

# TEMA 7.

## ECUACIONES DIFERENCIALES EN DERIVADAS PARCIALES

1. Introducción
2. Nomenclatura
3. Clasificación de las ecuaciones en derivadas parciales
4. Aproximaciones mediante diferencias finitas
5. Método explícito
6. Métodos implícitos de resolución
7. RESUMEN
8. Programación en Matlab<sup>®</sup>



## 1. Introducción

En matemáticas una ecuación en derivadas parciales (a veces abreviado como EDP) es una relación entre una función  $u$  de varias variables independientes  $x, y, z, t, \dots$  y las derivadas parciales de  $u$  respecto de esas variables. Las ecuaciones en derivadas parciales se emplean en la formulación matemática de procesos de la física y otras ciencias que suelen estar distribuidos en el espacio y el tiempo. Problemas típicos son la propagación del sonido o del calor, la electrostática, la electrodinámica, la dinámica de fluidos, la elasticidad, la mecánica cuántica y muchos otros.

Para la resolución de este tipo de problemas existe una gran variedad de métodos muy sofisticados. Sin embargo, un conjunto de métodos relativamente sencillo y que se puede aplicar en un gran número de casos son los métodos mediante diferencias finitas.

## 2. Nomenclatura

$\theta$	contribución explícita a la solución del sistema
$T_i^t$	temperatura del punto $i$ al tiempo $t$
$\rho$	densidad
$\alpha, r$	reagrupamientos de variables (ver texto)
$A, B, C$	constantes del sistema de ecuaciones diferencial
$C_p$	capacidad calorífica
$D$	discriminante
$f(x)$	función dependiente de la variable $x$
$f'(x), f''(x)$	derivadas primera y segunda de $f(x)$ respecto a $x$
$k$	conductividad térmica
$q$	flujo de calor
$t$	variable tiempo
$T_0, T_i$	temperaturas de los puntos $0$ e $i$
$T_s$	temperatura en la superficie
$x, y$	variables del sistema
$x_i$	punto sobre el que se calcula la derivada
$x_{i+1}$	punto siguiente al que se calcula la derivada

### 3. Clasificación de las ecuaciones en derivadas parciales

Considere la ecuación:

$$A \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0$$

Las ecuaciones en derivadas parciales se clasifican en función del valor del discriminante D definido como:

$$D = B^2 - 4 A C \begin{cases} D < 0 & \text{elíptica} \\ D = 0 & \text{parabólica} \\ D > 0 & \text{hiperbólica} \end{cases}$$

Para este tema nos vamos a centrar en las ecuaciones de tipo parabólico, aunque los resultados obtenidos se pueden extender sin problemas a ecuaciones de tipo elíptico o hiperbólico.

Si existen coeficientes de derivadas de distinto orden, una forma de obtener la clasificación es fijarse en los coeficientes de mayor orden, y entonces será:

- Hiperbólica: si todos los coeficientes son no nulos y uno de ellos es de signo diferente.
- Elíptica: si todos los coeficientes son no nulos y del mismo signo
- Parabólica: si al menos hay un coeficiente nulo

*Ejemplos:*

Hiperbólica:  $\frac{dC}{dt} - U \frac{dC}{dx} = 0$  *Ec. de advección*

$$\frac{d^2 C}{dt^2} - a \frac{d^2 C}{dx^2} = 0 \quad \text{Ec. de onda}$$

Elíptica:  $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$  *Ec. de Laplace*

Parabólica:  $\frac{\partial C}{\partial t} - D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0$  *Ec. de difusión*

### 4. Aproximaciones mediante diferencias finitas

La resolución de una ecuación diferencial en derivadas parciales por diferencias finitas trata de discretizar las ecuaciones. En nuestro caso debemos obtener una aproximación en diferencias de las derivadas primera y segunda utilizando sólo valores de la función que estamos estudiando. Podemos obtener dichas aproximaciones por desarrollo en serie de Taylor o

bien mediante interpolación polinómica (por ejemplo utilizando los polinomios interpoladores de Legendre).

Veamos como se puede obtener una aproximación de primer orden y una de segundo orden utilizando un desarrollo en serie de Taylor.

*Aproximación de primer orden:*

Desarrollando la función  $f(x)$  hasta primer orden alrededor del punto  $x_i$ .

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \left( \frac{df(x_i)}{dx} \right) (x_{i+1} - x_i) + \dots$$

$$\text{donde } (x_{i+1} - x_i) = \Delta x$$

Simplemente despejando la derivada obtenemos:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x}$$

La ecuación anterior es una aproximación hacia delante de primer orden. Igualmente podríamos haber obtenido una aproximación hacia atrás sin más que utilizar aproximaciones en los puntos  $x_i$  y  $x_{i-1}$ .

