

# Capítulo 10

## Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

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

Los problemas en derivadas parciales que aparecen en Física se suelen clasificar en tres tipos principales: problemas parabólicos, elípticos e hiperbólicos.

Los problemas parabólicos corresponden a ecuaciones del tipo de la de difusión del calor

$$\frac{\partial T(x,y,z,t)}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 T(x,y,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T(x,y,z,t)}{\partial z^2} \right)$$

Los problemas hiperbólicos a ecuaciones similares a la ecuación de ondas

$$\frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial t^2} = c^2 \left( \frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x,y,z,t)}{\partial z^2} \right)$$

mientras que los problemas elípticos corresponden a las ecuaciones de Poisson

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

y Laplace

$$\frac{\partial^2 \Phi(x,y,z,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi(x,y,z,t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi(x,y,z,t)}{\partial z^2} = 0$$

para el potencial eléctrico. En general, si consideramos una ecuación diferencial en derivadas parciales en dos dimensiones de la forma

$$a \frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial x^2} + c \frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial y^2} + b \frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial x \partial y} + d \frac{\partial \psi(x,y)}{\partial x} + e \frac{\partial \psi(x,y)}{\partial y} + f \psi(x,y) + g = 0$$

se denomina hiperbólica si  $b^2 - 4ac > 0$ , parabólica si  $b^2 - 4ac = 0$  y elíptica si  $b^2 - 4ac < 0$ . En Física, la dimensión temporal es la única esencialmente distinta de las tres dimensiones espaciales en cuanto a su comportamiento, por lo que en caso de varias variables el tipo se refiere a la variable temporal y una de las espaciales.

**Ejercicio:**

Comprobar que la anterior definición general coincide con los tipos de las ecuaciones de ondas, difusión y Poisson avanzados anteriormente.

## 10.2. La ecuación de propagación del calor (ecuación de difusión)

Vamos a estudiar en primer lugar la ecuación de conducción del calor,

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2}$$

que es más ilustrativa y sencilla al mismo tiempo. Esta ecuación representa la evolución del perfil de temperatura  $T(x,t)$  en función del tiempo en una barra de coeficiente térmico  $\kappa$ . Una ecuación similar es la ecuación de difusión, que da la concentración  $C(x,t)$  en función del tiempo de un soluto con coeficiente de difusión  $D(x)$  en un disolvente :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x) \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right)$$

Esta ecuación se reduce a la ecuación de propagación del calor si el coeficiente de difusión  $D$  es constante. Consideraremos en lo que sigue sólo ejemplos en dos dimensiones por sencillez, para evitar supermatrices en tres y cuatro dimensiones y para mantenerse en un volumen de cálculo moderado. Como tenemos que discretizar el espacio y el tiempo, introducimos la abreviación

$$T(x_i, t_n) = T_i^n$$

Vamos a considerar condiciones de contorno de Dirichlet

$$T(x = -L/2, t) = T_a$$

$$T(x = L/2, t) = T_b$$

así como condiciones iniciales:

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

Para discretizar el espacio y el tiempo, tomamos un paso de integración espacial de  $h$  y un paso temporal  $\tau$ , con lo que  $t_n = n\tau$  y  $x_i = ih - L/2$ . En general, estos espaciados son distintos, y como veremos, hay relaciones entre ellos que optimizan la precisión numérica del resultado. Supondremos que los índices  $i$  y  $n$  comienzan en 0, de acuerdo con la convención en los lenguajes C y C++. Tomaremos condiciones de contorno nulas por simplicidad.

El primer esquema de integración que vamos a considerar es el llamado de diferencias finitas progresivas en el tiempo y centradas en el espacio, abreviado como FCTS ( de Forward Time Centered Space). Tomamos como aproximación a la derivada temporal

$$\left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} \right|_{t_n, x_i} = \frac{T(t_n + \tau, x_i) - T(t_n, x_i)}{\tau} = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau}$$

mientras que para la derivada espacial tomamos diferencias centradas

$$\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} = \frac{T(t_n, x_i + h) - 2T(t_n, x_i) + T(t_n, x_i - h))}{h^2} = \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2}$$

con lo que la versión discretizada de la ecuación de difusión queda de la forma

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = \kappa \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2}$$

De aquí podemos despejar los valores de la temperatura en un punto del espacio en un instante dado en función de la temperatura de este punto y los vecinos en instantes anteriores:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\kappa \tau}{h^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)$$

que en forma matricial queda como

$$\mathbf{T}^{n+1} = A\mathbf{T}^n$$

con

$$\mathbf{T}^n = \begin{bmatrix} T_0^n = T_a \\ T_1^n \\ \vdots \\ T_{N-1}^n \\ T_N^n = T_b \end{bmatrix}$$

$$A = I + \frac{\kappa \tau}{h^2} D$$

donde  $I$  es la matriz identidad y  $D$  la siguiente matriz tridiagonal

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

De hecho, las filas y columnas primera y última corresponden a las condiciones de contorno, y no hace falta calcularlas en cada iteración, ya que las componentes 0 y  $N$  de  $\mathbf{T}$  permanecen invariables, en caso de que las condiciones de contorno sean constantes en el tiempo, que es el caso

que consideraremos en adelante. Cada paso de integración en el tiempo equivale a multiplicar el vector de valores iniciales una vez por la matriz  $A$ , con lo que tenemos

$$\mathbf{T}^{n+1} = A^{n+1}\mathbf{T}^0$$

Si descomponemos  $\mathbf{T}^0$  en vectores propios de  $A$ ,  $\mathbf{T}^0 = \sum_k a_k \mathbf{v}_k$ , tenemos

$$\mathbf{T}^{n+1} = \sum_k \lambda_k^{n+1} a_k \mathbf{v}_k \quad (10.1)$$

De esta expresión podemos deducir dos conclusiones:

