sin(\theta) \frac{\partial u_y}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos(\theta) \frac{\partial u_y}{\partial \theta}.\end{aligned}$$

calculamos

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_x}{\partial r} &= \cos(\theta) u_{rr} + \frac{1}{r^2} \sin(\theta) u_\theta, \\ \frac{\partial u_x}{\partial \theta} &= -\sin(\theta) u_r - \frac{1}{r} \cos(\theta) u_\theta - \frac{1}{r} \sin(\theta) u_{\theta\theta}, \\ \frac{\partial u_y}{\partial r} &= \sin(\theta) u_{rr} - \frac{1}{r^2} \cos(\theta) u_\theta, \\ \frac{\partial u_y}{\partial \theta} &= \cos(\theta) u_r - \frac{1}{r} \sin(\theta) u_\theta + \frac{1}{r} \cos(\theta) u_{\theta\theta}\end{aligned}$$

y de este modo

$$u_t = u_{rr} + \frac{1}{r} u_r + \frac{1}{r^2} u_{\theta\theta}, \quad r \in [0, \rho], \quad \theta \in [0, 2\pi].$$

Ecuación parabólica en coordenadas cilíndricas

La forma no dimensional de la ecuación del calor es $\partial u / \partial t = \nabla^2 u$, que en coordenadas cilíndricas (r, θ, z) resulta

$$u_t = u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta} + u_{zz}.$$

Si u es independiente de z , esta ecuación se reduce a

$$u_t = u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta}.$$

Para valores no nulos de r , podemos transformar la ecuación en un esquema en diferencias, pero para $r = 0$ nos van a aparecer singularidades. Esto debemos tratarlo volviendo a transformar la ecuación en coordenadas cartesianas.

Construimos un círculo de radio δr y centro 0, denotando por 1, 2, 3 y 4 a los 4 puntos del círculo que cortan a los ejes X e Y . Entonces

$$\nabla^2 u = \frac{u_1 + u_2 + u_3 + u_4 - 4u_0}{\delta r} + O((\delta r)^2),$$

siendo u_0 el valor en el origen.

Diferentes rotaciones de los ejes, de ángulo pequeño, nos proporcionan ecuaciones similares. La suma de todas ellas nos da

$$\nabla^2 u = \frac{4(u_M - u_0)}{\delta r} + O((\delta r)^2),$$

donde u_M es el valor medio de u alrededor del círculo.

Cuando el problema tiene simetría circular, entonces $u_{\theta\theta} = 0$ y la ecuación resulta

$$u_t = u_{rr} + \frac{1}{r}u_r.$$

Si $u_r = 0$ en $r = 0$, en el segundo sumando nos aparece una indeterminación del tipo $0/0$. Desarrollando por Taylor

$$u'(r) = u'(0) + ru''(0) + \frac{r^2}{2}u'''(0) + \dots$$

pero $u'(0) = 0$, por lo que el valor límite de $(1/r)u_r$ cuando r tiende a 0 es el valor de u_{rr} en $r = 0$. De aquí, la ecuación en $r = 0$ es reemplazada por

$$u_t = 2u_{rr}.$$

La diferencia finita aplicada a esta ecuación se simplifica por el hecho que $u_r = 0$ en $r = 0$ lo que nos da $u_{-1,j} = u_{1,j}$. Por ejemplo, la aproximación explícita

$$\frac{u_{0,j+1} - u_{0,j}}{\delta t} = 2 \frac{u_{1,j} - 2u_{0,j} + u_{-1,j}}{(\delta x)^2} = 4 \frac{u_{1,j} - u_{0,j}}{(\delta x)^2}.$$

Ecuación parabólica en coordenadas esféricas

Un problema similar en $r = 0$ aparece cuando trabajamos con coordenadas esféricas, (r, θ, ϕ) , ya que la EDP tiene la expresión

$$u_t = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} u_{\phi\phi}.$$

Un argumento parecido al anterior nos lleva a aproximar $\nabla^2 u$ en $r = 0$ por $6(u_M - u_0)/(\delta r)^2$, donde u_M es el valor medio de u sobre la esfera de radio δr y centro el origen.

Si el problema es simétrico con respecto al origen, es decir, independiente de θ y ϕ , la ecuación se reduce a

$$u_t = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r}$$

y con un razonamiento similar al anterior podemos considerar que para $r = 0$ la ecuación es

$$u_t = 3u_{rr}.$$

Consideremos el problema parabólico

$$u_t = u_{xx} + \frac{2}{x}u_x, \quad 0 < x < 1, t > 0$$

con la condición inicial $u(x, 0) = 1 - x^2$, $x \in [0, 1]$ y las condiciones de contorno $u_x(0, t) = 0$ y $u(1, t) = 0$, para $t > 0$.

