# ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES (EDP) – PARTE I

Simulaciones Computacionales (Ago-Dic 2009)

Raúl Hernández Aranda

# Introducción a las EDP

- Las ecuaciones diferenciales ordinarias nos permiten desarrollar algunos métodos generales para resolver prácticamente cualquier problema que se pueda describir por medio de una EDO, como el método Runge-Kutta.

- Esto no ocurre con las ecuaciones diferenciales parciales. En general la clasificación de la ecuación nos permite escoger el método que vamos a utilizar para resolverla.

# Clasificación de las EDP

Una ecuación diferencial parcial de 2do orden tiene la forma general

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+B\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+D\frac{\partial u}{\partial x}+E\frac{\partial u}{\partial y}+Fu\left(x,y\right)+G=0$$

Y tradicionalmente se clasifican en tres grupos

Elípticas si $B^2-4AC<0$

Parabólicas si $B^2-4AC=0$

Hiperbólicas si $B^2-4AC>0$

# Clasificación de las EDP

Es importante mencionar que si los coeficientes $A$, $B$, y $C$ dependen de las coordenadas, entonces la clasificación de las ecuaciones es local únicamente, esto se debe a que el tipo de la ecuación puede cambiar con las coordenadas.

Una manera alternativa en la que se puede escribir la forma general de una EDP de 2$^{do}$ orden es

$$A(x, y)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B(x, y)\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right)$$

Donde $f$ es una función tanto de las coordenadas espaciales como de $u$ y de sus primeras derivadas.

# Algunas ecuaciones típicas

Tipo elíptico $B^2 - 4AC < 0$

La ecuación en de Poisson en 2D, donde $u$ representa una función de potencial eléctrico, y $\rho$ representa un término fuente.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -\frac{\rho\,(x, y)}{\epsilon_0}$$

Tipo parabólico $B^2 - 4AC = 0$

La ecuación de difusión, donde $D$ representa el coeficiente de difusión, y $u$ puede representar cualquier cantidad con propiedades difusivas, como la temperatura

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

# Algunas ecuaciones típicas

Tipo hiperbólico $B^2 - 4AC > 0$

La ecuación de onda unidimensional

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

Donde $u$ es la amplitud de la onda, y $v$ su velocidad de propagación.

# Clasificación computacional

- Problema de valores iniciales

  Este tipo de problemas es en general un problema de evolución en el tiempo, en el que las condiciones iniciales se refieren al estado del sistema en el tiempo $t=0$.

- Problema de condiciones de frontera

  Este tipo de problemas considera una solución estática, es decir, en muchos de los casos nuestro sistema evolucionó en el tiempo hasta llegar a un estado estable, en estas condiciones lo que nos interesa es el valor de nuestra solución en las fronteras de la región de interés.

En general, la clasificación en cualquiera de estos dos tipos para ecuaciones parabólicas o hiperbólicas es menos importante, la razón es que con mucha frecuencia los problemas con los que nos encontramos son de un tipo mixto.

# Tipos de condiciones de frontera

1. Condiciones de Dirichlet

   El valor de la función está especificado en la frontera.