1. Para valores grandes del tiempo ( $n$ ), la solución viene dominada por el vector propio correspondiente al valor propio de mayor valor absoluto  $\lambda_m$ :

$$\mathbf{T}^{n+1} \simeq \lambda_m^{n+1} a_m \mathbf{v}_m$$

2. Si  $|\lambda_m| > 1$ , la solución divergerá para tiempos elevados, por lo que decimos que la solución es inestable:

$$T_i^{n+1} \simeq \lambda_m^{n+1} a_m v_{mi} \longrightarrow \infty$$

Los valores propios dependen del espaciado en el espacio y el tiempo. Su número y valor depende del tamaño de la red de integración-

### 10.2.1. Estabilidad del método de diferencias finitas progresivas

De lo dicho en el apartado anterior, vemos que el método FTCS es estable sólomente si el mayor valor propio de  $A$  cumple  $|\lambda_m| \leq 1$ . Al valor absoluto del mayor valor propio de una matriz se le denomina radio espectral

$$\rho(A) = |\lambda_m|$$

De 10.1 vemos que  $\rho(A^n) = \rho(A)^n$ . Una forma numérica de calcular el radio espectral es calcular  $A^n \mathbf{v}$  para valores sucesivos de  $n$  y para el vector  $\mathbf{v} = (1, 1, \dots, 1)$ . Cuando el cociente entre dos potencias sucesivas converja a una constante, calculamos el vector propio correspondiente al radio espectral como

$$\mathbf{v}_m = \frac{A^n \mathbf{v}}{\|A^n \mathbf{v}\|}$$

y

$$\lambda_m = A \mathbf{v}_m$$

De hecho, en el caso del método FTCS el radio espectral se puede obtener analíticamente. Escribiendo la matriz  $A$  como

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \alpha & 1-2\alpha & \alpha \\ \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I + \alpha D$$

con

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & -2\alpha & \alpha & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \alpha & -2\alpha & \alpha \\ \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

y  $\alpha = \frac{\kappa\tau}{h^2}$ , se puede demostrar que los valores propios de  $A$  son

$$\lambda_k = 1 - 4\alpha \sin^2\left(\frac{k\pi}{2N}\right) \quad k = 1, \dots, N-1$$

por lo que la condición  $\max(\lambda_k) \leq 1$  equivale a

$$0 \leq \alpha \sin^2\left(\frac{k\pi}{2N}\right) \leq \frac{1}{2} \quad k = 1, \dots, N-1$$

Como esto se debe de cumplir para cualquier valor de  $k$  y  $N$ , entonces tenemos la condición

$$0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2}$$

o lo que es lo mismo

$$\frac{\kappa\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$$

Vemos que los pasos de integración espaciales y temporales deben de cumplir la relación

$$\frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2\kappa}$$

para que el método sea estable. Si  $\kappa = \frac{1}{2}$  y  $h = 0,1$ , se debe cumplir  $\tau \leq 0,01$  para que el método sea estable. Esta condición puede requerir un volumen de cálculo muy considerable para la integración temporal. Vamos a ver que hay otros métodos de integración con condiciones de estabilidad menos restrictivas. Se puede demostrar que la condición de estabilidad implica que en un paso temporal de integración sólo pasa una cantidad apreciable de calor a las celdillas vecinas inmediatas. Si  $\kappa$  es muy grande, el calor se difunde deprisa y el paso temporal debe de ser pequeño.

### 10.2.2. Método de diferencias finitas regresivas

Un método alternativo es utilizar diferencias finitas regresivas, de forma que la derivada temporal utiliza un instante anterior en el tiempo. La ecuación en diferencias toma la forma

$$\frac{T_i^n - T_i^{n-1}}{\tau} = \kappa \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2}$$

que, denominando  $\alpha = \frac{\kappa\tau}{h^2}$  queda como

$$-\alpha T_{i+1}^n + (1 + 2\alpha)T_i^n - \alpha T_{i-1}^n = T_i^{n-1}$$

Esta ecuación proporciona una relación de recurrencia que liga los valores de la temperatura en un instante con los valores en el instante anterior. Podemos escribir esta relación en forma matricial como

$$B\mathbf{T}^n = \mathbf{T}^{n-1}$$

con  $B$  una matriz tridiagonal

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & \cdots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ \cdots & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I - \alpha D$$

Vemos que la matriz  $B$  no es la inversa de la matriz  $A$  por lo que el método de diferencias regresivas es esencialmente distinto del de diferencias progresivas:

$$AB = I - \alpha^2 D^2$$

En el caso de diferencias regresivas, tenemos que resolver un sistema de ecuaciones para avanzar un paso en el tiempo. Este sistema se puede resolver por factorización  $LU$ , y, si  $N$  es muy grande, por métodos iterativos como el método SOR o el método del gradiente conjugado. El método de diferencias regresivas tiene un buen comportamiento en lo que concierne a la estabilidad. Se puede demostrar analíticamente que los valores propios de  $B$  son

$$\lambda_k = 1 + 4\alpha \sin^2\left(\frac{k\pi}{2N}\right) \quad k = 1, \dots, N-1$$

Como  $\alpha > 0$ ,  $\lambda_k > 1$ , con lo que la matriz inversa existe, y además, como los valores propios de la inversa son los inversos de los valores propios

$$\rho(B^{-1}) < 1$$

por lo que el método siempre es estable. Sin embargo, estabilidad no es sinónimo de precisión numérica, y el hecho de que la derivada temporal no esté centrada en el tiempo, hace que el método tenga una precisión del orden de  $O(\tau + h^2)$ , al igual que el método de diferencias progresivas. Sería deseable un método que convergiese más rápidamente en el tiempo, al menos como  $\tau^2$ .