Utilizando un mallado rectangular con $\delta x = 0,1$ y $\delta t = 0,001$ calculamos la solución del esquema en diferencias explícito en los puntos

$$(0, 0,001), (0,1, 0,001), \dots, (0,9, 0,001).$$

En $x = 0$, $(2/x)u_x$ es indeterminado. Como

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{2}{x}u_x = \lim_{x \rightarrow 0} 2u_{xx},$$

la ecuación puede reemplazarse en $x = 0$ por

$$u_t = 3u_{xx}.$$

Esto puede ser aproximado por la ecuación en diferencias

$$\frac{u_{0,j+1} - u_{0,j}}{\delta t} = \frac{3(u_{-1,j} - 2u_{0,j} + u_{1,j})}{(\delta x)^2}.$$

Si $(u_x)_{i,j}$ es aproximado por $\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2(\delta x)}$, obtenemos que $u_{-1,j} = u_{1,j}$ ya que $(u_x)_{0,j} = 0$ y la ecuación en diferencias se convierte en

$$u_{0,j+1} = u_{0,j} + 3\lambda(2u_{1,j} - 2u_{0,j}) = (1 - 6\lambda)u_{0,j} + 6\lambda u_{1,j},$$

donde $\lambda = \delta t / (\delta x)^2 = 0,1$. Por tanto,

$$u_{0,j+1} = \frac{1}{5}(2u_{0,j} + 3u_{1,j}).$$

Para $x \neq 0$, aproximamos la EDP por

$$\frac{1}{\delta t}(u_{i,j+1} - u_{i,j}) = \frac{1}{(\delta x)^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + \frac{2}{2i(\delta x)^2}(u_{i+1,j} - u_{i-1,j}),$$

obteniendo

$$u_{i,j+1} = \lambda \left(1 - \frac{1}{i}\right) u_{i-1,j} + (1 - 2\lambda)u_{i,j} + \lambda \left(1 + \frac{1}{i}\right) u_{i+1,j}.$$

Por tanto,

$$u_{1,j+1} = \frac{1}{5}(4u_{1,j} + u_{2,j})$$

y

$$u_{9,j+1} = \frac{4}{5} \left(\frac{1}{9} u_{8,j} + u_{9,j} \right),$$

ya que $u_{10,j} = 0$.

Veamos cómo aplicamos el método explícito de diferencias finitas a la ecuación de convección-difusión:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} + b(x, t)u, \quad x \in [a, b], \quad t > 0.$$

Diferencias progresivas en u_t y centrales en u_x y u_{xx}

- **Transformación y discretización del problema** Evaluando la expresión anterior en los puntos (x_i, t_j) , $i = 1, 2, \dots, nx - 1$, $j = 0, 1, \dots, nt - 1$, $u(x_i, t_j) = u_{i,j}$

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} &= \sigma(x_i, t_j) \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \mu(x_i, t_j) \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} \\ &\quad + b(x_i, t_j)u_{i,j}, \quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 0, 1, \dots, nt - 1. \end{aligned}$$

- Llamando $\lambda = \frac{k\alpha^2}{h^2}$ y despejando las incógnitas del instante mayor:

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} &= \left(\sigma(x_i, t_j) \frac{k}{h^2} + \mu(x_i, t_j) \frac{k}{2h} \right) u_{i+1,j} + \left(\sigma(x_i, t_j) \frac{k}{h^2} - \mu(x_i, t_j) \frac{k}{2h} \right) u_{i-1,j} \\ &\quad + \left(1 + kb(x_i, t_j) - 2\sigma(x_i, t_j) \frac{k}{h^2} \right) u_{i,j}, \\ &\quad i = 1, 2, \dots, nx - 1, j = 0, 1, \dots, nt - 1. \end{aligned}$$



G.D. Smith, Numerical solution of partial differential equations: Finite Difference Methods, Oxford University Press, third edition.



L. Debnath, Nonlinear Partial Differential Equations for Scientists and Engineers, Springer, London, 2012.



S. Mazumder, Numerical Methods for Partial Differential Equations Finite Difference and Finite Volume Methods, Academic Press, 2016.



E. Zuazua, Métodos Numéricos de resolución de Ecuaciones en Derivadas Parciales, Basque Center for Applied Mathematics (BCAM), 2009