2. Condiciones de Neumann:

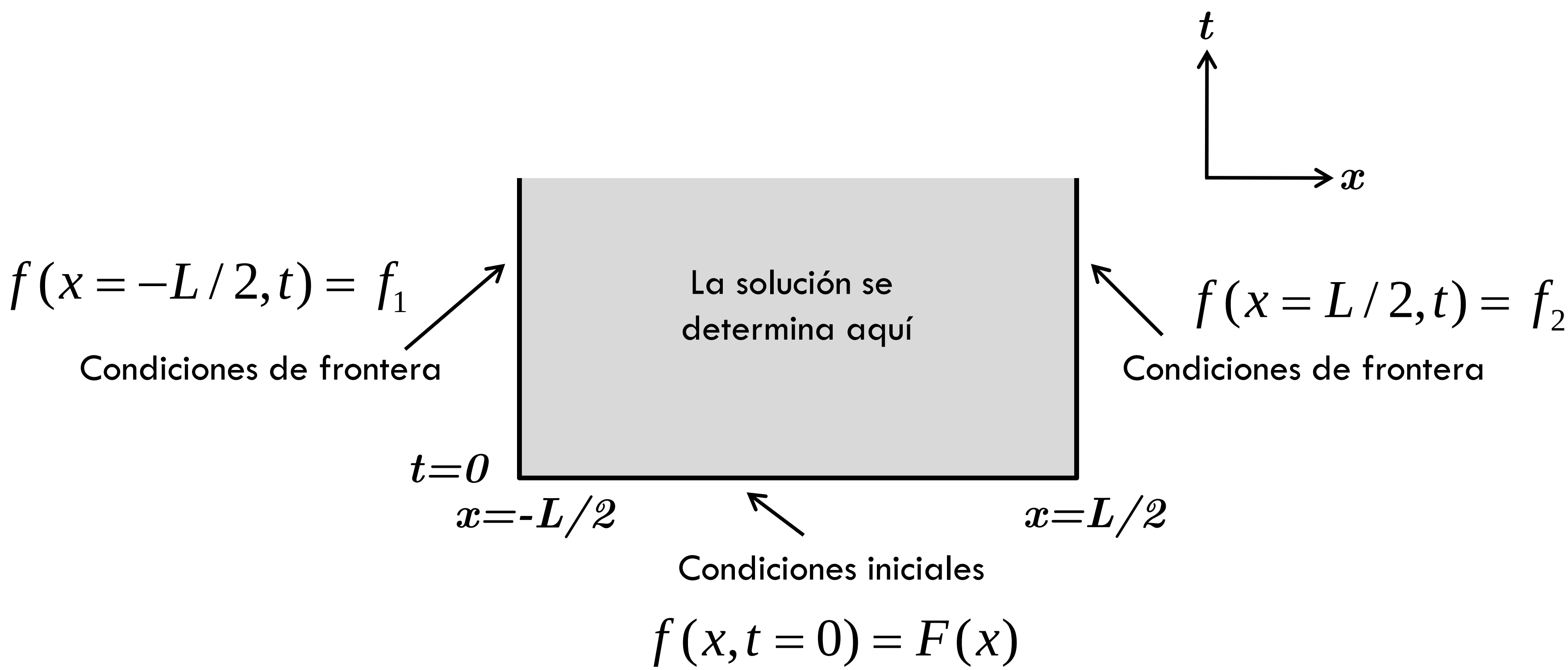
   El valor de la derivada normal (gradiente) de la función está especificado en la frontera.

