SOLUCIÓN NUMÉRICA DE UNA ECUACIÓN DIFERENCIAL DE TIPO CALOR: LOS ORÍGENES DEL MÉTODO CRANK-NICOLSON

ERIKA MARCELA ARIZA GARCÍA
LEIDY KATHERINE BAYONA ARDILA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE MATEMÁTICAS
BUCARAMANGA
2017

SOLUCIÓN NUMÉRICA DE UNA ECUACIÓN DIFERENCIAL DE TIPO CALOR:
LOS ORÍGENES DEL MÉTODO CRANK-NICOLSON

ERIKA MARCELA ARIZA GARCÍA

LEIDY KATHERINE BAYONA ARDILA

Trabajo de Grado para optar el título de
MATEMÁTICAS

Director

JULIO CÉSAR CARRILLO ESCOBAR
Ph.D. en Matemáticas

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE MATEMÁTICAS

BUCARAMANGA

2017

Dedicatoria y Agradecimientos

- A Dios por ser maravilloso y darnos la fortaleza y entrega para terminar lo que parecía inalcanzable.

- Gracias a nuestras madres por su amor incondicional y estar siempre dispuestas a acompañarnos en cada larga y agotadora noche de estudio.

- A nuestros hermanos por su acompañamiento y constante motivación.

- A nuestro director de tesis el profesor Julio Cesar Carrillo por su compromiso, dedicación y paciencia en nuestro proyecto.

- A todos nuestros docentes que inculcaron en nosotras el amor a las matemáticas y a esta profesión.

- Un agradecimiento sincero y especial a Daniel Vásquez y Rodolfo Guaitero Mejía por su amor y apoyo incondicional en cada una de las etapas de este largo y arduo camino universitario.

- A mi padre Luis Francisco Ariza que desde el cielo siempre me acompaña y me guía en la realización de cada uno de mis proyectos.

- A Luna por ser una fuente de motivación y alegría en mi vida.

Tabla de Contenido

Índice de figuras

Algoritmos

RESUMEN

TÍTULO: SOLUCIÓN NUMÉRICA DE UNA ECUACIÓN DIFERENCIAL DE TIPO CALOR: LOS ORÍGENES DEL MÉTODO CRANK-NICOLSON[1]

AUTORES: ERIKA MARCELA ARIZA GARCÍA Y LEIDY KATHERINE BAYONA ARDILa[2]

PALABRAS CLAVES: *DISCRETIZACIÓN DE UN PROBLEMA PARABÓLICO, DIFERENCIAS FINITAS, MÉTODO DE CRANK-NICOLSON.*

DESCRIPCIÓN:

La solución clásica de algunas ecuaciones diferenciales se puede encontrar mediante métodos clásicos de solución como el método de separación de variables, transformada de Fourier, entre otros. En general, no es posible encontrar soluciones analíticas razón por la cuál desde el siglo XIV, se han venido desarrollando métodos numéricos que han proporcionado técnicas eficaces para la solución numérica o aproximada de este tipo de problemas físicos, con previo conocimiento de la existencia de solución. Un tipo de estos métodos numéricos reemplazan las derivadas ordinarias o parciales que aparecen en el problema por sus correspondientes esquemas de diferencias finitas, lo cual permite obtener la solución numérica. Los criterios que son importantes al momento de medir la precisión en este tipo de solución numérica son los de convergencia y la estabilidad en la solución numérica del problema.

El método de Crank-Nicolson es un método numérico que utiliza diferencias finitas para la solución numérica de ecuaciones en derivadas parciales, como la ecuación del calor. Se trata de un método numérico de segundo orden en el tiempo y el espacio que es numéricamente estable. Los orígenes de este método se dan a principios del siglo XX, con los trabajos de D.R. Hartree, H.O.W. Richardson, John Crank y Phyllis Nicolson, entre otros. En este trabajo se estudia la solución numérica del problema parabólico no

[2]Trabajo de grado.

[2]Facultad de Ciencias. Escuela de Matemáticas. Director Julio C. Carrillo E. Ph.D.

lineal que dió origen al método de Crank-Nicolson.

ABSTRACT

TITLE: NUMERICAL SOLUTION OF A DIFFERENTIAL EQUATION OF TYPE HEAT: THE ORIGINS OF METHOD CRANK-NICOLSON[3]

AUTHORS: ERIKA MARCELA ARIZA GARCÍA AND LEIDY KATHERINE BAYONA ARDILA[4]

KEYWORDS: *DISCRETIZATION OF A PARABOLIC PROBLEM, FINITE DIFFERENCES, CRANK-NICOLSON METHOD.*

DESCRIPTION:

The classic solution of some differential equations can be found by classical methods of solution such as the method of separation of variables, Fourier transform, among others. In general, it is not possible to find analytical solutions reason why since the XIV century, numerical methods have been developed that have provided efficient techniques for the numerical or approximate solution of this type of physical problems, with previous knowledge of the existence of solution . A type of these numerical methods replace the ordinary or partial derivatives that appear in the problem by their corresponding finite difference schemes, which allows to obtain the numerical solution. The criteria that are important when measuring accuracy in this type of numerical solution are those of convergence and stability in the numerical solution of the problem.

The Crank-Nicolson method is a numerical method that uses finite differences for the numerical solution of partial differential equations, such as the heat equation. It is a numerical method of second order in time and space that is numerically stable. The origins of this method are given at the beginning of the 20th century, with the work of D.R. Hartree, H.O.W. Richardson, John Crank and Phyllis Nicolson, among others. In this paper we study the numerical solution of the non-linear parabolic problem that gave rise to the Crank-Nicolson method

[4]Bachelor Thesis.

[4]Facultad de Ciencias. Escuela de Matemáticas. Director Julio C. Carrillo E. Ph.D.

INTRODUCCIÓN

Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, se originan en la descripción de una gran cantidad de fenómenos físicos del mundo real, tales como difusión de calor y dinámica de gases. En este trabajo se estudia la solución numérica del siguiente problema de tipo parabólico no lineal del problema de valor inicial y con condiciones en la frontera:

$$
\begin{aligned}
u_t(x,t) - u_{xx}(x,t) &= -pv_t(x,t), && 0 < x < 1,\ t > 0,\\
v_t(x,t) &= -qv(x,t)e^{-r/u(x,t)}, && 0 < x < 1,\ t > 0,\\
u(x,0) = f_1(x), v(x,0) &= f_2(x), && 0 \leq x \leq 1,\\
u_x(0,t) = H_1(u(0,t)), u_x(1,t) &= H_2(u(1,t)), && t > 0,
\end{aligned}
$$

donde $u(x,t)$ es la función temperatura, $v(x,t)$ es la fuente o término de generación volumétrica, p, q y r son constantes positivas dadas y H_1, H_2, f_1 y f_2 son funciones dadas.

Ecuaciones diferenciales parciales como la que involucra este problema, surgen en problemas de flujo de calor cuando existe generación interna de éste con el medio [4]; en particular, la segunda ecuación diferencial parcial representa la tasa de generación interna de calor cuando éste es producido por una reacción química que en cada punto depende de la tasa de temperatura local [4, 3].

En la primera ecuación diferencial parcial, el término no lineal $pv_t(x,t)$ y la naturaleza empírica de la función de transferencia de calor de superficie $H_1(u)$, en muchos casos hacen que las técnicas como el de variables separables, no sean apropiadas [5, 11]. Por tal motivo, Hartree propuso dos nuevos métodos numéricos para dar solución aproximada a una ecuación diferencial parcial en dos variables [5, 4]. El primer método, Hartree lo obtuvo al reemplazar las primeras derivadas parciales en el tiempo por sus correspondientes diferencias finitas centrales, lo cual da origen a una ecuación diferencial ordinaria en x que puede ser resuelta de manera exacta en algunas casos, o de manera aproximada [5, 4]. En el segundo método, Hartree reemplaza la segunda derivada parcial en x por su diferencia finita central, con lo cual se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en t [11, 5]. En el Capitulo 2 de este trabajo se presentan estos dos métodos de solución aproximada propuestos por Hartree.

En el Capítulo 3, se estudia el método de Crank-Nicolson en la solución numérica del problema propuesto. A diferencia de Hartree, el método numérico propuesto por Crank y Nicolson reemplazan a su vez las derivadas parciales en el espacio y el tiempo por sus correspondientes diferencias finitas centrales, lo cual permite obtener la solución aproximada del problema a través de la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas.

1. PRELIMINARES

En este capítulo se presentan algunas nociones, conceptos y resultados que son importantes en las ideas originales que fundamentan al método de Crank-Nicolson, las cuales se encuentran en [2, 8, 10].

1.1. Aproximación en diferencias Finitas

Dada la dificultad de encontrar la solución exacta de ciertos problemas en ecuaciones en derivadas parciales, es usual que se recurra a buscarles una solución numérica o aproximada. El método de diferencias finitas es un método numérico que permite encontrar la solución numérica aproximada de algunos de estos problemas, al reemplazar las derivadas del problema por sus correspondientes aproximaciones en diferencias finitas. Esto da usualmente como resultado un sistema de ecuaciones lineales que se puede resolver mediante algoritmos computacionales. A fin de aclarar estos aspectos, primero se considera el problema de la aproximación de las derivadas de una función mediante fórmulas de diferencias finitas, lo cual se hace mediante los valores de la función misma en puntos discretos de su dominio. Este tipo de estrategia proporciona además una base para el desarrollo posterior de métodos de diferencias finitas para resolver problemas en ecuaciones en derivadas parciales, también se considera el orden de precisión de estas aproximaciones.

Las funciones involucradas en este tipo de problemas, se considera que son de una variable que son suficientemente derivables y que están bien definidas en un intervalo que contiene un punto de interés particular x^*. En primera medida, se busca aproximar $u'(x^*)$ mediante diferencias finitas basadas solamente en valores de u en un número finito de puntos cercanos a x^*.