Para obtener la aproximación de la derivada segunda utilizamos el resultado previamente obtenido:

$$f''(x_i) = \frac{f'(x_{i+1}) - f'(x_i)}{\Delta x} = \frac{\frac{f(x_{i+2}) - f(x_{i+1})}{\Delta x} - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{\Delta x^2}$$

*Aproximación de segundo orden:*

Para obtener una aproximación de segundo orden de las derivadas primera y segunda consideremos ahora la aproximación en serie de Taylor de la función  $f(x)$ :

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \left( \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} \right) \Delta x + \frac{1}{2!} \left( \frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2} \right) \Delta x^2 + \dots$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + \left( \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} \right) (2\Delta x) + \frac{1}{2!} \left( \frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2} \right) (2\Delta x)^2 + \dots$$

Multiplicando por  $a$  y  $b$  respectivamente las dos ecuaciones anteriores y sumando se obtiene:

$$a f(x_{i+1}) + b f(x_{i+2}) = (a+b)f(x_i) + \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} \Delta x (a+2b) + \frac{\partial^2 f(x_i)}{2! \partial x^2} \Delta x^2 (a+4b)$$

Las ecuaciones anteriores se deben cumplir para cualquier valor de a y b. Por lo tanto, si queremos obtener el valor de la derivada puedo hacer que:

$$a + 2b = 1$$

Además, como nos interesa obtener una expresión para la derivada donde no aparezcan más que valores de la función podemos hacer:

$$a + 4b = 0$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones anterior resulta que:  $\begin{cases} a = 2 \\ b = -0.5 \end{cases}$

Por lo tanto:

$$2f(x_{i+1}) - \frac{1}{2}f(x_{i+2}) = \frac{3}{2}f(x_i) + \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} \Delta x \quad \text{despejando la derivada:}$$

$$\boxed{f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{2\Delta x}}$$

Para obtener una aproximación de la derivada segunda podemos seguir el mismo procedimiento:

$$\begin{aligned} f(x_{i+1}) &= f(x_i) + \left(\frac{\partial f(x_i)}{\partial x}\right)\Delta x + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2}\right)\Delta x^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f(x_i)}{\partial x^3}\right)\Delta x^3 \dots \\ f(x_{i+2}) &= f(x_i) + \left(\frac{\partial f(x_i)}{\partial x}\right)(2\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2}\right)(2\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f(x_i)}{\partial x^3}\right)(3\Delta x)^3 \dots \\ f(x_{i+3}) &= f(x_i) + \left(\frac{\partial f(x_i)}{\partial x}\right)(3\Delta x) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2}\right)(3\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f(x_i)}{\partial x^3}\right)(3\Delta x)^3 \dots \end{aligned}$$

Multiplicando por a, b, c y sumando:

$$\begin{aligned} a f(x_{i+1}) + b f(x_{i+2}) + c f(x_{i+3}) &= (a + b + c)f(x_i) + f'(x_i)\Delta x(a + 2b + 3c) + \\ &\quad \frac{1}{2!}f''(x_i)\Delta x^2(a + 4b + 9c) + \frac{1}{3!}f'''(x_i)\Delta x^3(a + 8b + 27c) \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} a + 2b + 3c &= 0 \\ a + 4b + 9c &= 1 \\ a + 8b + 27c &= 0 \end{aligned} \right\} \quad a = -5/2; \quad b = 2; \quad c = -1/2$$

Con lo que se obtiene:

$$f'''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i+1}) + 4f(x_{i+2}) - f(x_{i+3})}{\Delta x^2}$$

La aproximación de primer orden para la primera y segunda derivada de una función se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Aproximación de primer orden

Diferencias delanteras
$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x}$ $f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{\Delta x^2}$
Diferencias traseras
$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{\Delta x}$ $f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{\Delta x^2}$
Diferencias centrales
No existen

En la tabla 2 se muestra la aproximación de segundo orden para la primera y segunda derivadas de una función.

Tabla 2. Aproximación de segundo orden

Diferencias delanteras
$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{2\Delta x}$ $f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i+1}) + 4f(x_{i+2}) - f(x_{i+3})}{\Delta x^2}$
Diferencias traseras
$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2\Delta x}$ $f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{\Delta x^2}$

Diferencias centrales

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2\Delta x}$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{\Delta x^2}$$

## 5. Planteamiento del problema en diferencias finitas

Para facilitar la interpretación de la metodología vamos a plantear el esquema de resolución mediante un ejemplo, que utilizaremos a lo largo de todo el tema. Los resultados obtenidos se pueden generalizar directamente a otros tipos de problemas.