### 10.2.3. Algoritmo de Crank-Nicolson

La dependencia lineal del error con  $\tau$  en los dos métodos anteriores proviene de la discretización de la derivada temporal mediante diferencias finitas no centradas en el tiempo. Tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{T(t+\tau, x) - T(t, x)}{\tau} + \frac{1}{2}\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + O(\tau^2) \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{T(t, x) - T(t-\tau, x)}{\tau} - \frac{1}{2}\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + O(\tau^2) \end{aligned}$$

Si promediamos ambas expresiones, tendremos un error en  $O(\tau^2)$  para la derivada primera temporal. Esta es la idea del algoritmo de Crank-Nicolson, que equivale a aproximar la derivada temporal mediante diferencias centradas en el tiempo. Si promediamos ambas expresiones

$$\begin{aligned} \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} &= \kappa \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2} \\ \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} &= \kappa \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{h^2} \end{aligned}$$

obtenemos

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = \frac{\kappa}{2} \left( \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2} + \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{h^2} \right)$$

Esta ecuación se puede reorganizar como

$$\frac{T_i^{n+1}}{\tau} - \frac{\kappa}{2} \left( \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{h^2} \right) = \frac{T_i^n}{\tau} + \frac{\kappa}{2} \left( \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2} \right)$$

que se puede escribir en la forma matricial

$$B_1 \mathbf{T}^{n+1} = A_1 \mathbf{T}^n$$

con

$$\begin{aligned} A_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ \frac{\alpha}{2} & 1 - \alpha & \frac{\alpha}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \frac{\alpha}{2} & 1 - \alpha & \frac{\alpha}{2} \\ \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I + \frac{\alpha}{2} D \\ B_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\alpha}{2} & 1 + \alpha & -\frac{\alpha}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & -\frac{\alpha}{2} & 1 + \alpha & -\frac{\alpha}{2} \\ \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I - \frac{\alpha}{2} D \end{aligned}$$

con

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 1 & -2 & 1 \\ \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

si las condiciones de contorno son constantes. En  $A_1$  y  $B_1$  hemos definido  $\alpha = \frac{\kappa\tau}{h^2}$ . La matriz  $B_1$  es definida positiva con diagonal dominante, por lo que es invertible. Como es tridiagonal,

el algoritmo de Crout es relativamente sencillo de aplicar, aunque para valores grandes de  $N$  es preferible utilizar los métodos de superrelajación. El método siempre es estable y converge como  $O(\tau^2 + h^2)$ . Podemos escribir el método como

$$\mathbf{T}^{n+1} = \left(I - \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1} \left(I + \frac{\alpha}{2}D\right) \mathbf{T}^n$$

Desde el punto de vista numérico conviene evitar la multiplicación de grandes matrices. En la ecuación anterior, si definimos la matriz  $P$  por  $B_1^{-1}$

$$P = \left(I - \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1}$$

tenemos

$$A_1 = I + \frac{\alpha}{2}D = 2I - I + \frac{\alpha}{2}D = 2I - P^{-1}$$

con lo que obtenemos

$$\mathbf{T}^{n+1} = P(2I - P^{-1})\mathbf{T}^n = (2P - I)\mathbf{T}^n = \left[2\left(I - \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1} - I\right]\mathbf{T}^n$$

que implica sólo la multiplicación de una matriz por un vector.

#### 10.2.4. Criterio de estabilidad de von Neumann

Existen diversos criterios para determinar la estabilidad de una ecuación diferencial en derivadas parciales. Entre ellos, el criterio de von Neumann es el más fácil de aplicar para determinar si un método de integración es estable. Consiste en suponer una solución compleja, de la forma

$$T(x, t) = A(t)e^{ikx}$$

con lo que discretizando queda

$$T_j^n = A^n e^{ikjh}$$

Se define el coeficiente de amplificación  $\xi$  como

$$\xi = \frac{A^{n+1}}{A^n}$$

Si  $|\xi| > 1$  la solución crecerá con el tiempo y el método es inestable. En caso contrario, la solución disminuye con el tiempo y el sistema es estable. Vamos a aplicar este método a los tres esquemas de integración anteriores.

Para el esquema FCTS

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\kappa\tau}{h^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)$$

tenemos

$$A^{n+1} e^{ikjh} = A^n e^{ikjh} + \frac{\kappa\tau}{h^2} \left[ A^n e^{ik(j+1)h} - 2A^n e^{ikjh} + A^n e^{ik(j-1)h} \right]$$



y simplificando obtenemos

$$\xi = 1 + \frac{\kappa\tau}{h^2} [e^{ikh} + e^{-ikh} - 2] = 1 + \frac{2\kappa\tau}{h^2} [\cos(kh) - 1] = 1 - \frac{4\kappa\tau}{h^2} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right)$$

por lo que la condición  $|\xi| \leq 1$  sólo se cumple si

$$\frac{4\kappa\tau}{h^2} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \leq 2$$

que a su vez se cumple siempre si

$$\frac{2\kappa\tau}{h^2} \leq 1$$

Esta condición, en el caso de la ecuación de difusión, implica que la longitud de difusión en un intervalo temporal  $\tau$ ,

$$d = \sqrt{2D\tau}$$

sea inferior a la longitud de una celdilla espacial  $h$ .

Si aplicamos el criterio de von Neumann al método de diferencias finitas regresivas

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha [T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}]$$

obtenemos

$$A^{n+1} e^{ikjh} = A^n e^{ikjh} + \frac{\kappa\tau}{h^2} [A^{n+1} e^{ik(j+1)h} - 2A^{n+1} e^{ikjh} + A^{n+1} e^{ik(j-1)h}]$$

que, procediendo de forma análoga, obtenemos

$$\xi = \frac{1}{1 + \frac{4\kappa\tau}{h^2} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right)}$$

Por lo tanto, siempre se cumple  $|\xi| \leq 1$ , y el método es incondicionalmente estable para cualquier paso de integración temporal  $\tau$ .