Sea u una función de una variable que tiene derivadas continuas hasta de orden n en un intervalo cerrado $[a, b]$, es decir, que $u \in C^n[a, b]$. Se buscan aproximaciones de $u'(x^*)$ mediante diferencias finitas basada sólo en valores de u en un número finito de puntos cercanos de $x^* \in [a, b]$. En tal caso, se definen

$$D_+u(x^*) = \frac{u(x^*+h) - u(x^*)}{h}, \tag{1.1}$$

$$D_-u(x^*) = \frac{u(x^*) - u(x^*-h)}{h}, \tag{1.2}$$

para algún $h > 0$ pequeño, de tal manera que $x^* - h$ y $x^* + h$ estén en el intervalo $[a, b]$.

Estas dos representaciones son motivadas por la definición de las primeras derivadas laterales de u en x^*. Se puede observar que $D_+(x^*)$ representa la pendiente de la recta secante a la gráfica de la función u en los puntos que determinan x^* y $x^* + h$ (ver la Figura 1.1). La expresión (1.1) es una aproximación de la primera derivada lateral de u en x^*, ya que u se evalúa sólo para valores de $x \geq x^*$. Igual interpretación se puede dar para (1.2). Cada una de estas expresiones da una aproximación exacta de primer orden a $u'(x^*)$, lo cual significa que el tamaño en este error es aproximadamente proporcional a h.

Otra posibilidad de aproximar $u'(x^*)$ es utilizar la aproximación en diferencias finitas centrales

$$D_0u(x^*) \equiv \frac{u(x^*+h) - u(x^*-h)}{2h} = \frac{1}{2}\left(D_+u(x^*) + D_-(x^*)\right), \tag{1.3}$$

la cual es la pendiente de la recta secante a la gráfica de u en los puntos que determinan x^*-h y x^*+h. Esta formula es simplemente la media de las dos aproximaciones laterales definidas anteriormente. Como se puede observar en la Figura 1.1, $D_0u(x^*)$ es la mejor aproximación que cualquiera de las dos aproximaciones laterales. De hecho, da una aproximación de segundo orden de $u'(x^*)$ donde el error es proporcional a h^2 y por lo tanto es mucho menor que el error en una aproximación de primer orden cuando h es pequeño.

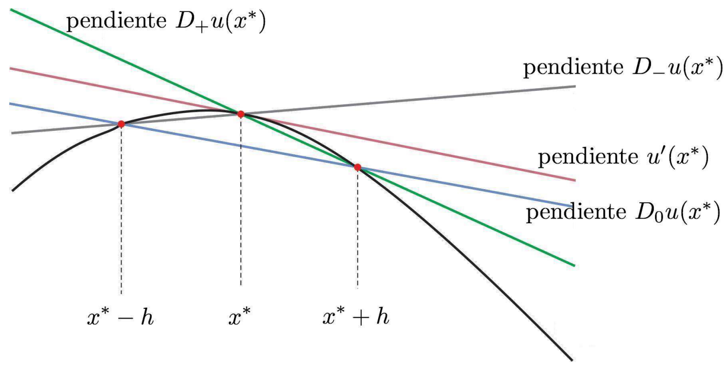

Figura 1.1: Aproximaciones de $u'(x^*)$ interpretadas como la pendiente de rectas secantes.

Otras aproximaciones de $u'(x^*)$ son también posibles, por ejemplo,

$$D_3 u(x^*) \equiv \frac{1}{6h}\left[2u(x^*+h) + 3u(x^*) - 6u(x^*-h) + u(x^*-2h)\right]. \tag{1.4}$$

Esta aproximación $u'(x^*)$ es de tercer orden, debido a que el error es proporcional a h^3 cuando h es pequeño.

1.1.1. Obtención de las aproximaciones en diferencias finitas

Supongamos que se quiere obtener una aproximación de diferencias finitas de u' en un determinado conjunto de puntos. Se puede utilizar el polinomio de Taylor para obtener una fórmula apropiada, usando el método de el método de coeficientes indeterminados.

Estamos interesados en hallar una aproximación a la primera derivada con un método que posea la mejor precisión posible con el menor esfuerzo posible.

Sea $u(x)$ definida en el intervalo (a,b), una función de clase $C^n(a,b)$, $n \in \mathbb{N}$. Por el teorema de Taylor, alrededor del punto $x \in (a,b)$, se tiene,

$$u(x) = u(a) + u'(a)h + u''(a)\frac{h^2}{2} + u'''(a)\frac{h^3}{6} + \ldots + u^n(a)\frac{h^n}{n!} + R_n(x;a), \tag{1.5}$$

donde $R_n(x;a) = \dfrac{h^{n+1}}{(n+1)!}u^{n+1}(\xi)$, con $\xi \in (a,x)$.

- **Diferencias finitas progresivas**

Aplicando (1.5) con $n = 2$, $x = x^* + h$ y $h > 0$, se tiene que

$$u\left(x^* + h\right) = u\left(x^*\right) + u'\left(x^*\right)h + u''\left(\xi_p\right)\frac{h^2}{2}, \tag{1.6}$$

para algún ξ_p en el intervalo abierto $(x^*,\, x^* + h)$. De esta ecuación se tiene que la primera derivada de u en x^* se puede dar como:

$$u'\left(x^*\right) = \frac{u\left(x^* + h\right) - u\left(x^*\right)}{h} - \frac{h}{2}u''\left(\xi\right), \tag{1.7}$$

de lo cual se tiene que la estimación de u' mediante diferencias finitas progresivas es de primer orden con un error de truncamiento está determinado por

$$\mathcal{R}_p\left(h\right) = \frac{h}{2}u''\left(\xi_p\right),$$

por lo cual (1.7) se convierte en

$$u'\left(x^*\right) = \frac{u\left(x^* + h\right) - u\left(x^*\right)}{h} - \mathcal{R}_p\left(h\right).$$

En efecto, dado que

$$|u''\left(\xi_p\right)| \leq \|u^{''}\|_\infty,$$

donde $\|u''\|_\infty = \sup_{x\in[a,b]}|u''\left(x\right)|$ representa la norma del máximo de u'' en $[a, b]$, se sigue que

$$\left|u'\left(x^*\right) - \frac{u\left(x^* + h\right) - u\left(x^*\right)}{h}\right| \leq \frac{h}{2}\|u''\|_\infty.$$

De esta manera se tiene entonces el siguiente resultado.

Teorema 1. *Sea $u\left(x\right)$ una función que tiene hasta segundas continuas en el intervalo $[a, b]$. Si $x^* \in (a, b)$ y para $h > 0$ se tiene que $x^* + h$ está en $[a, b]$ entonces*

$$u'\left(x^*\right) = \frac{u\left(x^* + h\right) - u\left(x^*\right)}{h} + \mathcal{O}(h).$$

Ejemplo. Consideremos el siguiente problema de valor inicial y de valor en la frontera.

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = 0 \quad 0 < x < 2, \quad 0 < t; \\ u(0,t) = u(2,t) = 0, \quad 0 < t, \\ u(x,0) = \operatorname{sen} 2\pi x, \quad 0 \leq x \leq 2. \end{cases} \tag{1.8}$$

Sea $h = 0{,}4$ y $k = 0{,}1$ y comparemos los resultados obtenidos mediante la solución numérica y la solución analítica $u(x,t) = \exp(-4\pi^2 t)\sin(2\pi x)$. Tomemos m, h, y k enteros positivos, ademas $h = \dfrac{2}{m}$. Los nodos para este caso son (x_i, t_j) donde $x_i = ih$ para $i = 0, 1, \ldots, m$, y $t_j = jk$ para $j = 0, 1, \ldots$. Al aplicar diferencias progresivas a nuestra ecuación tenemos:

$$u_t\left(x_i, t_j\right) = \frac{u\left(x_i, t_{j+1}\right) - u\left(x_i, t_j\right)}{k} - \frac{k}{2} u_{tt}\left(x_i, \mu_j\right),$$

para alguna $\mu_j \in \left(t_j, t_{j+1}\right)$.

$$u_{xx}\left(x_i, t_j\right) = \frac{u\left(x_{i+1}, t_j\right) - 2u\left(x_i, t_j\right) + u\left(x_{i-1}, t_j\right)}{h^2} - \frac{h^2}{12} u^{(4)}\left(\xi_i, t_j\right),$$

donde $\xi_i \in \left(x_i, x_{i+1}\right)$.

La ecuación diferencial parcial parabólica (1.8) para los nodos interiores (x_i, t_j) para todo $i = 1, 2, \ldots, m-1$ y $j = 1, 2, \ldots$ se convierte en,

$$\frac{u\left(x_i, t_{j+1}\right) - u\left(x_i, t_j\right)}{k} - \frac{u\left(x_{i+1}, t_j\right) - 2u\left(x_i, t_j\right) + u\left(x_{i-1}, t_j\right)}{h^2} = 0.$$

Si tomamos $u_i^j = \left(x_i, t_j\right)$, la ecuación anterior se convierte en

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

$$u_i^{j+1} = \left(1 - \frac{2k}{h^2}\right) u_i^j + \frac{k}{h^2}\left(u_{i+1}^j + u_{i-1}^j\right). \tag{1.9}$$

Ahora aplicamos las condiciones iniciales, es decir, $u_i^0 = 2\pi x$ para toda $i = 0, 1, \ldots, m$.

Por otra parte con las condiciones de frontera se tiene que $u_0^j = 0$, lo que nos ayuda a determinar los elementos de la forma u_i^1, si aplicamos este procedimiento de manera iterativa se obtienen los valores de $u_i^2, u_i^3, \ldots$.