Considere la distribución de temperatura a través de un muro que forma la pared de un horno. Inicialmente, la temperatura de la pared es uniforme e igual a la temperatura ambiente,  $T_0$ . En un momento determinado, la temperatura interior de la pared aumenta hasta  $T_i$ . El balance de energía sobre un elemento diferencial de la pared nos da la ecuación.

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

donde  $\rho$ ,  $C_p$  y  $k$  representan la densidad, la capacidad calorífica y la conductividad térmica del muro, respectivamente. Para poder resolver el problema necesitamos conocer además las condiciones iniciales (o bien las condiciones en un momento dado) y las condiciones de contorno o límite.

Los métodos numéricos de resolución de este tipo de problemas calculan el valor de la variable dependiente (en nuestro ejemplo la temperatura) únicamente en puntos discretos, denominados **nodos**. De esta forma, la región existente entre los puntos límite se divide en puntos nodales; por otro lado, la variable temporal se discretiza, resultando una red bidimensional (en el caso de un estudio en un cuerpo bidimensional la red obtenida sería tridimensional y para un cuerpo tridimensional, la red nodal sería  $R^4$ ), en el cual un eje representa la variable espacial y el otro la variable temporal.

### *Condiciones iniciales y de contorno*

Como se puede observar, los problemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales requieren condiciones iniciales y límite. La condición inicial proporciona el valor de la variable dependiente sobre todo el dominio espacial para un tiempo fijo (aunque normalmente se considere las condiciones a tiempo inicial, se puede utilizar la misma metodología para las condiciones a otro tiempo cualquiera).



Para un caso general como el dado por la ecuación siguiente, las condiciones iniciales y de contorno mas habituales son las **Condiciones de Neumann**:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D(x,t) \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + C(x,t) \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$0 \leq x \leq L \quad t > 0$$

$$f(x, t=0) = f(x)$$

$$f(x=0, t) = g(t)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x=L, t) = h(t)$$

En problemas de ingeniería química estas condiciones suelen particularizarse en tres condiciones límite: valor constante, aislante y contornos expuestos a una capa límite de transporte.

Las **condiciones límite de valor constante** son el tipo más simple de condición límite. Este tipo de condición se usa normalmente como una aproximación a la situación real, en la cual existen fluctuaciones sobre el valor constante, pero son de pequeña magnitud y a efectos prácticos las fluctuaciones se pueden despreciar sin introducir errores significativos en el problema.

Las **superficies aislantes** se usan para representar superficies que no permiten el transporte de una cierta magnitud. Por ejemplo, los aislantes térmicos evitan el paso de calor, mientras que las superficies sólidas actúan como aislantes al paso de materia. La característica común de un aislante perfecto es que no permite el paso en una dirección perpendicular a él.

La condición de capa límite de transporte suele modelarse utilizando un coeficiente individual de transporte.

Para el problema del ejemplo las condiciones iniciales se pueden escribir como:

$$t = 0; \quad T = T_0; \quad \text{para } L \geq x \geq 0$$

Y las condiciones límite vendrán dadas por (valor límite constante):

$$T = T_0; \text{ para } x=0$$

$$T = T_i; \text{ para } x=L$$

Si consideramos el caso del aislante térmico encontramos que:

$$q_s = -k \left. \frac{dT}{dx} \right|_s = 0$$

Aplicando la aproximación de las diferencias finitas de segundo orden y resolviendo para  $T_0$  obtenemos que:

$$T_0 = \frac{1}{3}(4T_1 - T_2)$$

Esta ecuación representa la relación entre la temperatura en la superficie del aislante y los dos puntos nodales más cercanos a ella. La extensión de este resultado a otros tipos de superficies aislante es sencilla.

El transporte de una magnitud (calor, masa o cantidad de movimiento) desde el seno de un fluido hasta una superficie sólida, puede ser descrito por un coeficiente de transferencia. Por ejemplo, el flujo de calor desde una superficie hasta el fluido puede ser representado como:

$$q_s = h(T_s - T_0)$$

donde  $T_0$  es la temperatura de la pared,  $T_s$  la temperatura del seno del fluido y  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor. Aplicando el balance de energía la ecuación que nos queda vendrá dada por:

$$q_s = -k \frac{dT}{dx} \Big|_s = h(T_s - T_0)$$

Utilizando la aproximación de segundo orden y resolviendo para  $T_0$ ,

$$T_0 = \frac{\frac{-2h\Delta x T_s}{k} - 4T_1 + T_2}{\frac{-2h\Delta x}{k} - 3}$$

Examinando esta ecuación, podemos observar que los casos anteriores representan las condiciones extremas de este caso intermedio.