Análogamente, en el algoritmo de Crank-Nicolson

$$\frac{T_i^{n+1}}{\tau} = \frac{T_i^n}{\tau} + \frac{\kappa}{2} \left( \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{h^2} \right)$$

tenemos

$$A^{n+1} e^{ikjh} = A^n e^{ikjh} + \frac{\kappa\tau}{2h^2} [A^{n+1} e^{ik(j+1)h} - 2A^{n+1} e^{ikjh} + A^{n+1} e^{ik(j-1)h} + A^n e^{ik(j+1)h} - 2A^n e^{ikjh} + A^n e^{ik(j-1)h}]$$

con lo que obtenemos

$$\xi = \frac{1 - \frac{2\kappa\tau}{h^2} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right)}{1 + \frac{2\kappa\tau}{h^2} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right)}$$

y el método es también incondicionalmente estable.

### 10.2.5. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno se clasifican en condiciones de Dirichlet, cuando se imponen sobre las funciones (la temperatura en los extremos de la barra en el caso de la ecuación del calor);

$$T(0,t) = T_a \quad T(L,t) = T_b$$

y de Neumann cuando se imponen sobre las derivadas de las funciones

$$\left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = j_a \quad \left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=L} = j_b$$

que equivale a imponer condiciones sobre los flujos de calor. Otro tipo de condiciones, útiles para simular sistemas, son las condiciones de contorno periódicas, que consisten en igualar los valores de las funciones en los extremos

$$T(0,t) = T(L,t)$$

$$\left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=L}$$

Junto con las condiciones de contorno, válidas para cualquier valor del tiempo, hay que proporcionar condiciones iniciales, que proporcionan la distribución espacial del sistema en un instante inicial. Esto equivale a dar el perfil de temperaturas en el instante inicial

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

### 10.2.6. Densidad de neutrones en un reactor nuclear

Un caso interesante es el de la determinación de la densidad de neutrones en un reactor nuclear. La densidad en un punto,  $n(\mathbf{r},t)$ , es debida a la difusión de neutrones provenientes de otros puntos y a la creación de neutrones mediante fisión en el punto. La producción neta de neutrones resulta del balance de los neutrones producidos por fisión y los absorbidos por captura. Si la tasa neta de creación de neutrones por cada neutrón es  $C(\mathbf{r},t)$ , tenemos

$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\mathbf{r},t) + C(\mathbf{r},t)n(\mathbf{r},t)$$

Vamos a considerar el caso monodimensional

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

en una caja de longitud  $L$ ,  $-L/2 \leq x \leq L/2$ , con condiciones de contorno de Dirichlet

$$n(L/2,t) = n(-L/2,t) = 0$$

En el caso de  $^{235}\text{U}$ ,  $D \simeq 10^5 \text{ m}^2/\text{s}$  y  $C \simeq 10^8 \text{ s}^{-1}$ . Cuando la longitud  $L$  es mayor que una longitud crítica  $L_c$ , entonces se alcanza la masa crítica y se produce la reacción en cadena, con

aumento exponencial de la densidad de neutrones. Se puede demostrar, resolviendo la ecuación por separación de variables, que

$$L_c = \pi \sqrt{D/C}$$

En los ejemplos numéricos, tomaremos  $D = C = 1$  con lo que  $L_c = \pi$ .

El esquema de integración FCTS proporciona la ecuación en diferencias

$$\frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{\tau} = D \frac{n_{i+1}^j - 2n_i^j + n_{i-1}^j}{h^2} + C n_i^j$$

que resulta en

$$n_i^{j+1} = n_i^j + \frac{D\tau}{h^2} (n_{i+1}^j - 2n_i^j + n_{i-1}^j) + C\tau n_i^j$$

para  $i = 1, \dots, N-1$ , con  $n_0^j = n_N^j = 0$ .

### 10.2.7. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Un caso interesante de ecuación parabólica, es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

Definiendo el operador Hamiltoniano como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

podemos escribir una solución formal de la ecuación como

$$\psi(x,t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H t\right\} \psi(x,0) \quad (10.2)$$

Para resolver numéricamente esta ecuación discretizaremos el espacio y el tiempo, con pasos  $h$  y  $\tau$ , respectivamente. En el método FTCS tenemos

$$i\hbar \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i-1}^n}{h^2} + V_i \psi_i^n$$

que podemos escribir como

$$i\hbar \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\tau} = \sum_{j=0}^N H_{ij} \psi_j^n$$

con la definición

$$H_{ij} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} + \delta_{i-1,j}}{h^2} + V_i \delta_{i,j}$$

donde  $\delta_{i,j}$  representa la delta de Kronecker. Podemos escribir la ecuación anterior como

$$\Psi^{n+1} = \left(I - \frac{i\tau}{\hbar} H\right) \Psi^n \quad (10.3)$$

donde

$$\Psi^n = \begin{bmatrix} \psi_1^n \\ \psi_2^n \\ \vdots \\ \psi_N^n \end{bmatrix}$$