El sistema de ecuaciones lo podemos escribir de forma matricial así:

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

donde $\lambda = \dfrac{k}{h^2}$. Empleando

$$u_i^0 = \left(\operatorname{sen} 2\pi x_1, \operatorname{sen} 2\pi x_2, \ldots, \operatorname{sen} 2\pi x_{m-1}\right)^T$$

y

$$u_0^j = (0, 0, \ldots, 0)^T,$$

para todo $j = 1, 2, \ldots$, entonces la solución aproximada está dada por

$$U^j = AU^{j-1},$$

para toda $j = 1, 2, \ldots$, por tanto, u^jse obtiene para u^{j-1}.

Ahora veamos la aproximación para un perfil de temperatura en $t = 0{,}3$, en la gráfica se puede observar la oscilación que presenta la solución progresiva con respecto a la solución exacta.

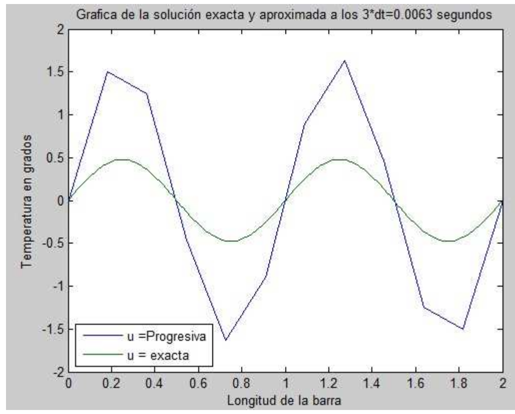

Figura 1.2: Perfil de Temperatura para $t = 0,3$

- **Diferencias finitas regresivas**

Aplicando nuevamente (1.5) con $n = 2$, $x = x^* - h$ y $h > 0$ se tiene que

$$u(x^* - h) = u(x^*) - u'(x^*)\,h + u''(\xi_r)\frac{h^2}{2} \tag{1.10}$$

donde $\xi_r \in (x^* - h, x^*)$. De este resultado se sigue que la primera derivada se puede escribir de la forma

$$u'(x^*) = \frac{u(x^*) - u(x^* - h)}{h} - \frac{h}{2}u''(\xi_r), \tag{1.11}$$

de lo cual se sigue que la aproximación de $u'(x^*)$ mediante diferencia finitas regresivas es de primer orden y con un error de truncamiento dado por

$$\mathcal{R}_r(h) = u''(\xi_r)\frac{h}{2},$$

donde $\xi \in (x^* - h, x^*)$.

Por esto, (1.11) se convierte en

$$u'(x^*) = \frac{u(x^*) - u(x^* - h)}{h} + \mathcal{R}_r(h).$$

Al igual que en el caso anterior, dado que $|u''(\xi_r)| \leq \|u''\|_\infty$, se tiene el siguiente resultado.

Teorema 2. *Sea $u(x)$ una función que tiene hasta segundas derivadas continuas en el intervalo $[a, b]$. Si $x^* \in (a, b)$ y para $h > 0$ se tiene que $x^* - h$ está en $[a, b]$ entonces*

$$u'(x^*) = \frac{u(x^*) - u(x^* - h)}{h} + \mathcal{O}(h).$$

Ejemplo. Consideremos el siguiente problema de valor inicial y de frontera.

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = 0 \quad 0 < x < 2, \quad 0 < t; \\ u(0,t) = u(2,t) = 0, \quad 0 < t, \\ u(x,0) = \operatorname{sen} 2\pi x, \quad 0 \leq x \leq 2. \end{cases} \tag{1.12}$$

De manera análoga al ejemplo anterior definamos m, h, y k enteros positivos, ademas $h = \dfrac{2}{m}$. Los nodos para éste caso son (x_i, t_j) donde $x_i = ih$ para $i = 0, 1, \ldots, m$, y $t_j = jk$ para $j = 0, 1, \ldots$. Al aplicar diferencias regresivas a nuestra ecuación para los nodos interiores, es decir, $i = 1, 2, \ldots, m-1$, y $j = 1, 2, \ldots,$ tenemos:

$$\frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})}{k} - \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{h^2} = 0.$$

Si tomamos $u_i^j = (x_i, t_j)$, la ecuación anterior se convierte en

$$u_i^j - u_i^{j-1} = \frac{k}{h^2}\left[u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j\right], \tag{1.13}$$

$$u_i^{j-1} = \left(1 + \frac{2k}{h^2}\right)u_i^j - \frac{k}{h^2}\left(u_{i+1}^j + u_{i-1}^j\right) \tag{1.14}$$

Ahora aplicamos las condiciones iniciales, es decir, $u_i^0 = 2\pi x$ para toda $i = 0, 1, \ldots, m$.

Por otra parte con las condiciones de frontera se tiene que $u_0^j = 0$, lo que nos ayuda a determinar los elementos de la forma u_i^1, si aplicamos este procedimiento de manera iterativa se obtienen los valores de $u_i^2, u_i^3, \ldots$, para ir construyendo la solución.

El sistema de ecuaciones lo podemos escribir de forma matricial así:

$$A = \begin{bmatrix} (1+2\lambda) & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ -\lambda & (1+2\lambda) & -\lambda & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -\lambda \\ 0 & \cdots & 0 & -\lambda & (1+2\lambda) \end{bmatrix}.$$

donde $\lambda = \dfrac{k}{h^2}$. Empleando

$$u_i^0 = (\operatorname{sen} 2\pi x_1, \operatorname{sen} 2\pi x_2, \ldots, \operatorname{sen} 2\pi x_{m-1})^T$$

y

$$u_0^j = (0, 0, \ldots, 0)^T$$

para todo $j = 1, 2, \ldots$.

Por tanto la solución aproximada ésta dada por

$$AU^j = U^{j-1},$$

para todo $j = 1, 2, \ldots$.

Así, se resuelve un sistema lineal para encontrar u^j a partir de u^{j-1}. Como $\lambda > 0$, la matriz A es definida positiva y de diagonal estrictamente dominante, lo que garantiza la existencia de la solución del sistema.

Ahora veamos las soluciones halladas por diferencias finitas y solución exacta, los que nos lleva a concluir que la solución aproximada decrece con mayor facilidad .

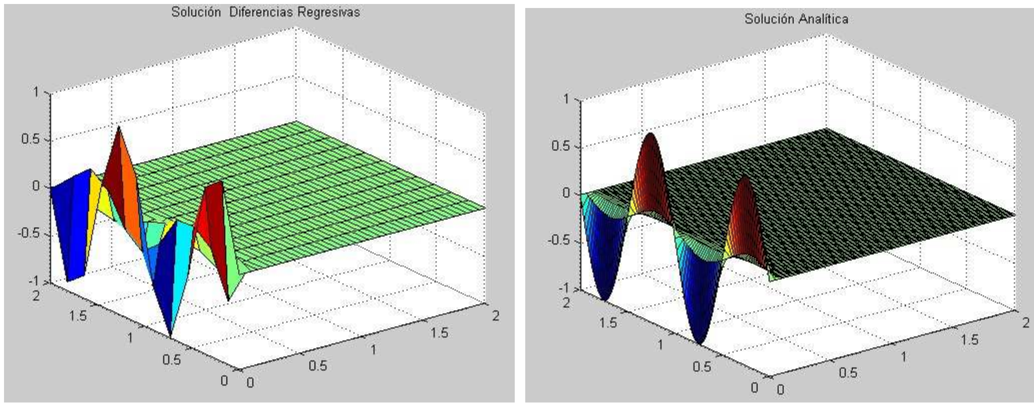

Figura 1.3: Solución Diferencias Regresivas vs Solución Analítica

Ahora veamos la aproximación de un perfil de temperatura para un instante $t = 0{,}3$, donde el error disminuye, lo que nos con lleva a concluir que es una mejor aproximación que la aproximación por diferencias progresivas.

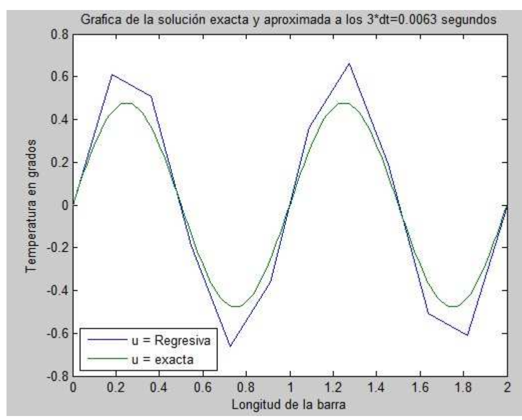

Figura 1.4: Perfil de Temperatura para $t = 0{,}3$

- **Diferencias finitas centrales**

Aplicando (1.5) con $n = 3$, $x = x^* + h$ y $x = x^* - h$, donde $h > 0$, entonces existen $\xi_r \in (x^* - h, x^*)$ y $\xi_p \in (x^*, x^* + h)$ tales que

$$u(x^* + h) = u(x^*) + u'(x^*)\,h + \frac{h^2}{2}u''(x^*) + \frac{h^3}{6}u'''(\xi_p) \qquad (1.15)$$

y

$$u\left(x^{*}-h\right)=u\left(x^{*}\right)-u'\left(x^{*}\right)h+\frac{h^{2}}{2}u''\left(x^{*}\right)-\frac{h^{3}}{6}u'''\left(\xi_{r}\right), \tag{1.16}$$

donde los errores de truncamiento están dados respectivamente como

$$\mathcal{R}_{r}\left(h\right)=\frac{h^{3}}{6}u'''\left(\xi_{r}\right), \qquad \mathcal{R}_{p}\left(h\right)=\frac{h^{3}}{6}u'''\left(\xi_{p}\right).$$

Restando (1.15) y (1.16) se obtiene

$$u\left(x^{*}+h\right)-u\left(x^{*}-h\right)=2hu'\left(x^{*}\right)-\left[\mathcal{R}_{p}\left(h\right)+\mathcal{R}_{r}\left(h\right)\right].$$

Dado que la función u''' es continua en el intervalo cerrado entre ξ_r y ξ_p, el teorema del valor intermedio garantiza que existe un ξ_c entre ξ_r y ξ_p tal que

$$\frac{u'''(\xi_r)+u'''(\xi_p)}{2}=u'''(\xi_c).$$

De esta manera se tiene que

$$u'\left(x^{*}\right)=\frac{u\left(x^{*}+h\right)-u\left(x^{*}-h\right)}{2h}-\mathcal{R}_{c}\left(h\right),$$

donde

$$\mathcal{R}_c(h)=-\frac{h^2}{3}u'''(\xi_c).$$

Dado que

$$|\mathcal{R}_c(h)|\leq\frac{h^2}{3}\|u'''\|_\infty,$$

entonces

$$\left|u'\left(x^{*}\right)-\frac{u\left(x^{*}+h\right)-u\left(x^{*}-h\right)}{2h}\right|\leq\frac{h^2}{3}\|u'''\|_\infty,$$

de lo cual se obtiene el siguiente resultado para las diferencias centrales para la primera derivada.