3. Condiciones de Cauchy

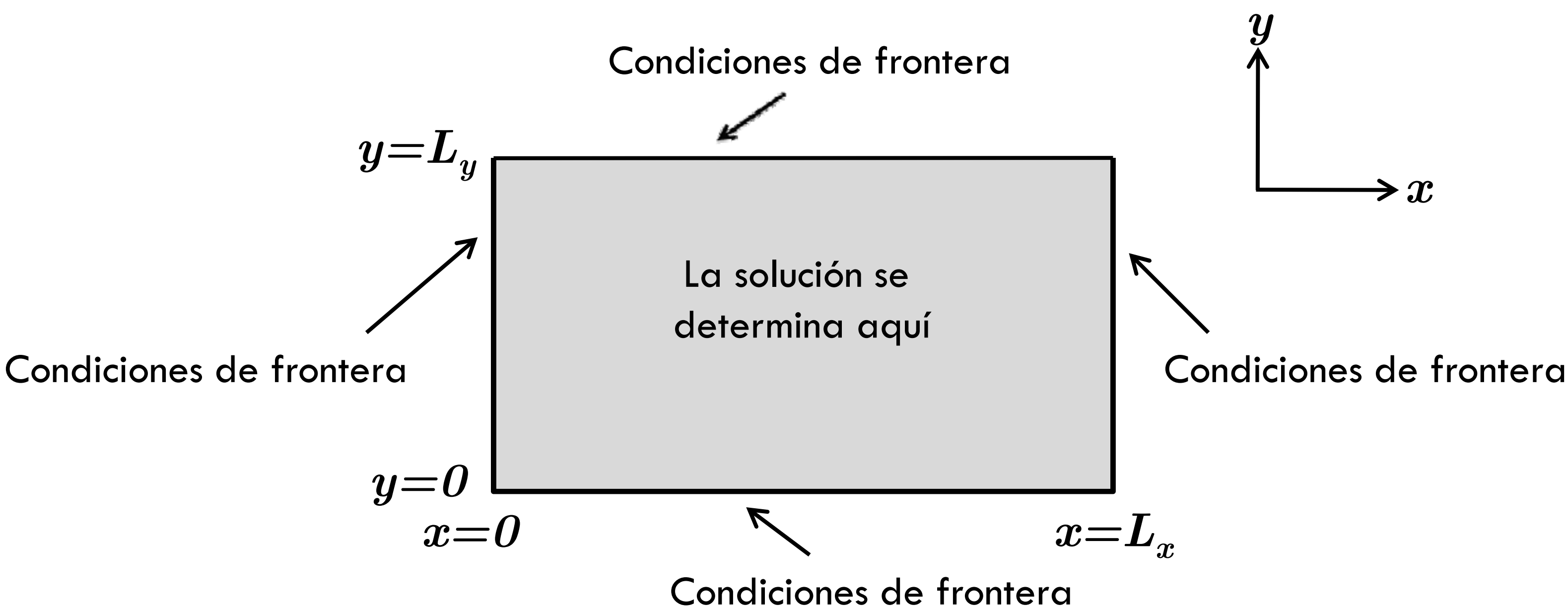
   El valor de la función y de la derivada normal están especificados en la frontera.

El concepto de condición de frontera incluye como caso especial el concepto de condición inicial.

# Esquemático de un problema de condición inicial



# Esquemático de un problema de condiciones de frontera




$$f(x=0,y)=f_1 \qquad f(x=L_x,y)=f_2$$

$$f(x,y=0)=f_3 \qquad f(x,y=L_y)=f_4$$

# Ecuación de Difusión

- Consideren la ecuación de difusión que es una PDE de tipo parabólico

$$\kappa \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\partial f}{\partial t}$$

- La constante $\kappa$ se conoce como constante de difusión.

La ecuación de difusión unidimensional tiene una solución analítica dada por

$$f\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} F\left(x+u\right) \exp\left(-\frac{u^2}{4\kappa t}\right)\ \mathrm{d}u$$

A pesar de esto, en la mayoría de las ocasiones las EDP no nos permiten obtener una solución analítica, aquí vamos a desarrollar un método numérico que nos permita resolverla.

# Método FTCS explícito (Forward Time Centered Space)

- En este esquema la idea es discretizar la ecuación de difusión utilizando
  1. Derivada hacia adelante para la derivada temporal.
  2. Derivada central para la segunda derivada espacial.

La solución a este problema está confinada a una malla que está definida entre $a \leq x \leq b$, y $0 \leq t \leq t_{\max}$, en el plano $x$-$t$

El objetivo es calcular los valores de la función $f_i^n$, en los puntos de la malla anterior $x_i$, para $i = 1,2, \ldots, K, K{+}1$, para una secuencia de puntos en el tiempo $t^n$, partiendo desde el tiempo inicial $t^0{=}0$, y sujeto a las condiciones de frontera

$$f(a,t) = f_1^n = 0 \qquad \text{y} \qquad f(b,t) = f_{K+1}^n = 0$$

# Método FTCS (Forward Time Centered Space)

- Aproximando la derivada temporal con una derivada numérica hacia adelante obtenemos

$$\kappa\left[\frac{f_{i+1}^{n}-2f_{i}^{n}+f_{i-1}^{n}}{\Delta x^{2}}\right]=\frac{f_{i}^{n+1}-f_{i}^{n}}{\tau}$$