La solución 10.3 se puede interpretar como el primer orden del desarrollo en serie de Taylor de la solución de la ecuación 10.2. Si utilizamos el método de diferencias regresivas tenemos

$$i\hbar \frac{\psi_i^{n+1} - \psi_i^n}{\tau} = \sum_{j=0}^N H_{ij} \psi_j^{n+1}$$

con lo que recolectando términos obtenemos la ecuación

$$\left( I + \frac{i\tau}{\hbar} H \right) \Psi^{n+1} = \Psi^n \quad (10.4)$$

que nos permite avanzar un paso en el tiempo resolviendo un sistema de ecuaciones. Tomando el promedio de 10.3 y 10.4 obtenemos el algoritmo de Crank-Nicolson

$$\left( I + \frac{i\tau}{2\hbar} H \right) \Psi^{n+1} = \left( I - \frac{i\tau}{2\hbar} H \right) \Psi^n$$

que se puede reescribir como

$$\Psi^{n+1} = \left( I + \frac{i\tau}{2\hbar} H \right)^{-1} \left( I - \frac{i\tau}{2\hbar} H \right) \Psi^n \quad (10.5)$$

que corresponde a aproximar la exponencial en la ecuación 10.2 como

$$e^x = \frac{1-x}{1+x}$$

Esta expresión no es otra cosa que el aproximante de Padé más bajo de la exponencial, que tiene un radio de convergencia más elevado que la serie de Taylor. Además el operador

$$\left( I + \frac{i\tau}{2\hbar} H \right)^{-1} \left( I - \frac{i\tau}{2\hbar} H \right)$$

es unitario, al igual que el operador

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H t \right\}$$

Por lo tanto, el algoritmo de Crank-Nicolson no sólo está centrado en el espacio y el tiempo simultáneamente, sino que además conserva unitariedad. El algoritmo 10.5 nos obliga a calcular

inversas de matrices, lo que puede resultar un serio inconveniente para grandes dimensiones. Una forma alternativa de plantear los cálculos es reordenar 10.5 de la forma

$$\begin{aligned}\Psi^{n+1} &= \left(I + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)^{-1} \left[2I - \left(I + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)\right] \Psi^n \\ &= \left[2\left(I + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)^{-1} - I\right] \Psi^n = 2\left(I + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right)^{-1} \Psi^n - \Psi^n\end{aligned}$$

El primer término del último miembro se calcula como la solución  $\Phi^n$  del sistema de ecuaciones

$$\frac{1}{2} \left(I + \frac{i\tau}{2\hbar}H\right) \Phi^n = \Psi^n$$

con lo que obtenemos para cada iteración

$$\Psi^{n+1} = \Phi^n - \Psi^n$$

Por lo tanto, cada paso de integración implica solamente la solución de un sistema de ecuaciones lineales complejo.

### 10.2.8. Algunas ecuaciones no lineales en derivadas parciales con derivadas temporales primeras

En Física aparecen otras ecuaciones que implican derivadas primeras con respecto del tiempo, pero con términos no lineales. La forma de proceder para construir esquemas en diferencias finitas es similar, salvo que en los términos no lineales se utiliza las diferencias progresivas. Por ejemplo, en acústica no lineal aparece la ecuación de Burger

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

Un método adecuado es el promedio de diferencias progresivas

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\tau} = -\phi_i^n \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2h} - \kappa \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{h^2}$$

y regresivas

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\tau} = -\phi_i^n \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2h} - \kappa \frac{\phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i+1}^{n+1}}{h^2}$$

que da como resultado

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\tau} = -\phi_i^n \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2h} - \frac{\kappa}{2} \left( \frac{\phi_{i-1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i+1}^{n+1}}{h^2} + \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{h^2} \right)$$

Notemos que el término no lineal se ha evaluado de forma regresiva tanto en el método progresivo como en el regresivo, pero con derivadas espaciales centradas. Esta relación se puede poner como

$$\left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)\Phi^{n+1} = \left(I - \frac{\alpha}{2}D\right)\Phi^n - \delta\Lambda(\Phi^n)C\Phi^n$$

con

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\Lambda(\Phi^n) = \begin{bmatrix} \phi_0^n & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \phi_1^n & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \phi_2^n & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \phi_N^n \end{bmatrix}$$

$$\Phi^n = \begin{bmatrix} \phi_0^n \\ \phi_1^n \\ \vdots \\ \phi_N^n \end{bmatrix}$$

$$\alpha = \frac{\kappa\tau}{h^2} \quad \delta = \frac{\tau}{2h}$$

Tenemos finalmente

$$\begin{aligned} \Phi^{n+1} &= \left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1} \left(I - \frac{\alpha}{2}D\right)\Phi^n - \delta \left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1} \Phi^{nT} C \Phi^n \\ &= \left[2 \left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1} - I\right]\Phi^n - \delta \left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)^{-1} \Lambda(\Phi^n)C\Phi^n \end{aligned}$$

Resolviendo

$$\left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)\Psi^n = \Phi^n$$

y

$$\left(I + \frac{\alpha}{2}D\right)\chi^n = \Lambda(\Phi^n)C\Phi^n$$

tenemos la relación.

$$\Phi^{n+1} = 2\Psi^n - \Phi^n - \delta\chi^n$$

Vemos que tenemos que resolver dos sistemas lineales por paso de integración.

**Ejercicio:**

Resolver la ecuación de Burger con las condiciones iniciales  $\phi(x, 0) = -1$  si  $x > 0$  y  $\phi(x, 0) = 1$  si  $x < 0$  y las condiciones de contorno  $\phi(\pm L/2, t) = \mp 1$ . Tomar  $L = 10$  y  $\kappa = 1$ . Comparar con el resultado exacto para  $L \rightarrow \infty$

$$\phi(x, t) = \frac{F(x, t) - F(-x, t)}{F(x, t) + F(-x, t)}$$

donde

$$F(x, t) = \frac{1}{2} e^{t-x} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x-2t}{2\sqrt{t}} \right) \right\}$$

con  $\operatorname{erf}(x)$  la función de error.