Teorema 3. *Sea $u\left(x\right)$ una función que tiene hasta terceras derivadas continuas en el intervalo $[a,b]$. Si $x^{*}\in(a,b)$ y para $h>0$ se tiene que $x^{*}-h$ y $x^{*}+h$ están en $[a,b]$ entonces*

$$u'\left(x^{*}\right)=\frac{u\left(x^{*}+h\right)-u\left(x^{*}-h\right)}{2h}+\mathcal{O}(h^2).$$

Ejemplo. Consideremos el siguiente problema de valor inicaial y de valor en la frontera.

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = 0 \quad 0 < x < 2, \quad 0 < t; \\ u(0,t) = u(2,t) = 0, \quad 0 < t, \\ u(x,0) = \operatorname{sen} 2\pi x, \quad 0 \leq x \leq 2. \end{cases} \tag{1.17}$$

Sean m, h, k enteros positivos, $h = \dfrac{2}{m}$ con nodos (x_i, t_j), donde $x_i = ih$ para $i = 0, 1, \ldots, m$ $t_j = jk$; $j = 0, 1, ...$

Aproximando por diferencias centrales cada derivada tenemos:

$$u_t = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j)}{2k},$$

$$u_{xx} = \frac{u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i+1}, t_j)}{h^2}.$$

Igualando y organizando las ecuaciones anteriores se tiene que:

$$\frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j)}{2k} = \frac{u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i+1}, t_j)}{h^2},$$

$$u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j) = \frac{2k}{h^2}\left[u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i+1}, t_j)\right]$$

Si hacemos $u_i^j = u(x_i, t_j)$ y además $\lambda = \dfrac{2k}{h^2}$, entonces,

$$u_i^{j+1} = u_i^j + \lambda\left[u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j\right],$$

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

Ahora aplicamos las condiciones iniciales, es decir, $u_i^0 = 2\pi x$ para toda $i = 0, 1, \ldots, m$. Por otra parte con las condiciones de frontera se tiene que $u_0^j = 0$, lo que nos ayuda a determinar los elementos de la forma u_i^1, si aplicamos este procedimiento de manera iterativa se obtienen los valores de $u_i^2, u_i^3, \ldots$. El sistema de ecuaciones lo podemos escribir de forma matricial así:

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

donde $\lambda = \dfrac{k}{h^2}$. Empleando

$$u_i^0 = (\operatorname{sen} 2\pi x_1, \operatorname{sen} 2\pi x_2, \ldots, \operatorname{sen} 2\pi x_{m-1})^T$$

y

$$u_0^j = (0, 0, \ldots, 0)^T$$

para todo $j = 1, 2, \ldots$.

Así, debemos resolver un sistema lineal para obtener u_i^j a partir de u_i^{j-1}. Como la matriz A es definida positiva y de diagonal estrictamente dominante, lo que garantiza la existencia de la solución del sistema.

Veamos la solución numérica para el problema planteado, donde la solución aproximada se eleva con mayor rapidez pero al final la solución se estabiliza, y es muy parecida a la solución analítica.

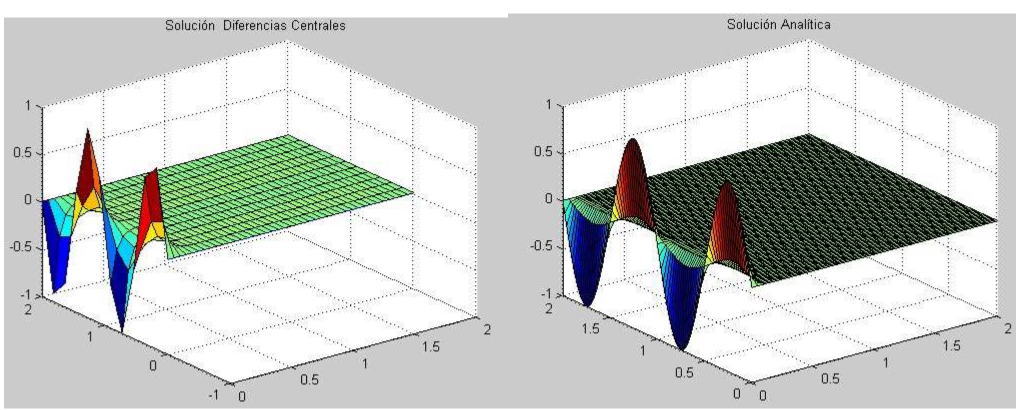

Figura 1.5: Solución Diferencias Centrales vs Solución Analítica

Por otra parte veamos un perfil de temperatura para un instante $t = 0{,}3$.

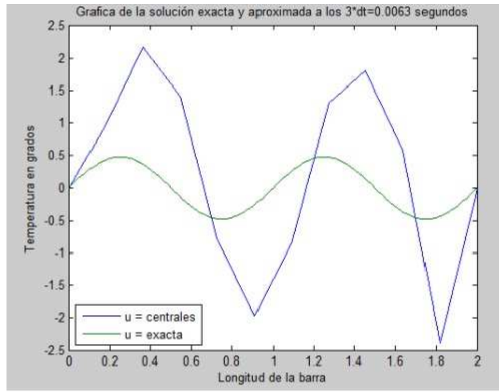

Figura 1.6: Perfiles de Temperatura para un instante $t = 0{,}3$

1.1.2. Derivadas de segundo orden

La derivada de segundo orden de una función u en un punto x^*, denotada por $u''(x^*)$, se aproxima mediante diferencias centrales de la forma

$$\begin{aligned} D^2u(x^*) &= \frac{1}{h^2}\left[u(x^*-h) - 2u(x^*) + u(x^*+h)\right] \\ &= u''(x^*) + \frac{1}{2}h^2u'''(x^*) + \mathcal{O}\left(h^4\right), \end{aligned}$$

la cual es una aproximación simétrica centrada. Esta aproximación se puede obtener por el método de coeficientes indeterminados o de manera alternativa, encontrando la segunda derivada de un polinomio cuadrático $u(x)$ en los puntos $x^* - h$ y $x^* + h$, de la siguiente manera.

Se parte de los desarrollos de Taylor

$$u(x^*+h) = u(x^*) + hu'(x^*) + \frac{h^2}{2}u''(x^*) + \frac{h^3}{6}u'''(x^*) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x^*) + \cdots$$

y

$$u(x^*-h) = u(x^*) - u'(x^*) + \frac{h^2}{2}u''(x^*) - \frac{h^3}{6}u'''(x^*) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x^*) + \cdots.$$

Al sumar estas ecuaciones, se eliminan las derivadas impares de u y se encuentra que

$$u(x^*+h) + u(x^*-h) = 2u(x^*) + h^2u''(x^*) + \frac{h^4}{12}u^{(4)}(x^*).$$

Si en esta representación se trunca en la cuarta derivada, entonces existe un ξ en $[x^* - h, x^* + h]$ tal que

$$u''(x^*) = \frac{u(x^* - h) - 2u(x^*) + u(x^* + h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} u^{(4)}(\xi),$$

la cual determina la aproximación de la segunda derivada $u''(x^*)$ mediante diferencias centrales. Dado que la continuidad de $u^{(4)}$ en $[a, b]$ permite establecer que $|u^{(4)}(\xi)| \leq \|u^{(4)}\|_\infty$, se sigue el siguiente resultado, el cual establece que error de truncamiento es de orden $\mathcal{O}(h^2)$.

Teorema 4. *Sea $u(x)$ una función que tiene hasta cuartas derivadas continuas en el intervalo $[a, b]$. Si $x^* \in (a, b)$ y para $h > 0$ se tiene que $x^* - h$ y $x^* + h$ están en $[a, b]$ entonces*

$$u''(x^*) = \frac{u(x^* - h) - 2u(x^*) + u(x^* + h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$

2. FORMULACIÓN DISCRETA

2.1. Una pequeña aproximación física de la ecuación de calor unidimensional

En esta sección se presentan algunos aspectos relacionados con la ecuación de calor, los cuales se encuentran en las siguientes referencias [2, 1, **?**].

La ecuación que describe la conducción de calor es un modelo importante para analizar el proceso de difusión del calor, con miras a solucionar una variedad de problemas de tipo difusivo presentes en ciencias físicas, biológicas, entre otras. El proceso de conducción de calor, descrito por una ecuación diferencial parcial fue planteado por primera vez en la historia por Joseph Fourier (1768-1830), quien decidió publicar los resultados de sus investigaciones y observaciones físicas acerca de la termodinámica y la teoría de potencial en su obra *Teoría analítica del calor,* en 1807.