- Despejando para $f_i^{n+1}$ tenemos

$$f_{i}^{n+1}=\alpha f_{i-1}^{n}+(1-2\alpha)\,f_{i}^{n}+\alpha f_{i+1}^{n}$$

donde $\alpha\equiv\dfrac{\kappa\tau}{\Delta x^{2}}$

la ecuación anterior se puede utilizar para calcular los valores en los puntos interiores $x_i$, con $i = 2, \ldots, K$, pero no en los puntos de frontera $i = 1$ y $i = K+1$

# Método FTCS (Forward Time Centered Space)

- El método FTCS ofrece una forma directa de calcular el valor de la función $f$ en los puntos temporales $t^{n+1}$ a partir del conocimiento de su valor en $t^n$.

- Este método se conoce como un método explícito en el sentido que no requiere evaluar una matriz inversa o resolver algún sistema de ecuaciones.

- El método se puede escribir en forma matricial.

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{A}\mathbf{f}^n = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & 1-2\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{bmatrix} \mathbf{f}^n$$

# Método FTCS (Forward Time Centered Space)

- Los elementos de los vectores en la representación matricial sólo incluyen las evaluaciones en los puntos interiores

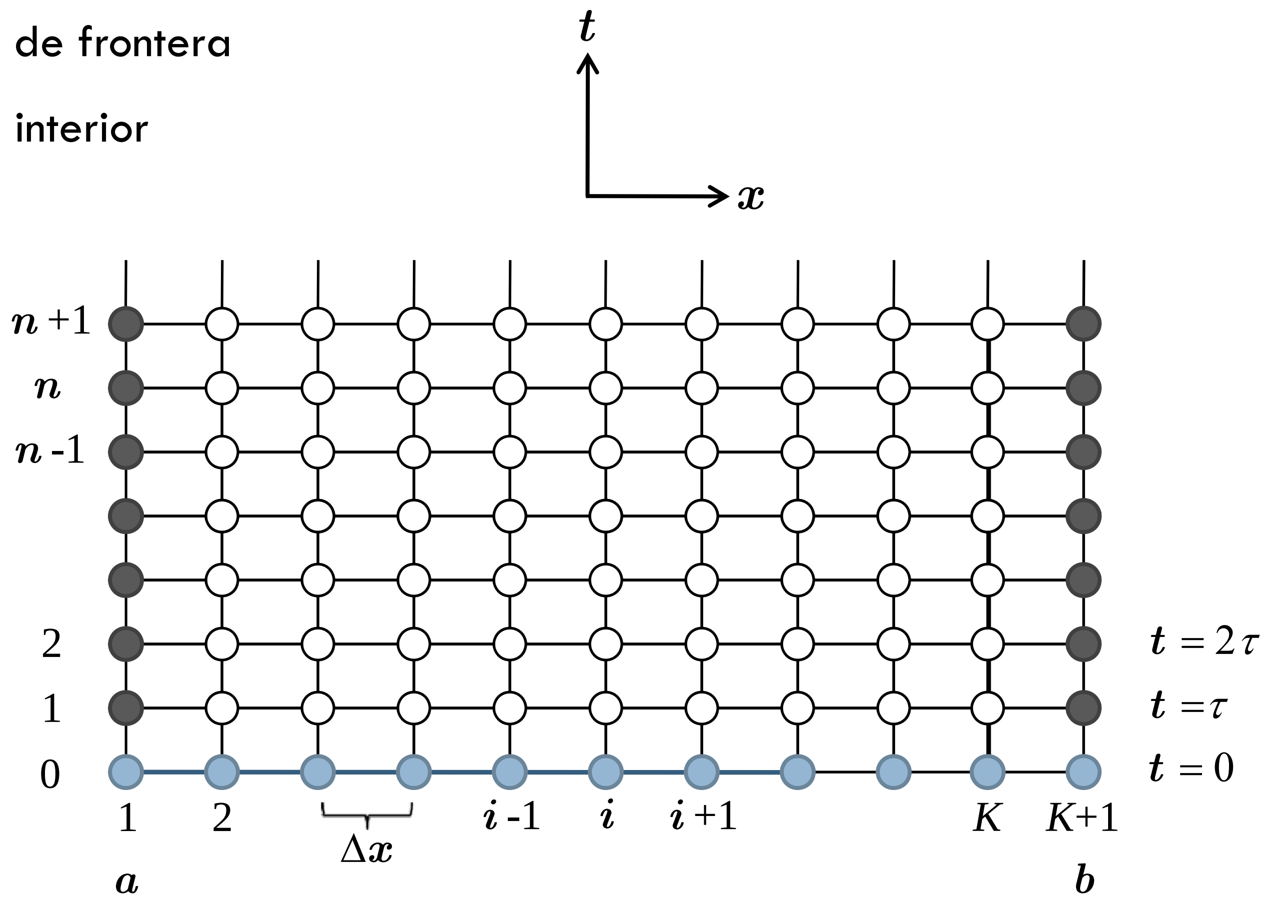
$$\mathbf{f}^n = \begin{bmatrix} f_2^n \\ f_3^n \\ \vdots \\ f_K^n \end{bmatrix}$$