Otra ecuación no lineal de interés es la ecuación de Korteweg-DeVries(KdV), que describe el comportamiento de solitones:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -6\rho \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3}$$

Al igual que en caso anterior tomamos el promedio de diferencias finitas progresivas y regresivas, calculando el término no lineal de forma regresiva. Las diferencias espaciales se toman centradas. Para la derivada tercera tenemos

$$\frac{d^3 f(x_2)}{dx^3} \simeq \frac{f_4 - 2f_3 + 2f_1 - f_0}{2h^3}$$

con lo que obtenemos para las diferencias progresivas

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\tau} = -6\rho_i^n \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n}{2h} - \frac{\rho_{i+2}^n - 2\rho_{i+1}^n + 2\rho_{i-1}^n - \rho_{i-2}^n}{2h^3}$$

y regresivas

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\tau} = -6\rho_i^n \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n}{2h} - \frac{\rho_{i+2}^{n+1} - 2\rho_{i+1}^{n+1} + 2\rho_{i-1}^{n+1} - \rho_{i-2}^{n+1}}{2h^3}$$

Tomando el promedio, tenemos

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\tau} = -6\rho_i^n \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i-1}^n}{2h} - \frac{1}{2} \left[ \frac{\rho_{i+2}^n - 2\rho_{i+1}^n + 2\rho_{i-1}^n - \rho_{i-2}^n}{2h^3} + \frac{\rho_{i+2}^{n+1} - 2\rho_{i+1}^{n+1} + 2\rho_{i-1}^{n+1} - \rho_{i-2}^{n+1}}{2h^3} \right]$$

Tenemos el sistema

$$(I + \beta F_1) \rho^{n+1} = (I - \beta F_1) \rho^n - 6\gamma \Lambda(\rho^n) G \rho^n$$

que se puede reorganizar como

$$\rho^{n+1} = (I + \beta F_1)^{-1} (I - \beta F_1) \rho^n - 6\gamma (I + \beta F_1)^{-1} \Lambda(\rho^n) G \rho^n$$

Al igual que en caso anterior, poniendo  $I - \beta F_1 = 2I - (I + \beta F_1)$  tenemos

$$\rho^{n+1} = \left[ 2(I + \beta F_1)^{-1} - I \right] \rho^n - 6\gamma(I + \beta F_1)^{-1} \Lambda(\rho^n) G \rho^n$$

con lo que tenemos la solución

$$\rho^{n+1} = 2\Phi^n - \rho^n - 6\gamma\chi^n$$

donde hemos definido

$$(I + \beta F_1) \Phi^n = \rho^n$$

$$(I + \beta F_1) \chi^n = \Lambda(\rho^n) G \rho^n$$

Vemos que cada paso de integración implica la resolución de dos sistemas de ecuaciones.

### Ejercicio:

Resolver la ecuación de KdV con las condiciones iniciales  $\rho \left( x = \pm \frac{L}{2} \right) = 0$  y condiciones de contorno periódicas. Comparar con la solución analítica  $\rho(x, t) = \cosh^{-2}(x - 4t)$ .

## 10.3. La ecuación de ondas

En el caso de la ecuación de ondas

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$

tenemos derivadas segundas tanto en el espacio como en el tiempo, por lo que la primera elección es tomar derivadas centradas tanto en el espacio como en el tiempo. Tomando un paso de integración temporal de  $\tau$  y un paso de integración espacial de  $h$ , y denominando  $u(x_0 + ih, t_0 + j\tau) = u_i^j$ , tenemos el esquema de integración

$$\frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{\tau^2} = c^2 \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{h^2}$$

Definiendo  $\lambda^2 = \frac{\tau^2 c^2}{h^2}$ , este esquema de integración se escribe como,

$$u_i^{j+1} = 2u_i^j - u_i^{j-1} - \lambda^2 (u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j) = 2(1 - \lambda^2)u_i^j + \lambda^2(u_{i+1}^j + u_{i-1}^j) - u_i^{j-1} \quad (10.6)$$

Tomemos el dominio de integración  $0 < x < l$  y  $t > 0$  y consideremos condiciones de contorno constantes:  $u(0, t) = u_0$ ,  $u(l, t) = u_l$  para  $t > 0$ . Aparte de estas condiciones de contorno, hay que proporcionar dos condiciones iniciales, ya que la ecuación es de segundo orden en el tiempo. Tomemos estas condiciones como

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



y

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = g(x)$$

para  $0 < x < l$ . En el caso de ondas en una cuerda, estas condiciones equivalen a proporcionar la posición y la velocidad de cada punto en el instante inicial. La relación dada por la Ec. 10.6 se puede escribir en forma matricial como

$$\mathbf{u}^{j+1} = A\mathbf{u}^j - \mathbf{u}^{j-1}$$

con

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \lambda^2 & 2(1-\lambda^2) & \lambda^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda^2 & 2(1-\lambda^2) & \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \lambda^2 & 2(1-\lambda^2) & \lambda^2 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

y

$$\mathbf{u}^j = \begin{bmatrix} u_0^j \\ u_1^j \\ \vdots \\ u_{N-1}^j \\ u_N^j \end{bmatrix}$$

Notemos que las filas primera y última de  $A$  lo único que hacen es mantener las condiciones de contorno de  $u_0^j$  y  $u_N^j$ . En el caso de que estas condiciones de contorno sean nulas ( $u(0,t) = u(l,t) = 0$  para  $t > 0$ ), estas dos filas se pueden suprimir junto con las columnas primeras y última de  $A$ . El primer vector es

$$\mathbf{u}^0 = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N) \end{bmatrix}$$

Las componentes de  $\mathbf{u}^1$  las podríamos tomar como  $u_i^1 = f(x_i) + \tau g(x_i)$  pero esto sería una aproximación de sólo primer orden en el tiempo, mientras que las derivadas centradas son de segundo orden, lo que produciría un deterioro de la precisión de la solución en comparación con la naturaleza de segundo orden del método. Un método de proporcionar condiciones iniciales de segundo orden en  $\tau$  es considerar el desarrollo en serie

$$u_i^1 = u_i^0 + \frac{\partial u(x_i,0)}{\partial t} \tau + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x_i,0)}{\partial t^2} \tau^2 + O(\tau^3)$$