La ecuación de calor es un ejemplo de una ecuación diferencial parcial de tipo parabólico; por lo tanto las soluciones de la ecuación de calor se caracterizan por una progresiva suavización de la distribución inicial de la temperatura, puesto que el flujo de calor va de las regiones de mayor temperatura a aquellas que tienen menor temperatura. En general, diferentes estados y condiciones de partida de la ecuación de calor tienden hacia el equilibrio estable del mismo (es decir, la temperatura, transcurrido un tiempo considerable tiende hacia un determinado valor en el cuerpo en el cual se distribuye). Si la temperatura es representada por la función $u\left(x, y, z, t\right)$ que consta de tres variables en el espacio y el tiempo, entonces la ecuación lineal de calor se representa de la forma

$$u_t - \alpha\left(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}\right) = 0,$$

donde $\alpha = \dfrac{h}{C_p\rho}$ es una constante positiva que representa la *difusividad térmica,* de la cual caracteriza la rapidez con que varía la temperatura a través del material. Cuanto más alta es la difusividad térmica de una sustancia, más alto es el ritmo de propagación del perfil de temperatura. Generalmente, el valor de α se estima a partir de la medición de la conductividad térmica h, la capacidad calorífica C_p y la densidad ρ.

2.2. El problema

Sean p, q, r constantes positivas dadas. Se considera el siguiente problema parabólico no lineal de valor inicial y con condiciones de frontera asociado a la ecuación de calor:

$$u_t(x,t) - u_{xx}(x,t) = -pv_t(x,t), \qquad 0 < x < 1,\ t > 0, \tag{2.1}$$

$$v_t(x,t) = -qv(x,t)e^{-r/u(x,t)}, \qquad 0 < x < 1,\ t > 0, \tag{2.2}$$

$$u(x,0) = f_1(x), v(x,0) = f_2(x), \qquad 0 \leq x \leq 1. \tag{2.3}$$

$$u_x(0,t) = H_1(u(0,t)), u_x(1,t) = H_2(u(1,t)), \qquad t > 0, \tag{2.4}$$

donde H_1, H_2, f_1 y f_2 son funciones reales dadas. Este tipo de problemas no lineales es usual en el modelado de fenómenos de transporte, tales como el flujo de energía térmica (calor) en una dirección con generación interna o la difusión de materia en presencia de una reacción química. Para el presente caso, en (2.1) se asume que las propiedades termodinámicas, tales como su conductividad térmica, la capacidad calorífica y la densidad, son independientes de la posición (materiales homogéneos isotrópicos) y de la temperatura, esto en $\alpha = 1$. Por su parte, en (2.2), el *término de generación interna o generación volumétrica*, es dependiente del tiempo, la posición y la misma temperatura. Esto último hace que la solución analítica del problema anterior no sea de fácil obtención, debiéndose recurrir a su solución numérica.

El término de generación interna viene cobrando creciente importancia en procesos industriales y más específicamente, cuando se buscan diseñar sistemas de control de temperatura [7]. Este término aparece, por ejemplo, en procesos donde se calientan sólidos mediante el paso de una corriente eléctrica y el calentamiento por inducción, lo cual representa un fuerte desarrollo industrial para el tratamiento de materiales conductores dado su muy preciso control de temperatura. De igual forma, existen otros procesos donde ésta generación interna o volumétrica se obtiene mediante una o varias reacciones químicas exotérmicas, lo cual complica aún más el modelado del proceso; cuando ellas ocurren, se debe incluir en el proceso de transferencia de "calor". También existen procesos de alto impacto económico, tales como la extrusión de polímeros, donde el término de generación interna de "calor" se denomina "*generación viscosa*", la cual se debe a la presencia de flujo viscoso (no newtoniano) que como consecuencia de la elevada fricción mecánica, incrementa la temperatura del polímero extruido, complicando su modelado matemático y por ende su sistema de control de temperatura. Finalmente, también se puede mencionar que el tratamiento de materiales con ondas electromagnéticas, procesos de alta novedad tecnológica, donde se produce la interacción del campo electromagnético con el material, se simula mediante este término de calentamiento volumétrico (generación interna), ya sea asumiendo que el sólido interactúa únicamente con el campo eléctrico.

2.3. Esquema de diferencias discretas en el tiempo

Un primer método numérico que se consideró para la solución del problema (2.1) - (2.4) fue propuesto por Hartree en [3], consistió en realizar una discretización mediante un esquema de diferencias finitas centrales en el tiempo, lo cual reduce el problema a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con condiciones de frontera.

Dado un $T > 0$, se considera una partición uniforme del intervalo $[0, T]$, de longitud $k = \dfrac{T}{n}$, con $n \in \mathbb{N}$, y de nodos de primer nivel $t_j = jk$, para $j = 0, 1, 2, \ldots n$, y nodos de segundo nivel $t_{j+1/2} = (j + 1/2)\, k$ para $j = 0, 1, \ldots, n$.

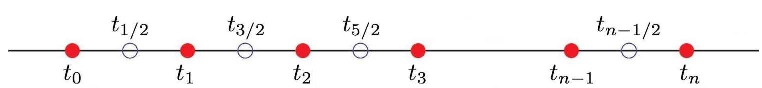

Figura 2.1: Discretización en el tiempo mediante nodos de primer t_j y de segundo nivel $t_{j+1/2}$.

Dado que $u\,(x, t_0)$ y $v\,(x, t_0)$ son funciones conocidas, se considera que la solución del problema (2.1) - (2.4) para cada punto $\left(x, t_{j+1/2}\right)$ donde $0 \leq x \leq 1$ y $j = 1, \ldots, n$. Mediante un esquema de diferencias finitas centrales en el tiempo se tiene que

$$u_t(x, t_{j+1/2}) = \frac{u(x, t_{j+1}) - u(x, t_j)}{k} + \mathcal{O}\left(k^2\right).$$

Aquí, $\mathcal{O}\left(k^2\right)$ denota el error cuadrático de las diferencias centrales en el tiempo.

Por otra parte, al considerar que la segunda derivada de u es continua en el espacio, la derivada parcial $u_{xx}\left(x, t_{j+1/2}\right)$ se puede aproximar como un promedio, es decir,

$$u_{xx}(x, t_{j+1/2}) \approx \frac{u_{xx}(x, t_{j+1}) + u_{xx}(x, t_j)}{2}. \tag{2.5}$$

De esta manera, de (2.1) se sigue que

$$\frac{u(x, t_{j+1}) - u(x, t_j)}{k} \approx \frac{u_{xx}(x, t_{j+1}) + u_{xx}(x, t_j)}{2} - p\frac{v(x, t_{j+1}) - v(x, t_j)}{k}. \tag{2.6}$$

De manera similar, de (2.2) se tiene que

$$v_t \approx \frac{v(x, t_{j+1}) - v(x, t_j)}{k} \approx -q\frac{v(x, t_{j+1}) + v(x, t_j)}{2} \exp\left[\frac{-2r}{u\left(x, t_{j+1}\right) + u\left(x, t_j\right)}\right].$$

de lo cual se sigue que

$$v\left(x, t_{j+1}\right) - v\left(x, t_j\right) = -\frac{qk}{2}\left(v\left(x, t_j\right) + v\left(x, t_{j+1}\right)\right) \exp\left[\frac{-2r}{u\left(x, t_{j+1}\right) + u\left(x, t_j\right)}\right].$$

Al definir a E como

$$E = -\frac{qk}{2} \exp\left[\frac{-2r}{u\left(x, t_{j+1}\right) + u\left(x, t_j\right)}\right], \tag{2.7}$$

se tiene que

$$v\left(x, t_{j+1}\right) - v\left(x, t_j\right) = E\left[v\left(x, t_{j+1}\right) + v\left(x, t_j\right)\right].$$

De esto se sigue que

$$v\left(x, t_{j+1}\right)(1 - E) = v\left(x, t_j\right)(1 + E),$$

es decir,

$$\frac{v\left(x, t_{j+1}\right)}{v\left(x, t_j\right)} = \frac{1 + E}{1 - E}, \qquad \text{si}\, E \neq 1, \tag{2.8}$$

o bien,

$$v\left(x, t_{j+1}\right) = \frac{1 + E}{1 - E} v\left(x, t_j\right). \tag{2.9}$$

Alternativamente, al integrar la ecuación (2.2) en el intervalo de tiempo $[t_j, t_{j+1}]$, se tiene que

$$\ln\frac{v(x, t_{j+1})}{v(x, t_j)} = -q\int_{t_j}^{t_{j+1}} \exp\left(\frac{-r}{u\left(x, t\right)}\right) dt \approx -qk \exp\left[\frac{-2r}{u\left(x, t_{j+1}\right) + u\left(x, t_j\right)}\right],$$

Por lo tanto,

$$v(x,t_{j+1}) \approx v(x,t_j)e^{2E}. \tag{2.10}$$

Así, de (2.9) y (2.10) se tiene que

$$\frac{1+E}{1-E}v\left(x,t_j\right) = v(x,t_j)e^{2E}.$$

Por lo tanto, si $E << 1$ se tiene que

$$e^{2E} = 1 + 2E + \mathcal{O}\left(E^2\right).$$

Y también,

$$\frac{1+E}{1-E} = 1 + 2E + \mathcal{O}\left(E^2\right).$$

Para un E suficientemente grande, la mejor aproximación de la ecuación original es la ecuación (2.10) y es la utilizada por Hartree en este método.