- La matríz $\mathbf{A}$ es una matriz de dimensiones $(K\text{-}1) \times (K\text{-}1)$.

1. El método se inicia utilizando la condición inicial $\mathbf{f}^0 = \mathbf{F}(x)$ que corresponde al tiempo $t^0 = 0$.
2. Después se calculan los valores en el tiempo $t^1 = 1 * \tau$, y se repite el proceso hasta que se ha alcanzado el tiempo final.

# Malla para el problema de condiciones iniciales

- Punto inicial
- Punto de frontera
- Punto interior



# Estabilidad del método FTCS

- La matriz $\mathbf{A}$ es una matriz que se propaga en cada iteración

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{A}\mathbf{f}^{n} = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & 1-2\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{bmatrix} \mathbf{f}^{n}$$

por lo tanto la estabilidad numérica del método depende de la matriz A, uno de los métodos más utilizados para estudiar la estabilidad de los métodos numéricos es el análisis de von Neumann, que se presenta en la Ref. [1]. Se dice que el método FTCS es condicionalmente estable, siempre y cuando se cumpla que

$$\alpha < \frac{1}{2}$$

# Efecto de las condiciones de frontera en el método FTCS

- Si consideramos que tenemos condiciones de Dirichlet y de Neumann dadas por

$$\frac{\partial f}{\partial x} = g$$

para $x = a$, y en $x = b$ tenemos $f = 0$.

Lo que hacemos es extender el dominio de solución más allá de la frontera física en $x = a$, y calculamos la derivada numérica de la condición de Neumann como una derivada central

$$f_2^n - f_0^n = 2g\Delta x$$

- Con esta expresión la ecuación

$$f_i^{n+1} = \alpha f_{i-1}^n + (1-2\alpha)\, f_i^n + \alpha f_{i+1}^n$$

para $i = 1$ toma la forma

$$f_1^{n+1} = \alpha f_0^n + (1-2\alpha)\, f_1^n + \alpha f_2^n$$

# Efecto de las condiciones de frontera en el método FTCS

Substituyendo el valor para $f_0^n$ en la ecuación anterior obtenemos

$$\begin{aligned} f_1^{n+1} &= \alpha\left[f_2^n - 2g\Delta x\right] + (1-2\alpha)\, f_1^n + \alpha f_2^n, \\ &= (1-2\alpha)\, f_1^n + 2\alpha f_2^n - \alpha 2g\Delta x. \end{aligned}$$

Por lo que el método FTCS se puede escribir en forma matricial como

$$\mathbf{f}^{n+1} = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & 2\alpha & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha & 1-2\alpha & \ddots & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \alpha & \ddots & \alpha & 0 & 0 \\ \cdots & 0 & 0 & \ddots & 1-2\alpha & \alpha & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \alpha & 1-2\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{bmatrix} \mathbf{f}^n + \begin{bmatrix} -2\alpha g\Delta x \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \cdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Donde ahora la matriz cuadrada $\mathbf{A}$ es de dimensiones $K\times K$, dado que estamos considerando la condición de Neumann.