De las condiciones iniciales tenemos

$$\frac{\partial u(x_i,0)}{\partial t} = g(x_i)$$

mientras que de la ecuación diferencial tenemos

$$\frac{\partial^2 u(x_i, 0)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x_i, 0)}{\partial x^2} = c^2 f''(x_i)$$

Por lo tanto, obtenemos para  $u_i^1$  la siguiente expresión en segundo orden en  $\tau$

$$u_i^1 = u_i^0 + g(x_i)\tau + \frac{1}{2}c^2\tau^2 f''(x_i)$$

En caso de que  $f(x_i)$  no esté disponible en forma continua sino sólo en la malla de puntos, o simplemente que la derivada analítica de  $f(x)$  sea compleja de calcular, podemos reemplazar  $f''(x_i)$  por su derivada centrada,

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

con lo que obtenemos

$$\begin{aligned} u_i^1 &= f(x_i) + g(x_i)\tau + \frac{\lambda^2}{2} [f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))] \\ &= (1 - \lambda^2)f(x_i) + \frac{\lambda^2}{2} [f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}))] + g(x_i)\tau \end{aligned}$$

De esta forma, el error del algoritmo es  $O(\tau^2 + h^2)$ .

### 10.3.1. Criterio de estabilidad

Introduciendo en la ecuación 10.6 una solución  $u_j^n = A^n e^{ikjh}$  tenemos

$$\xi^2 - 2\xi(1 - \lambda^2 + \lambda^2 \cos kh) + 1 = 0$$

que tiene como soluciones

$$\xi = 1 + \lambda^2(\cos kh - 1) \pm \sqrt{(1 + \lambda^2(\cos kh - 1))^2 - 1}$$

El término fuera de la raíz está comprendido entre 1 y  $1 - 2\lambda^2$ . Nunca puede hacerse mayor que 1 en valor absoluto si  $\lambda < 1$ , pero puede hacerse negativo y mayor que la unidad en valor absoluto si  $\lambda > 1$ . La raíz es siempre un número imaginario si  $\lambda < 1$ , ya que el primer término es siempre inferior a la unidad. Sin embargo, puede hacerse mayor que la unidad en valor absoluto si  $\lambda > 1$ . Por lo tanto, se cumple que  $|\xi| < 1$  si  $\lambda < 1$  o lo que es lo mismo  $c\tau < h$ , que nos dice que para que la solución sea estable, la distancia que se propaga la onda durante un paso de integración temporal debe de ser menor que el paso de integración espacial.

## 10.4. Las ecuaciones de Poisson y de Laplace

En Electrostática, la ecuación de Poisson en tres dimensiones liga el potencial electrostático con la densidad de carga:

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2\Phi(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Phi(x,y,z)}{\partial z^2} = -\frac{\rho(x,y,z)}{\epsilon_0}$$

Cuando la densidad de carga es nula, esta ecuación se convierte en la ecuación de Laplace:

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = 0$$

Vamos a considerar el problema en dos dimensiones

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

definido en un dominio rectangular  $a \leq x \leq b$ ,  $c \leq y \leq d$ . Tomamos condiciones de contorno de Dirichlet sobre el contorno

$$\Phi(x,y) = g(x,y)$$

Para resolver el sistema discretizamos cada una de las coordenadas espaciales. Vamos a suponer en principio pasos de integración diferentes en cada una de las coordenadas. Denominemos  $h$  el paso de integración en la coordenada  $x$  y  $k$  al paso de integración en la coordenada  $y$ . Tendremos  $M$  subintervalos en la coordenada  $x$  ( $M + 1$  puntos)

$$h = \frac{b-a}{M+1}$$

y  $N$  subintervalos en la coordenada  $y$  ( $N + 1$  puntos)

$$k = \frac{d-c}{N+1}$$

Tomamos derivadas centradas en el espacio en ambas coordenadas, con lo que tendremos un método con error  $O(h^2 + k^2)$ . La ecuación en diferencias queda como

$$\frac{\Phi(x_{i+1},y_j) - 2\Phi(x_i,y_j) + \Phi(x_{i-1},y_j))}{h^2} + \frac{\Phi(x_i,y_{j+1}) - 2\Phi(x_i,y_j) + \Phi(x_i,y_{j-1}))}{k^2} = f(x_i,y_j) \quad (10.7)$$

Las condiciones de contorno se escriben como

$$\begin{aligned} \Phi(x_0,y_j) &= g(x_0,y_j) \\ \Phi(x_M,y_j) &= g(x_M,y_j) \\ \Phi(x_i,y_0) &= g(x_i,y_0) \\ \Phi(x_i,y_N) &= g(x_i,y_N) \end{aligned}$$

para  $i = 0, 1, \dots, M, j = 0, 1, \dots, N$ . Podemos reescribir la ec. 10.7 como

$$2 \left[ \left( \frac{h}{k} \right)^2 + 1 \right] \Phi(x_i, y_j) - (\Phi(x_{i+1}, y_j) + \Phi(x_{i-1}, y_j)) - \left( \frac{h}{k} \right)^2 (\Phi(x_i, y_{j+1}) + \Phi(x_i, y_{j-1})) = h^2 f(x_i, y_j) \quad (10.8)$$