Finalmente, la solución aproximada se obtiene mediante el problema de valores en la frontera que determinan la ecuación diferencial ordinaria (2.6) y las condiciones de frontera (2.4), junto con la ecuación (2.9) o (2.10), esto para $j = 0, 1, \ldots, n$. En este caso, para cada uno de estos j se obtiene a $v(x, t_{j+1})$ mediante (2.9) o (2.10) y luego se resuelve el problema de valores en la frontera que determinan (2.4) y (2.6).

2.4. Esquema de diferencias discretas en el espacio

El segundo método considerado para encontrar la solución numérica del problema (2.1) - (2.4) lo obtuvo Hartree en [3], al considerar una discretización mediante diferencias centrales en el espacio, lo cual reduce el problema (2.1) - (2.4) a resolver un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias junto con las condiciones iniciales .

Se considera una partición uniforme del intervalo $[0, 1]$ de longitud $h = \frac{1}{m}$, con $m \in \mathbb{N}$, y de nodos $x_i = ih$ para $i = 0, 1, \ldots, m$.

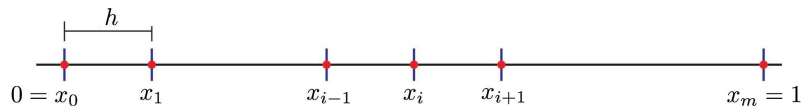

Figura 2.2: Discretización del intervalo $[0,1]$ en el espacio mediante nodos x_i igualmente espaciados.

Para $t > 0$, el problema dado se convierte en

$$\begin{aligned} u_t(x_i,t) - u_{xx}(x_i,t) &= -pv_t(x_i,t), \\ v_t(x_i,t) &= -qv(x_i,t)e^{-r/u(x_i,t)}, \\ u(x_i,0) = f_1(x_i), v(x_i,0) &= f_2(x_i), \\ u_x(x_0,t) = H_1(u(x_0,t)), u_x(x_m,t) &= H_2(u(x_m,t)), \end{aligned}$$

Mediante diferencias centrales en x, la primera ecuación del sistema se convierte en

$$u_t(x_i,t) = \frac{u(x_{i-1},t) - 2u(x_i,t) + u(x_{i+1},t)}{h^2} - pv_t(x_i,t) + \mathcal{O}(h^2), \qquad i = 0,1,\ldots,m. \tag{2.11}$$

Cuando $i = 0$, la condición de frontera derecha, aparece un nodo x_{-1} llamado «nodo fantasma» cuyo valor es hallado cuando se aplican las condiciones de frontera,

$$u_t(x_0,t) = \frac{u(x_{-1},t) - 2u(x_0,t) + u(x_1,t)}{h^2} - pv_t(x_0,t). \tag{2.12}$$

De la condición de frontera en $x_0 = 0$ en (2.4) se tiene que,

$$\frac{u(x_1,t) - u(x_{-1},t)}{2h} = H_1(u(x_0,t)) + \mathcal{O}(h^2),$$

de donde

$$u(x_{-1},t) = u(x_1,t) - 2hH_1(u(x_0,t)) + \mathcal{O}(h^2). \tag{2.13}$$

Al reemplazar (2.13) en (2.12), se tiene que

$$u_t(x_0,t) = 2\frac{u(x_1,t) - u(x_0,t)}{h^2} - 2\frac{H_1(u(x_0,t))}{h} - pv_t(x_0,t) + \mathcal{O}(h^2). \tag{2.14}$$

Para $i = 1,\ldots,m-1$, los nodos interiores en el intervalo $(0,1)$, se tiene que

$$u_t(x_{i-1},t) = \frac{u(x_{i-1},t) - 2u(x_i,t) + u(x_{i+1},t)}{h^2} - pv_t(x_i,t) + \mathcal{O}(h^2). \tag{2.15}$$

Para $i = m$, el nodo de la frontera izquierda con $x_m = 1$,

$$u_t(x_m,t) = \frac{u(x_{m-1},t) - 2u(x_m,t) + u(x_{m+1},t)}{h^2} - pv_t(x_m,t). \tag{2.16}$$

De la condición de frontera en $x_m = 1$ se sigue que

$$\frac{u(x_{m+1},t) - u(x_{m-1},t)}{2h} = H_2(u(x_m,t)) + \mathcal{O}(h^2),$$

de lo que se sigue que

$$u(x_{m+1},t) = u(x_{m-1},t) + 2hH_2(u(x_m,t)) + \mathcal{O}(h^2). \tag{2.17}$$

Entonces de (2.16) y (2.17) se obtiene finalmente que

$$u_t(x_m,t) = \frac{u(x_{m-1},t) - 2u(x_m,t) + u(x_{m-1},t) + 2hH_2(u(x_m,t))}{h^2} - pv_t(x_m,t) + \mathcal{O}(h^2),$$

o bien,

$$u_t(x_m,t) = 2\frac{u(x_{m-1},t) - u(x_m,t)}{h^2} + 2\frac{H_2(u(x_m,t))}{h} - pv_t(x_m,t) + \mathcal{O}(h^2). \tag{2.18}$$

De esto se concluye que la ecuación diferencial parcial dada en el problema considerado, se ha reemplazado por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias en t junto con las condiciones iniciales $u(x_i,0) = f_1(x_i)$. Con cada ecuación (2.11) se obtiene una segunda ecuación asociada al sistema

$$v_t(x_i,t) = -qv(x_i,t)e^{-r/u(x_i,t)} \tag{2.19}$$

junto con la condición inicial $v(x_i,0) = f_2(x_i)$.

Este método de Hartree permite obtener estimaciones de las soluciones a problemas simples de flujo de calor en una dimensión, como la ecuación (2.1) sin el término $pv_t(x,t)$.

En cada nodo x_i se obtienen el par de ecuaciones (2.11) y (2.19), las cuales por la naturaleza en general del problema, como cuando involucra la generación interna o volumétrica, no se puede aplicar directamente por depender esta ecuación diferencial de la función u [3]. Adicionalmente, la solución de este problema se dificulta por el hecho que al ser la ecuación diferencial (2.19) no lineal, hace que el sistema de ecuación (2.18)-(2.19) no se puede desacoplar.

3. ESQUEMA COMPLETO DE DIFERENCIAS DISCRETAS

El método formulado por John Crank y Phyllis Nicolson en 1947, es un método de diferencias finitas que es empleado en la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales de tipo calor, que se obtiene como una combinación de los dos métodos anteriores y que por tanto tiene un orden de error $\mathcal{O}\left(h^2\right) + \mathcal{O}\left(k^2\right)$. Este método, llamado el método de Crank-Nicolson, utiliza las diferencias centrales de primer orden para la derivada respecto al tiempo y una combinación ponderada de la derivada regresiva y progresiva para el resto de la ecuación. En concreto, reemplaza u_t por la fórmula de la diferencia central de primer orden y u_{xx} por la fórmula de diferencias centrales de segundo orden. Este método se fundamenta en las diferencias centrales en espacio y en la regla del trapecio, dando como resultado un método con convergencia de segundo orden en tiempo y en el espacio.

Consideremos una ecuación diferencial parcial de la forma

$$u_t = Du_{xx} - Cu_x - q(u - u_0),$$

donde D, C y q son constantes positivas y u_0 es un número real dado. En este caso,

$$F\left(x, t, u, u_x, u_{xx}\right) = Du_{xx} - Cu_x - q(u - u_0).$$

De acuerdo con las diferencias centrales aplicadas al tiempo y al espacio la ecuación se convierte en:

$$\frac{u\left(x_i, t_{j+1}\right) - u\left(x_i, t_j\right)}{k}$$

$$= \frac{Du_{xx}(x_i, t_j) - Cu_x(x_i, t_j) - q(u(x_i, t_j) - u_0)}{2}$$

$$+ \frac{Du_{xx}(x_i, t_{j+1}) - Cu_x(x_i, t_{j+1}) - q(u(x_i, t_{j+1}) - u_0)}{2} + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2)$$

$$= D\left(\frac{u_{xx}(x_i,t_j)+u_{xx}(x_i,t_j)}{2}\right) - C\left(\frac{u_x(x_i,t_j)+u_x(x_i,t_{j+1})}{2}\right)$$
$$-q\left(\frac{(u(x_i,t_j)-u_0)}{2}+\frac{(u(x_i,t_{j+1})-u_0)}{2}\right)+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2)$$

$$= D\left(\frac{u(x_{i+1},t_j)-2u(x_i,t_j)+u(x_{i-1},t_j)}{2h^2}+\frac{u(x_{i+1},t_{j+1})-2u(x_i,t_{j+1})+u(x_{i-1},t_{j+1})}{2h^2}\right)$$

$$-C\left(\frac{u(x_{i+1},t_j)-u(x_{i-1},t_j)}{4h}+\frac{u(x_{i+1},t_{j+1})-u(x_{i-1},t_{j+1})}{4h}\right)$$
$$-q\left(\frac{u(x_i,t_j)-u_0}{2}+\frac{u(x_i,t_{j+1})-u_0}{2}\right)+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2).$$

Haciendo
$$\alpha=\frac{Dk}{2h^2},\qquad \beta=\frac{Ck}{4h},\qquad \gamma=\frac{qk}{2}$$
y reorganizando términos esta ecuación se escribe de la forma

$$(\beta-\alpha)u(x_{i-1},t_{j+1})+(1-2\alpha+\gamma)u(x_i,t_{j+1})+(\beta-\alpha)u(x_{i+1},t_{j+1})=$$
$$=(\beta+\alpha)u(x_{i-1},t_j)+(1-2\alpha-\gamma)u(x_i,t_j)+(\beta+\alpha)u(x_{i+1},t_j)+2\gamma u_0+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2).$$

3.1. El método Crank-Nicolson: El caso no lineal

El método que desarrollaron Crank y Nicolson es eficaz para encontrar la solución aproximada del sistema de ecuaciones diferenciales parciales (2.1) y (2.2), al reemplazar las derivadas parciales en el espacio y tiempo por sus correspondientes diferencias finitas centrales. La solución es hallada numéricamente, pero presenta una limitación en el número de nodos en x para cada tiempo t.