# Método BTCS implícito

Los métodos vistos anteriormente nos permiten obtener la solución en un punto partícular en el tiempo, conociendo la solución en uno o dos puntos anteriores. Estos métodos son explícitos dado que no hay necesidad de resolver un sistema de ecuaciones, ahora vamos a considerar un método en el que requerimos resolver un sistema de ecuaciones para encontrar una solución a nuestra PDE.

Escribimos la ecuación de difusión en el tiempo $x_i$ en el instante $t^{n+1}$, ahora aproximamos la derivada temporal con una derivada numérica hacia atrás, y la derivada espacial con una derivada central

$$\kappa \left[ \frac{f_{i+1}^{n+1} - 2f_i^{n+1} + f_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] = \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\tau}$$

# Método BTCS implícito

Reagrupando términos de acuerdo al punto en el tiempo tenemos

$$-\alpha f_{i-1}^{n+1} + (1+2\alpha)\, f_i^{n+1} - \alpha f_{i+1}^{n+1} = f_i^n$$

La ecuación anterior se puede escribir en forma matricial como

$$\mathbf{B}\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{f}^n$$

que es equivalente a resolver un sistema de ecuaciones. Para calcular la solución en el punto temporal n+1 tenemos que resolver el sistema anterior, esto es

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{f}^n \begin{bmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha & 1+2\alpha \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{f}^n$$

El método BTCS impícito es incondicionalmente estable.

# Método de Crank-Nicolson

Los métodos que vimos anteriormente tienen la particularidad de que las aproximaciones en diferencias finitas no están hechas en en mismo punto en el tiempo, veamos el método BTCS

$$\kappa\left[\frac{f_{i+1}^{n+1}-2f_i^{n+1}+f_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right]=\frac{f_i^{n+1}-f_i^n}{\tau} \qquad \text{(BTCS)}$$

Noten que la derivada espacial se toma en el tiempo $n+1$, mientras que la derivada temporal se toma en el punto medio entre el tiempo $n$ y el $n+1$, esto si vemos la derivada temporal como una derivada central con paso $\Delta t/2$.

Con el afán de mejorar los métodos anteriores, podemos tratar de resolver esta aparente inconsistencia evaluando las derivadas numéricas en el mismo tiempo.

Tomemos el punto medio entre los tiempos $n$ y el $n+1$.

# Método de Crank-Nicolson

- Para calcular la derivada espacial en el punto medio entre $t^n$ y $t^{n+1}$ consideramos el promedio de las derivadas en los dos tiempos, esto es

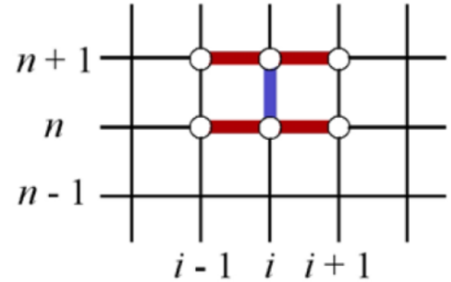
$$\kappa \frac{1}{2}\left[\frac{f_{i+1}^{n+1}-2f_i^{n+1}+f_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}+\frac{f_{i+1}^{n}-2f_i^{n}+f_{i-1}^{n}}{\Delta x^2}\right]=\frac{f_i^{n+1}-f_i^n}{\tau}$$