## 5. Método explícito

El método explícito, para las ecuaciones parabólicas, combina una diferencia hacia delante en el tiempo con una aproximación normalmente centrada de orden 2 de las derivadas espaciales utilizando siempre valores de la variable dependiente en el instante de tiempo anterior al considerado, lo que produce una fórmula explícita. Es posible utilizar otros esquemas de diferencias, solamente hay que tener en cuenta las condiciones de estabilidad que se comentarán más adelante.

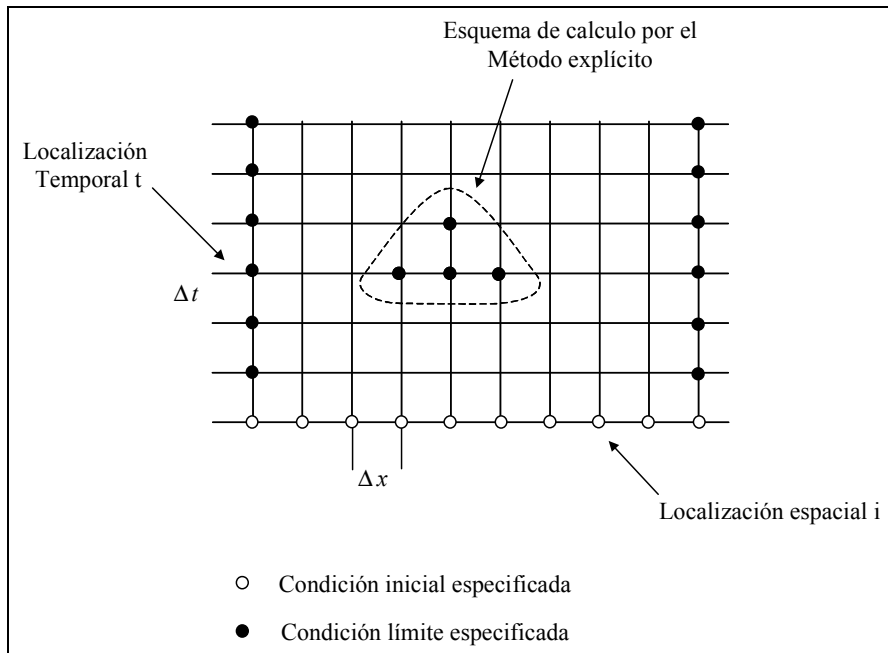


Figura 1. Esquema de resolución para el método explícito

Consideremos un punto interior  $T_i^t$  mostrado en la figura 1. Puesto que todos los valores  $T_i^t$  en el instante de tiempo  $t$  se asume que son conocidos, las derivadas espaciales pueden ser aproximadas usando diferencias centrales<sup>1</sup>:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i+1}^t - T_{i-1}^t}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

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

Sin embargo, la derivada temporal de primer orden se puede aproximar mediante la diferencia hacia adelante:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{t+1} - T_i^t}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

El procedimiento de resolución consiste en sustituir estas aproximaciones en la ecuación diferencial que rige el problema y resolver de forma explícita para  $T_i^{t+1}$ .

Esta ecuación contendrá en el lado derecho únicamente términos de  $T^t$ . Las condiciones límite se usarán para calcular los puntos límite y el problema puede ser resuelto hacia adelante en el tiempo.

<sup>1</sup> Nota: se ha utilizado indistintamente el símbolo 't' para tiempo y como índice. No deben confundirse ambos.

Como consideraciones debemos señalar que el error en la resolución de este problema es proporcional a  $(\Delta t + \Delta x^2)$ .

Aplicando el procedimiento al ejemplo anterior y utilizando los índices  $i$  para la posición y  $t$  para el tiempo:

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

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{t+1} - T_i^t}{\Delta t} \qquad \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t}{\Delta x^2}$$

$$\frac{T_i^{t+1} - T_i^t}{\Delta t} = \alpha \frac{T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t}{\Delta x^2} \qquad \text{donde } \alpha = \frac{k}{\rho C_p}$$

Obtenemos finalmente que:

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

Con la ecuación anterior podemos obtener los valores de la temperatura en los nodos a tiempo  $(t + \Delta t)$  en función del valor a tiempo  $t$ , que conjuntamente con las ecuaciones límite y de contorno nos permite resolver el problema.

### *Estabilidad*

Para poder resolver correctamente un sistema de ecuaciones diferenciales por el método de diferencias finitas se deben cumplir tres condiciones: que el esquema en diferencias sea consistente, que sea estable y que converja a la solución correcta. Si se utiliza un esquema en diferencias de los comentados anteriormente el sistema será consistente. Sin embargo garantizar la estabilidad y la convergencia (o sea que converja a la solución de la ecuación diferencial y no a otra solución no es trivial).