Tomando una partición uniforme del tiempo y del espacio, tenemos que $x_i = ih$, donde $h=\dfrac{1}{m}$, $i=0,1,\ldots,m$; $t_j=jk$, donde $k=\dfrac{T}{n}$, $j=0,1,\ldots,n$, para algún $T>0$ dado y m, n son enteros positivos dados. Igualmente, se consideran los puntos medios de los nodos de la partición en el tiempo, con lo cual se obtienen los nodos de segundo nivel en el tiempo,

$$t_{j+1/2} = t_j + \frac{k}{2} = jk + \frac{k}{2} = \left(j + \frac{1}{2}\right)k, \quad j = 0, 1, \ldots, n-1.$$

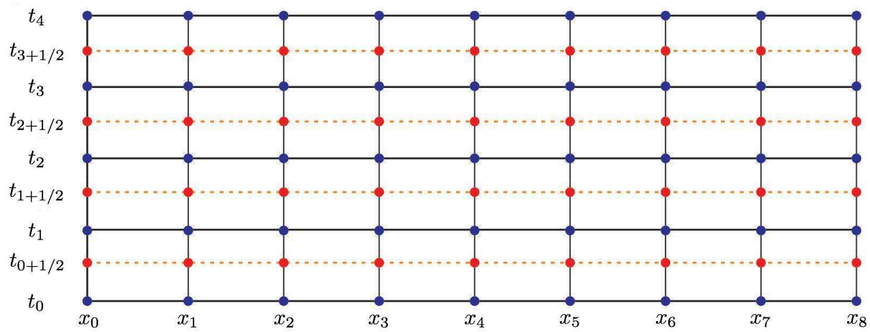

Figura 3.1: Malla de nodos en el espacio y en tiempo.

Las diferencias finitas centrales de u_t, v_t y u_{xx} en $(x_i, t_{j+1/2})$, para $i = 0, 1, \ldots, m$ y $j = 0, 1, \ldots, n-1$, son las siguientes:

$$u_t(x_i, t_{j+1/2}) = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j)}{k} + \mathcal{O}(k^2), \tag{3.1}$$

$$v_t(x_i, t_{j+1/2}) = \frac{v(x_i, t_{j+1}) - v(x_i, t_j)}{k} + \mathcal{O}(k^2), \tag{3.2}$$

y

$$u_{xx}(x_i, t_{j+1/2}) = \frac{u(x_{i-1}, t_{j+1/2}) - 2u(x_i, t_{j/2}) + u(x_{i+1}, t_{j+1/2})}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\frac{(u(x_{i-1}, t_j) + u(x_{i-1}, t_{j+1})) - 2[u(x_i, t_j) + u(x_i, t_{j+1})] + (u(x_{i+1}, t_j) + u(x_{i+1}, t_{j+1}))}{2h^2}$$
$$+\mathcal{O}(h^2),$$

lo cual se sigue del teorema del valor intermedio.

De la ecuación (2.1) en el punto $(x_i, t_{j+1/2})$ y de estas diferencias centrales se tiene que

$$\begin{aligned}
&\frac{u(x_i,t_{j+1})-u(x_i,t_j)}{k}= \\
&=\frac{(u(x_{i-1},t_j)+u(x_{i-1},t_{j+1}))-2[u(x_i,t_j)+u(x_i,t_{j+1})]+(u(x_{i+1},t_j)+u(x_{i+1},t_{j+1}))}{2h^2} \\
&\quad -p\left(v(x_i,t_{j+1})-v(x_i,t_j)\right)+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2).
\end{aligned}$$

Haciendo $\lambda = k/(2h^2)$ en esta ecuación y reagrupando básicamente los términos de u en los tiempos anterior t_j y siguiente t_{j+1}, se tiene que

$$\begin{aligned}
&-\lambda u(x_{i-1},t_{j+1})+(1+2\lambda)u(x_i,t_{j+1})-\lambda u(x_{i+1},t_{j+1})= \\
&=\lambda u(x_{i-1},t_j)+(1-2\lambda)u(x_i,t_j)+\lambda u(x_{i+1},t_j)-p(v((x_i,t_{j+1})-v(x_i,t_j))+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2),
\end{aligned} \tag{3.3}$$

donde $u\left(x_i,t_j\right)$ y $v\left(x_i,t_j\right)$ son respectivamente los valores de u y v en el punto (x_i,t_j). Por la segunda ecuación diferencial, relacionada con los generación volumétrica, se utilizan nuevamente en (2.2) las diferencias centrales en v y el teorema del valor intermedio par obtener la relación establecida en (2.7), donde el término e^{2E}, la temperatura media en t_j, está dado como

$$\frac{v\left(x_i,t_{j+1}\right)}{v\left(x_i,t_j\right)}=e^{2E\left(x_i,t_{j+1/2}\right)}+\mathcal{O}\left(h^2\right), \tag{3.4}$$

donde

$$E\left(x_i,t_{j+1/2}\right)=-\frac{1}{2}qk\exp\left(\frac{-2r}{u\left(x_i,t_{j+1}\right)+u\left(x_i,t_j\right)}\right)+\mathcal{O}\left(h^2\right). \tag{3.5}$$

No obstante, como esta función depende de u en tiempo t_{j+1} que se desconoce, esto hace que el método de Crank-Nicolson para este problema sea de tipo implícito, lo cual dificulta la solución numérica del mismo.

De manera general, se asume que las ecuaciones (3.3)-(3.5) se cumplen para $i = 0,1,\ldots,m$ y $j = 0,1,\ldots,n-1$. No obstante, a fin de establecer un esquema numérico implícito que permita aproximar a u y v en los nodos de las particiones de x y t, primero se obtienen las ecuaciones anteriores en los nodos de la frontera e interiores de la partición del intervalo en el espacio.

En primer lugar, se consideran entonces la ecuaciones anteriores en los nodos de frontera

x_i, cuando $i = 0$ e $i = m$. Así, de (3.3) para $i = 0$ se tiene que

$$
\begin{aligned}
&-\lambda u(x_{-1}, t_{j+1}) + (1+2\lambda)u(x_0, t_{j+1}) - \lambda u(x_1, t_{j+1}) = \\
&\qquad \lambda u(x_{-1}, t_j) + (1-2\lambda)u(x_0, t_j) + \lambda u(x_1, t_j) - p(v((x_0, t_{j+1}) - v(x_0, t_j)) \\
&\qquad\qquad + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2),
\end{aligned}
$$

o bien

$$
\begin{aligned}
&(1+2\lambda)u(x_0, t_{j+1}) - \lambda u(x_1, t_{j+1}) = \\
&\lambda(u(x_{-1}, t_j) + u(x_{-1}, t_{j+1})) + (1-2\lambda)u(x_0, t_j) + \lambda u(x_1, t_j) - p(v((x_0, t_{j+1}) - v(x_0, t_j)) \\
&\qquad + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2).
\end{aligned} \tag{3.6}
$$

la con la condición de frontera (2.4) en u, en $(x_0, t_{j+1/2})$, se tiene que

$$
u_x(x_0, t_{j+1/2}) = \alpha - \beta u(x_0, t_{j+1/2}) = \alpha - \beta \left(\frac{u(x_0, t_j) + u)x_0, t_{j+1})}{2} \right)
$$

donde mediante diferencias centrales y del teorema del valor intermedio, que

$$
\begin{aligned}
u_x(x_0, t_{j+1/2}) &= \frac{u(x_1, t_{j+1/2}) - u(x_{-1}, t_{j+1/2})}{2h} \\
&= \frac{(u(x_1, t_j) + u(x_1, t_{j+1})) - (u(x_{-1}, t_j) + u(x_{-1}, t_{j+1}))}{4h} + \mathcal{O}(h^2).
\end{aligned}
$$

De los dos resultados anteriores se sigue que

$$
\frac{(u(x_1, t_j) + u(x_1, t_{j+1})) - (u(x_{-1}, t_j) + u(x_{-1}, t_{j+1}))}{4h} =
$$

$$
\alpha - \beta \left(\frac{u(x_0, t_j) + u(x_0, t_{j+1})}{2} \right) - \mathcal{O}(h^2)
$$

de donde se obtiene que

$$
u(x_{-1}, t_j) + u(x_{-1}, t_{j+1}) =
$$

$$(u(x_1,t_j)+u(x_1,t_{j+1}))-4h\alpha+4h\beta\left(\frac{u(x_0,t_j)+u(x_0,t_{j+1})}{2}\right)-\mathcal{O}(h^2).$$

Reemplazando este resultado en (3.6), da que

$$\begin{aligned}
&(1+2\lambda)u(x_0,t_{j+1})-\lambda u(x_1,t_{j+1})=\\
&\lambda\left((u(x_1,t_j)+u(x_1,t_{j+1}))-4h\alpha+4h\beta\left(\frac{u(x_0,t_j)+u(x_0,t_{j+1})}{2}\right)\right)\\
&\qquad+(1-2\lambda)u(x_0,t_j)+\lambda u(x_1,t_j)-p(v((x_0,t_{j+1})-v(x_0,t_j))+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2),
\end{aligned}$$

o bien, que

$$\begin{aligned}
&(1+2\lambda(1-h\beta))u(x_0,t_{j+1})-2\lambda u(x_1,t_{j+1})=\\
&(1-2\lambda(1-h\beta))u(x_0,t_j)+2\lambda u(x_1,t_j)-p(v((x_0,t_{j+1})-v(x_0,t_j))+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2),
\end{aligned} \tag{3.7}$$

donde

$$E_0^{j+1/2}=-\frac{qk}{2}e^{-2r/(u(x_0,t_j)+u(x_0,t_{j+1}))},\qquad v(x_0,t_{j+1})=e^{2E_0^{j+1/2}}v(x_0,t_j). \tag{3.8}$$