- Reagrupando los términos en la ecuación anterior obtenemos el método de Crank-Nicolson

$$-\alpha f_{i-1}^{n+1}+2\left(1+\alpha\right) f_i^{n+1}-\alpha f_{i+1}^{n+1}=\alpha f_{i-1}^{n}+2\left(1-\alpha\right) f_i^{n}+\alpha f_{i+1}^{n}$$

donde $\alpha \equiv \dfrac{\kappa\tau}{\Delta x^2}$

- La célula computacional de este método es



# Método de Crank-Nicolson

- El método se puede escribir en forma matricial

$$\begin{bmatrix} 2(1+\alpha) & -\alpha & 0 & 0 \\ -\alpha & 2(1+\alpha) & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & 2(1+\alpha) & -\alpha \\ 0 & 0 & -\alpha & 2(1+\alpha) \end{bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} = \begin{bmatrix} 2(1-\alpha) & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & 2(1-\alpha) & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & 2(1-\alpha) & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & 2(1-\alpha) \end{bmatrix} \mathbf{f}^{n}$$

- O de manera equivalente

$$\mathbf{C}\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{D}\mathbf{f}^{n}$$

$$\mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{f}^{n}$$

donde $\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}$ es la matriz que se propaga en cada iteración.

El método de Crank-Nicolson es incondicionalmente estable.

# Método para PDE elípticas

- Un ejemplo de ecuación elíptica es la ecuación de Helmholtz, que se puede escribir de la siguiente manera

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2} + g(x,y)f(x,y) = h(x,y)$$

en el dominio $D = \{(x,y)|x_0 \leq x \leq x_f, y_0 \leq y \leq y_f\}$ y sujeta a las condiciones de frontera

$$f(x_0,y) = b_{x0}(y) \qquad f(x,y_f) = b_{yf}(x)$$

$$f(x_f,y) = b_{xf}(y) \qquad f(x,y_0) = b_{y0}(x)$$

si $g(x,y) = 0$ la ecuación se conoce como ecuación de Poisson,

y si tanto $g(x,y) = 0$ como $h(x,y) = 0$, entonces la ecuación se conoce como ecuación de Laplace.

# Método para PDE elípticas

- Para aplicar un método de diferencias lo que hacemos es dividir el dominio en $M_x$ segmentos de longitud $\Delta x = (x_f - x_0)/M_x$ a lo largo del eje $x$, y a lo largo del eje $y$ en $M_y$ segmentos de longitud $\Delta y = (y_f - y_0)/M_y$ .

- Las segundas derivadas se aproximan utilizando un esquema de derivada central.

$$\left.\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}\right|_{x_i,y_j} \cong \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\left.\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2}\right|_{x_i,y_j} \cong \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

para cada punto interior $1 \le i \le M_x - 1$, $1 \le j \le M_y - 1$ se obtiene la siguiente ecuación en diferencias finitas

$$\frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2} + g_{i,j} f_{i,j} = h_{i,j}$$

# Método para PDE elípticas

donde

$$f_{i,j} = f(x_i, y_j) \qquad g_{i,j} = g(x_i, y_j) \qquad h_{i,j} = h(x_i, y_j)$$

- Reagrupando la ecuación de diferencias y despejando para el término $f_{i,j}$ obtenemos

$$f_{i,j} = r_y(f_{i+1,j} + f_{i-1,j}) + r_x(f_{i,j+1} + f_{i,j-1}) + r_{xy}(g_{i,j} f_{i,j} - h_{i,j})$$

donde hemos definido

$$r_x = \frac{\Delta x^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \qquad r_y = \frac{\Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \qquad r_{xy} = \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)}$$