Existen diferentes alternativas para establecer un esquema en diferencias finitas. Sin embargo, como se ha señalado anteriormente, los incrementos de las variables independientes (posición y tiempo en nuestro ejemplo) no se pueden elegir independientemente. Incluso tomando valores muy pequeños – forzando una gran precisión- puede ocurrir que el sistema no sea estable.

Una forma de asegurarnos la estabilidad es a través del siguiente teorema:

Dado un esquema como el siguiente:

$$C_i^{t+1} = A C_{i+1}^t + B C_i^t + C C_{i-1}^t$$

Si **A, B, C son todos positivos** y además  $A + B + C \leq 1$  El esquema es estable, los errores tienden a disminuir a medida que procedemos con las iteraciones y converge a la solución de la ecuación diferencial que intentamos resolver.

Así pues para nuestro ejemplo:

$$A = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \quad B = \left(1 - \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2}\right) \quad C = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

Estudiando la primera condición:

Los coeficientes A y C son siempre positivos. El coeficiente B debe cumplir pues:

$$\left(1 - \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2}\right) \geq 0$$

Lo que nos lleva a que:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$$

En otras palabras no se pueden elegir los incrementos de tiempo y posición de forma totalmente independiente uno del otro. Normalmente se fija el incremento de posición y se elige un incremento de tiempo que permita al sistema ser estable.

Para comprobar la segunda condición:

$$A + B + C \leq 1$$

$$\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} + \left(1 - \frac{2\alpha \Delta t}{\Delta x^2}\right) + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \leq 1 \quad \text{en este ejemplo se cumple siempre.}$$

## 6. Métodos implícitos de resolución

En los métodos explícitos de resolución utilizábamos el valor de los nodos en el instante  $t$  para aproximar el valor de las derivadas en el instante  $t + \Delta t$ . Los métodos implícitos tratan de mejorar la estimación anterior utilizando tanto valores a tiempo  $t$  como a tiempo  $t + \Delta t$ .

Para el caso que nos ha servido como ejemplo, de forma general, el esquema en diferencias finitas se podría escribir como:

$$\frac{T_i^{t+1} - T_i^t}{\Delta t} = \alpha \left[ \theta \frac{T_{i+1}^{t+1} - 2T_i^{t+1} + T_{i-1}^{t+1}}{\Delta x^2} + (1-\theta) \frac{T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t}{\Delta x^2} \right]$$

donde  $\theta$  es un parámetro tal que:  $0 \leq \theta \leq 1$ .

Nota: No se debe confundir el valor de  $t$  como índice con el valor de  $t$  cuando es tiempo.

Es fácil darse cuenta que si el parámetro  $\theta$  es igual a cero el esquema en diferencias se convierte en el método explícito comentado anteriormente. Por otra parte si el parámetro  $\theta$  es igual a la unidad el esquema será totalmente implícito.

Un resultado importante es que: **Para valores de  $\theta \geq \frac{1}{2}$  el esquema en diferencias es incondicionalmente estable.**

El caso para el cual  $\theta = \frac{1}{2}$  se conoce como método de Crank Nicholson y es particularmente interesante porque estima las derivadas combinando valores de la función en los instantes  $t$  y  $t + \Delta t$  sin presentar problemas de estabilidad.

Si se utiliza un método explícito es fácil calcular el valor de la función en un punto dado en el instante de tiempo  $t + \Delta t$ , porque sólo depende de valores a tiempo  $t$ . Sin embargo en un método implícito esto no es así por lo que debemos resolver un sistema de ecuaciones (que puede ser lineal o no lineal). Así pues a la hora de elegir entre un método implícito y otro explícito debemos valorar la dificultad para resolver el sistema de ecuaciones de los métodos implícitos frente al posiblemente muy pequeño incremento de tiempo necesario para mantener la estabilidad del método explícito.