Este es un sistema lineal con  $(N-1) \times (M-1)$  incógnitas. Es conveniente reordenar los pares  $(i, j)$  de forma que la matriz de orden  $(N-1)^2 \times (M-1)^2$  sea una matriz de 5 bandas. Esto se consigue redefiniendo los índices  $(i, j) \rightarrow s = i + (M-1-j)(N-1)$  para  $i$  entre 1 y  $M-1$  y  $j$  entre 1 y  $N-1$ . Alternativamente  $s = i + (j-1)(N-1)$  (y ambas expresiones reemplazando  $i$  por  $j$ ). La cuestión es que el índice varíe más rápidamente a lo largo del eje  $y$  que del eje  $x$  (o del eje  $x$  que del eje  $y$ ) y que los índices sean consecutivos. Vamos a tomar en adelante la primera convención. De esta forma, ecuación ?? queda como

$$2 \left[ \left( \frac{h}{k} \right)^2 + 1 \right] \Phi_s - (\Phi_{s+1} + \Phi_{s-1}) - \left( \frac{h}{k} \right)^2 (\Phi_{s-(N-1)} + \Phi_{s+(N-1)}) = h^2 f_s$$

con lo que tenemos una diagonal principal con todos los elementos iguales a

$$2 \left[ \left( \frac{h}{k} \right)^2 + 1 \right]$$

con las dos subdiagonales superior e inferior con todos los elementos iguales a  $-1$  y dos bandas separadas  $N-1$  elementos arriba y abajo también con todos sus elementos iguales a  $-1$ .

### Ejemplo:

Consideremos un cuadrado dieléctrico de 4 cm de lado donde dos bordes están a tierra (0 V) y el vértice opuesto está a 100 V. Calcular La distribución de potencial, suponiendo que la densidad de carga es nula.

Tenemos la ecuación de Laplace y como condiciones de contorno  $\Phi(0, x) = \Phi(y, 0) = 0$ .  $\Phi(4, x) = 25x$ ,  $\Phi(y, 4) = 25y$ , suponiendo que satisface la ley de Ohm. Tomamos  $h = k = 1$  cm, con lo que  $M = N = 4$  y la dimensión del sistema es 9. Tenemos que calcular el potencial en 9 puntos  $(x_i, y_j)$ . Con la convención anterior tenemos  $(x_1, y_1) = P_7$ ,  $(x_2, y_1) = P_8$ ,  $(x_3, y_1) = P_9$ ,  $(x_1, y_2) = P_4$ ,  $(x_2, y_2) = P_5$ ,  $(x_3, y_2) = P_6$ ,  $(x_1, y_3) = P_1$ ,  $(x_2, y_3) = P_2$ ,  $(x_3, y_3) = P_3$ , y las ecuaciones en cada uno de estos puntos son

$$\begin{array}{lll} P1 : & 4\Phi_1 - \Phi_2 - \Phi_4 = & \Phi_{0,3} + \Phi_{1,4} \\ P2 : & 4\Phi_2 - \Phi_3 - \Phi_1 = & \Phi_{2,4} \\ P3 : & 4\Phi_3 - \Phi_2 - \Phi_6 = & \Phi_{4,3} + \Phi_{3,4} \\ P4 : & 4\Phi_4 - \Phi_5 - \Phi_1 - \Phi_7 = & \Phi_{0,2} \\ P5 : & 4\Phi_5 - \Phi_6 - \Phi_4 - \Phi_2 - \Phi_8 = & 0 \\ P6 : & 4\Phi_6 - \Phi_5 - \Phi_3 - \Phi_9 = & \Phi_{4,2} \\ P7 : & 4\Phi_7 - \Phi_8 - \Phi_4 = & \Phi_{0,1} + \Phi_{1,0} \\ P8 : & 4\Phi_8 - \Phi_9 - \Phi_7 - \Phi_5 = & \Phi_{2,0} \\ P9 : & 4\Phi_9 - \Phi_8 - \Phi_6 = & \Phi_{3,0} + \Phi_{4,1} \end{array}$$

Las condiciones de contorno dan  $\Phi_{1,0} = \Phi_{2,0} = \Phi_{3,0} = \Phi_{0,1} = \Phi_{0,2} = \Phi_{0,3} = 0$ ,  $\Phi_{2,4} = \Phi_{4,2} = 50$ ,  $\Phi_{3,4} = \Phi_{4,3} = 75$ . El sistema lineal asociado es

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \\ \Phi_7 \\ \Phi_8 \\ \Phi_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 \\ 50 \\ 150 \\ 0 \\ 0 \\ 50 \\ 0 \\ 0 \\ 25 \end{bmatrix}$$

Este sistema se puede resolver por el método  $LU$  ya que la matriz está bien condicionada.

Cuando el sistema es muy grande es mejor utilizar el método iterativo de Gauss-Seidel. En este método ponemos

$$\Phi(x_i, y_j) = \frac{1}{2 \left[ \left( \frac{h}{k} \right)^2 + 1 \right]} \left[ (\Phi(x_{i+1}, y_j) + \Phi(x_{i-1}, y_j)) + \left( \frac{h}{k} \right)^2 (\Phi(x_i, y_{j+1}) + \Phi(x_i, y_{j-1})) + h^2 f(x_i, y_j) \right]$$

y ponemos todos los potenciales a cero salvo las condiciones de contorno. Calculamos cada  $\Phi(x_i, y_j)$  con las condiciones iniciales, que llamamos  $\Phi^{(0)}(x_i, y_j)$  comenzando por las capas exteriores. En cada iteración recalculamos  $\Phi^{(k)}(x_i, y_j)$  con los valores obtenidos en la iteración anterior  $\Phi^{(k-1)}(x_i, y_j)$  hasta que en dos iteraciones sucesivas  $|\Phi^{(k+1)}(x_i, y_j) - \Phi^{(k)}(x_i, y_j)| < \varepsilon$ , donde  $\varepsilon$  es una tolerancia preestablecida .