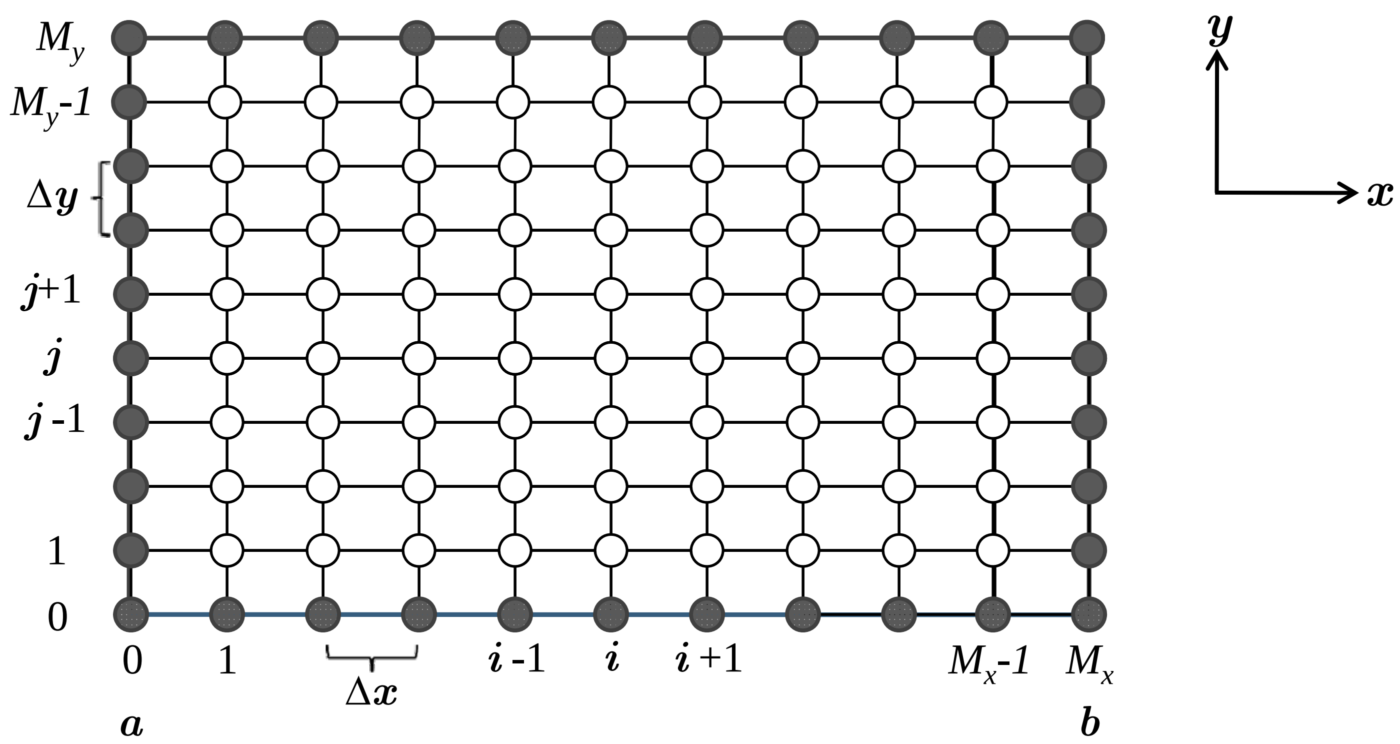
y las condiciones de frontera son

$$\begin{aligned} f_{0,j} &= b_{x0}(y_j) \qquad & f_{i,0} &= b_{y0}(x_i) \\ f_{M_x,j} &= b_{xf}(y_j) \qquad & f_{i,M_y} &= b_{yf}(x_i) \end{aligned}$$

- ¿Cómo iniciamos el método?, si no tenemos información previa sobre la solución podemos comenzar tomando el promedio de los valores en la frontera como los valores iniciales para $f_{i,j}$ .

# Malla para problema de condiciones de frontera

- Punto de frontera
- Punto interior



# Referencias


[1] J. C. Gutiérrez Vega, *Ecuaciones Diferenciales Parciales: Diferencias Finitas* (Notas para el curso de Simulaciones Computacionales 2006).

[2] R. L. Burden and J. D. Faires, *Numerical Analysis,* 8th Ed., (Brooks/Cole Pub Co., 2005)

[3] A. L. Garcia, *Numerical Methods for Physics,* 2nd Ed., (Prentice Hall, 2000)

[4] W. Y. Yang, W. Cao, T. Chung, and J. Morris, *Applied Numerical Methods using MATLAB*, (John Wiley and Sons, 2005)