A modo de ejemplo plantaremos la resolución por un método totalmente implícito de nuestro ejemplo. Así pues:

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

Llamando  $r = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$  y reordenando los términos tenemos que:

$$r T_{i-1}^{t+1} - (2r + 1) T_i^{t+1} + r T_{i+1}^{t+1} = -T_i^t \quad 2 \leq i \leq N - 1$$

Donde  $N$  es el número total de nodos en la coordenada espacial considerados. Para los nodos inicial ( $i = 1$ ) y final ( $i = N$ ) deberemos recurrir a las condiciones de contorno. Considerando por ejemplo para el nodo  $N$  condición de contorno de temperatura constante igual a la temperatura dentro del horno.

$$T_N = T_{\text{int}}$$

Y considerando para el nodo inicial ( $i = 1$ ) superficie aislante

$$q_S = -k \frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

Utilizando un esquema en diferencias de 2º orden hacia adelante obtenemos

$$-k \frac{-3T_1^{t+1} + 4T_2^{t+1} - T_3^{t+1}}{2\Delta x} = 0 \Rightarrow -3T_1^{t+1} + 4T_2^{t+1} - T_3^{t+1} = 0$$

Tenemos por lo tanto el siguiente sistema de N ecuaciones con N incógnitas:

$$\begin{aligned} -3T_1^{t+1} + 4T_2^{t+1} - T_3^{t+1} &= 0 \\ rT_{i-1}^{t+1} - (2r+1)T_i^{t+1} + rT_{i+1}^{t+1} &= -T_i^t \quad 2 \leq i \leq N-1 \\ T_N &= T_{\text{int}} \end{aligned}$$

Que escrito en forma matricial queda:

$$\begin{pmatrix} -3 & 4 & -1 & & & & & & & & \\ r & -(2r+1) & r & & & & & & & & \\ & r & -(2r+1) & r & & & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & & r & -(2r+1) & r & & & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & & & & r & -(2r+1) & r & & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}_{N \times N} \begin{pmatrix} T_1^{t+1} \\ T_2^{t+1} \\ T_3^{t+1} \\ \vdots \\ T_i^{t+1} \\ \vdots \\ T_{N-1}^{t+1} \\ T_N^{t+1} \end{pmatrix}_{N \times 1} = \begin{pmatrix} 0 \\ -T_2^t \\ -T_3^t \\ \vdots \\ -T_i^t \\ \vdots \\ -T_{N-1}^t \\ T_{\text{int}} \end{pmatrix}_{N \times 1}$$

Para resolver el sistema basta resolver el sistema de ecuaciones anterior para cada valor de tiempo. No tendremos problemas de estabilidad, sin embargo no se debe olvidar la precisión o lo que es lo mismo el número de nodos espaciales y temporales deberá ser lo suficientemente grande para que el resultado del problema reproduzca el fenómeno físico que estamos estudiando con la suficiente precisión.

## 7. RESUMEN

Se han revisado los métodos de cálculo de las funciones cuando se dispone de las derivadas parciales que definen el problema, junto con sus condiciones de contorno e iniciales.

Se destacan los métodos explícitos, por su sencillez, donde se debe seleccionar el tipo de cálculo a realizar (central, a derecha o a izquierda) para definir el sistema de ecuaciones que se resolverá.

Los métodos implícitos son más complejos, y a la vez más precisos, que los explícitos. Una buena aproximación la constituye el método de Crank Nicholson, que supone una solución intermedia entre el explícito y el implícito.

## 8. Programación en Matlab®

8.1. Aplicación método diferencias finita explícito a chimenea. Condiciones de contorno de valor constante.

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

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} ; \quad \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$$

```
% ECUACION DIFERENCIAL EN DERIVADAS PARCIALES
% METODO DE DIFERENCIAS FINITAS "EXPLICITO"
% PERFIL DE TEMPERATURAS NO ESTACIONARIO EN UNA CHIMENEA

Cp=25; % J/K kg
k=0.55; % W/mK
dens=2000; % kg/m3
L=0.1; % m (grosor de la pared)
T0=25; % Temperatura exterior 25 °C
Tint=1000; % Temperatura interior 1000 °C

N=50; %Numero de valores de x para hacer la integracion en x

incx=L/(N-1);
inct=1.01*incx^2/(2*k/(dens*Cp));
r=k*inct/(incx^2*dens*Cp);

x=0:incx:L;

%Condicion inicial:
T=ones(1,N)*T0;
T(N)=Tint;
t=0; %Tiempo en segundos

while t<300
    t=t+inct;
    Tn(1)=T0; % Condicion limite de valor constante
    Tn(N)=Tint; % Condicion limite de valor constante
    for i=2:N-1
        Tn(i)=r*T(i-1)+(1-2*r)*T(i)+r*T(i+1);
    end
    T=Tn;
    plot(x,T)
    drawnow
end
```



8.2. Aplicación método diferencias finita explícito a chimenea. Condiciones de contorno de superficie aislante.

$$q_s = -k \frac{dT}{dx} \Big|_s = 0 \quad \rightarrow \quad T_0 = \frac{1}{3} (4T_1 - T_2)$$

```
% ECUACION DIFERENCIAL EN DERIVADAS PARCIALES
% METODO DE DIFERENCIAS FINITAS "EXPLICITO"
% PERFIL DE TEMPERATURAS NO ESTACIONARIO EN UNA CHIMENEA
```

```
Cp=25; % J/K kg
k=0.55; % W/mK
dens=2000; % kg/m3
L=0.1; % m (grosor de la pared)
T0=25; % Temperatura exterior 25 °C
Tint=1000; % Temperatura interior 1000 °C
```

```
N=50; %Numero de valores de x para hacer la integracion en x
```

```
incx=L/(N-1);
inct=0.8*incx^2/(2*k/(dens*Cp));
r=k*inct/(incx^2*dens*Cp);
```

```
x=0:incx:L;
```

```
%Condicion inicial:
T=ones(1,N)*T0;
T(N)=Tint;
t=0; %Tiempo en segundos
```

```
while t<300
    t=t+inct;
    Tn(1)=1/3*(4*T(2)-T(3)); % Condicion limite de superficie aislante
    Tn(N)=Tint; % Condicion limite de valor constante
    for i=2:N-1
        Tn(i)=r*T(i-1)+(1-2*r)*T(i)+r*T(i+1);
    end
    T=Tn;
    plot(x,T)
    drawnow
end
```

8.3. Aplicación método diferencias finita explícito a chimenea. Condiciones de contorno de eliminación de calor.

$$q_s = -k \frac{dT}{dx} \Big|_s = h(T_s - T_0) \quad \rightarrow \quad T_0 = \frac{\frac{-2h\Delta x T_s}{k} - 4T_1 + T_2}{\frac{-2h\Delta x}{k} - 3}$$

```
% ECUACION DIFERENCIAL EN DERIVADAS PARCIALES
% METODO DE DIFERENCIAS FINITAS "EXPLICITO"
% PERFIL DE TEMPERATURAS NO ESTACIONARIO EN UNA CHIMENEA
```

```
Cp=25; % J/K kg
k=0.55; % W/mK
```

```

dens=2000; % kg/m3
L=0.1; % m (grosor de la pared)
T0=25; % Temperatura exterior 25 °C
Tint=1000; % Temperatura interior 1000 °C
h=2; % U.I.
N=50; %Numero de valores de x para hacer la integracion en x

incx=L/(N-1);
inct=0.8*incx^2/(2*k/(dens*Cp));
r=k*inct/(incx^2*dens*Cp);

x=0:incx:L;

%Condicion inicial:
T=ones(1,N)*T0;
T(N)=Tint;
t=0; %Tiempo en segundos

cte=-2*h*incx/k;

while t<300
    t=t+inct;
    Tn(1)=(cte*T0-4*T(2)+T(3))/(cte-3); % Condicion limite de eliminacion calor
    Tn(N)=Tint; % Condicion limite de valor constante
    for i=2:N-1
        Tn(i)=r*T(i-1)+(1-2*r)*T(i)+r*T(i+1);
    end
    T=Tn;
    plot(x,T)
    drawnow
end

```

### 8.4. Aplicación método diferencias finita explícito a perfil de concentración en una película.

$$\begin{array}{l}
 A + B \rightarrow C \\
 \frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - kC_A \\
 t=0 \rightarrow C_A=0 \\
 x=0 \rightarrow C_A=C_{A0} \\
 x=L \rightarrow \frac{dC_A}{dx} = 0
 \end{array}$$

```

% ECUACION DIFERENCIAL EN DERIVADAS PARCIALES
% METODO DE DIFERENCIAS FINITAS "EXPLICITO"
% PERFIL DE CONCENTRACION NO ESTACIONARIO EN UNA PELICULA

```

```

DAB=0.01;%cm2/s
L=0.3; %cm
k=1; %L/mol·s
CA0=1; %mol/L

N=50; %Numero de valores de x para hacer la integracion en x

incx=L/(N-1);
inct=0.9/(k+2*DAB/inct^2);

C(1)=CA0;
C(2:N)=0;
x=0:incx:L;

```

```

r=DAB*inct/incx^2;

plot(x,C)

while t<50
    t=t+inct;
    Cnuevo(1)=CA0;
    Cnuevo(N)=1/3*(4*C(N-1)-C(N-2));
    for i=2:N-1
        Cnuevo(i)=r*C(i-1)+(1-k*inct-2*r)*C(i)+r*C(i+1);
    end
    C=Cnuevo;
    plot(x,C)
    drawnow
end

```

**8.5. Aplicación método diferencias finita explicito a perfil de concentración en un reactor en el que existe flujo y dispersión**

A lo largo de un tubo está circulando una corriente de agua. En un momento dado se comienza a introducir en uno de sus extremos una cierta sustancia, de tal manera que, manteniendo el caudal constante, la concentración varía con el tiempo adimensional de acuerdo a la siguiente expresión:

$$C_o = \exp\left(-\frac{(t-0.4)^2}{0.005}\right)$$

donde t hace referencia a unidades de tiempo adimensional y Co la concentración que entra a la tubería en un instante dado. La variación de la concentración en función del tiempo a lo largo de la dirección axial dentro del tubo se puede calcular mediante la expresión

$$\frac{\partial C}{\partial t} = M \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial C}{\partial x}$$

donde C es la concentración, t es tiempo adimensional, M es el modulo de difusión y x es una longitud adimensional.

Con condición de contorno en el punto de salida  $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$  en  $x=1$

Utilizando el método de diferencias finitas EXPLÍCITO calcule el perfil de concentraciones que tendría el tubo al cabo de una unidad de tiempo adimensional para los siguientes tres valores de M (0.01; 0.001; 0.0001). represente en una misma figura con distintos colores los perfiles obtenidos.

```

% ECUACION DIFERENCIAL EN DERIVADAS PARCIALES
% METODO DE DIFERENCIAS FINITAS "EXPLICITO"
% "FLUJO + DISPERSION EN UNA TUBERIA"

M=0.01;
L=1;

N=200; %Numero de valores de x para hacer la integracion en x

incx=L/(N-1);
inct=0.9/(2*M/incx^2-1/incx);

C(1)=exp(0);
C(2:N)=0;

```



## Tema 7: Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

```

A=zeros(N,N);
A(1,1:3)=[-3 +4 -1];
A(N,N)=1;
for i=2:N-1
    A(i,i-1)=+r;
    A(i,i)=-(2*r+1);
    A(i,i+1)=+r;
end

T=sistemalineal(A,b);

plot(x,T)
drawnow
end
    
```

### 8.7. Aplicación método diferencias finita implícito a perfil de concentración en un reactor en el que existe flujo y dispersión.

$$C_0 = \exp\left(-\frac{(t-0.4)^2}{0.005}\right)$$

$$(\alpha - \beta)C_{i-1}^{t+1} - (1 + 2\alpha - \beta)C_i^{t+1} + \alpha C_{i+1}^{t+1} = -C_i^t$$

$$C_N^{t+1} = C_{N-1}^{t+1}$$

$$\alpha = \frac{M\Delta t}{\Delta x^2}; \quad \beta = \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ (\alpha - \beta) & -(1 + 2\alpha - \beta) & & & & & & & & & \\ & (\alpha - \beta) & - & (1 + 2\alpha - \beta) & & & & & & & \\ & & \alpha & & & & & & & & \\ & & & \alpha & & & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & & (\alpha - \beta) & - & (1 + 2\alpha - \beta) & & & \\ & & & & & & \alpha & & & & \\ & & & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & & & (\alpha - \beta) & - & (1 + 2\alpha - \beta) & \alpha \\ & & & & & & & & & & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{t+1} \\ C_2^{t+1} \\ C_3^{t+1} \\ \vdots \\ C_i^{t+1} \\ \vdots \\ C_{N-1}^{t+1} \\ C_N^{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{(t-0.4)^2}{0.005}\right) \\ -C_2^t \\ -C_3^t \\ \vdots \\ -C_i^t \\ \vdots \\ -C_{N-1}^t \\ 0 \end{pmatrix}$$

```

% ECUACION DIFERENCIAL EN DERIVADAS PARCIALES
% METODO DE DIFERENCIAS FINITAS "TOTALMENTE IMPLICITO"
% "FLUJO + DISPERSION EN UNA TUBERIA"
clear all
M=0.01;
L=1;

N=200; %Numero de valores de x para hacer la integracion en x

incx=L/(N-1);
inct=0.9/(2*M/incx^2-1/incx);

alfa=M*inct/(incx^2);
beta=inct/incx;

%Condiciones iniciales
C(1)=exp(0);
C(2:N)=0;
C=C';
x=0:incx:L;
t=0;
inct=1;
    
```

```
x=0:incx:L;

while t<3000
    t=t+inct;
    b=-C;
    b(1)=exp(-(t-0.4)^2/0.005);
    b(N)=0;
    A=zeros(N,N);
    A(1,1)=1;
    A(N,N)=1;
    A(N-1,N)=-1;
    for i=2:N-1
        A(i,i-1)=+alfa-beta;
        A(i,i)=-1+2*alfa-beta;
        A(i,i+1)=+alfa;
    end

    C=sistemalineal(A,b);

    plot(x,C)
    drawnow
end
```