Ahora para la frontera derecha x_m, se considera $i=m$ en (3.3), dando que

$$\begin{aligned}
&-\lambda u(x_{m-1},t_{j+1})+(1+2\lambda)u(x_m,t_{j+1})-\lambda u(x_{m+1},t_{j+1})=\\
&\lambda u(x_{m-1},t_j)+(1-2\lambda)u(x_m,t_j)+\lambda u(x_{m+1},t_j)-p(v((x_m,t_{j+1})-v(x_m,t_j))\\
&\qquad+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2),
\end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned}
&-\lambda u(x_{m-1},t_{j+1})+(1+2\lambda)u(x_m,t_{j+1})=\\
&\lambda u(x_{m-1},t_j)+(1-2\lambda)u(x_m,t_j)+\lambda\left(u(x_{m+1},t_j)+u(x_{m+1},t_{j+1})\right)\\
&\qquad-p(v((x_m,t_{j+1})-v(x_m,t_j))+\mathcal{O}(h^2)+\mathcal{O}(k^2).
\end{aligned} \tag{3.9}$$

De la condición de frontera de u en (2.4) en $(x_m,t_{j+1/2})$, se tiene que

$$u_x(x_m,t_{j+1/2})=H_2(u(x_m,t_{j+1/2}))=0,$$

donde

$$
\begin{aligned}
u_x(x_m, t_{j+1/2}) &= \frac{u(x_{m+1}, t_{j+1/2}) - u(x_{m-1}, t_{j+1/2})}{2h} \\
&= \frac{(u(x_{m+1}, t_j) + u(x_{m+1}, t_{j+1})) - (u(x_{m-1}, t_j) + u(x_{m-1}, t_{j+1}))}{4h} + \mathcal{O}(h^2).
\end{aligned}
$$

De estas dos últimas ecuaciones se sigue que

$$
u(x_{m+1}, t_j) + u(x_{m+1}, t_{j+1}) = u(x_{m-1}, t_j) + u(x_{m-1}, t_{j+1}) + \mathcal{O}(h^2).
$$

Reemplazando este resultado en (3.9) se tiene que

$$
\begin{aligned}
&-\lambda u(x_{m-1}, t_{j+1}) + (1+2\lambda) u(x_m, t_{j+1}) = \\
&\lambda u(x_{m-1}, t_j) + (1-2\lambda) u(x_m, t_j) + \lambda \left(u(x_{m-1}, t_j) + u(x_{m-1}, t_{j+1})\right) \\
&\qquad - p(v((x_m, t_{j+1}) - v(x_m, t_j)) + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2),
\end{aligned}
$$

o bien,

$$
\begin{aligned}
&-2\lambda u(x_{m-1}, t_{j+1}) + (1+2\lambda) u(x_m, t_{j+1}) = \\
&2\lambda u(x_{m-1}, t_j) + (1-2\lambda) u(x_m, t_j) - p(v((x_m, t_{j+1}) - v(x_m, t_j)) + \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k^2),
\end{aligned}
\tag{3.10}
$$

donde

$$
E_m^{j+1/2} = -\frac{qk}{2} e^{-2r/(u(x_m,t_j)+u(x_m,t_{j+1}))}, \qquad v(x_m, t_{j+1}) = e^{2E_m^{j+1/2}} v(x_m, t_j). \tag{3.11}
$$

3.2. Solución numérica

En esta sección se considera primero el caso de la solución numérica de una ecuación diferencial parabólica lineal bajo ciertas condiciones de valor inicial y de valor en la frontera, mediante el método de Crank-Nicolson. A continuación, se aplica este método para obtener la solución numérica de un caso particular del problema (2.1)-(2.4). Con estos dos problemas se busca mostrar y analizar la importancia del método de Crank-Nicolson en la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales en problemas de tipo calor y que tienen involucran un término de generación interna o volumétrica. Finalmente, se presenta un algoritmo para encontrar las soluciones del método de

Crank-Nicolson implícito que determina este problema.

3.2.1 El caso lineal

A modo de ejemplo, se considera la solución numérica mediante el método de Crank-Nicolson del siguiente problema lineal:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + \operatorname{sen}(3\pi x), & 0 < x < 1, \\ u(x,0) = \operatorname{sen}(\pi x), & 0 \le x \le 1, \\ u(0,t) = 0 = u(1,t), & t > 0. \end{cases} \tag{3.12}$$

La solución de este problema está dada por

$$u(x,t) = e^{-\pi^2 t} \operatorname{sen}(\pi x) + \frac{1}{(3\pi)^2}\left[1 - e^{-(3\pi)^2 t}\right] \operatorname{sen}(3\pi x).$$

Primero, se considera un intervalo $[0,T]$ en el tiempo, con $T > 0$, y se consideran en él los nodos $t_j = jk$ de primer nivel, donde $k = T/n$ para algún entero positivo n y $j = 0,1,2,\ldots n$, y los nodos de segundo nivel $t_{j+1/2} = t_j + k/2$ para $j = 0,1,\ldots,n-1$. Se considera una partición del intervalo $[0,1]$ mediante nodos $x_i = ih$, donde $h = 1/m$ para algún entero positivo m y para $i = 0,1,\ldots,m$.

La solución numérica establecida para este problema mediante el método de Crank-Nicolson en (3.12), se puede obtener al evaluar el problema en los puntos $(x_i, t_{j+1/2})$ y a continuación utilizar las diferencias finitas centrales (3.1). De esta manera se obtiene que

$$\begin{aligned} &\frac{u(x_i,t_{j+1}) - u(x_i,t_j)}{k} \\ &= \frac{u_{xx}(x_i,t_{j+1/2}) + u_{xx}(x_i,t_{1+j/2})}{2} + k\operatorname{sen}(3\pi x_i) + \mathcal{O}(k^2) \\ &= \frac{(u(x_{i+1},t_j) - 2u(x_i,t_j) + u(x_{i-1},t_j)) + (u(x_{i+1},t_{j+1}) - 2u(x_i,t_{j+1}) + u(x_{i-1},t_{j+1}))}{2h^2} \\ &\qquad + k\operatorname{sen}(3\pi x_i) + \mathcal{O}(k^2) + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned} \tag{3.13}$$

Al considerar que $u_i^j \approx u(x_i,t_j)$, hacer $\lambda = \dfrac{k}{2h^2}$ y omitir el término del orden del error, se obtiene de (3.13) el esquema numérico

$$u_i^{j+1} - u_i^j = \lambda\left[(u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j) + (u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1})\right] + k\,\mathrm{sen}(3\pi x_i),$$

o bien

$$-\lambda u_{i-1}^{j+1} + (1+2\lambda)u_i^{j+1} - \lambda u_{i+1}^{j+1} = \lambda u_{i-1}^j + (1-2\lambda)u_i^j + \lambda u_{i+1}^j + k\,\mathrm{sen}(3\pi x_i), \quad (3.14)$$

De las condiciones iniciales y de frontera se tiene que

$$u_i^0 = \mathrm{sen}(\pi x_i), \quad u_0^j = 0 = u_m^j. \quad (3.15)$$

Por las condiciones de frontera, se considera este esquema en todos los nodos interiores x_i, $i = 1, 2, \ldots m-1$. De la condición de frontera del problema (3.12) en el nodo $x_0 = 0$, donde $u(x_0, t_{j+1/2}) = 0$, y que por el teorema del valor intermedio se tiene que

$$u(x_0, t_{j+1/2}) \approx \frac{u(x_0, t_j) + u(x_0, t_{j+1})}{2}$$

entonces se sigue que

$$u_0^{j+1} = -u_0^j = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, n-1.$$

De estas condiciones y al hacer $i = 1$ en (3.14) se tiene que

$$(1+2\lambda)u_1^{j+1} - \lambda u_2^{j+1} = (1-2\lambda)u_1^j + \lambda u_2^j + \mathrm{sen}(3\pi x_1). \quad (3.16)$$

Por otro lado, de la condición de frontera del problema (3.12) en el nodo $x_m = 0$, donde $u(x_m, t_{j+1/2}) = 0$, y que por el teorema del valor intermedio se tiene que

$$u(x_m, t_{j+1/2}) \approx \frac{u(x_m, t_j) + u(x_m, t_{j+1})}{2}$$

entonces se sigue que

$$u_m^{j+1} = -u_m^j = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, n-1.$$

De estas condiciones y al hacer $i = m-1$ en (3.14) se tiene que

$$-\lambda u_{m-2}^{j+1} + (1+2\lambda)u_{m-1}^{j+1} = \lambda u_{m-2}^{j} + (1-2\lambda)u_{m-1}^{j} + k\,\mathrm{sen}(3\pi x_{m-1}), \tag{3.17}$$

El sistema de ecuaciones lineales (3.14), con $i = 2, \ldots, m-2$, (3.15) y (3.16), se puede escribir de la forma matricial

$$AU^{j+1} = BU^{j} + C, \tag{3.18}$$

donde A y B son la matrices tridiagonales cuadradas de orden $m-1$,

$$A = \begin{bmatrix} 1+2\lambda & -\lambda & & & & \\ -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & -\lambda \\ & & & & -\lambda & 1+2\lambda \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 1-2\lambda & \lambda & & & & \\ \lambda & 1-2\lambda & \lambda & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \lambda \\ & & & & \lambda & 1-2\lambda \end{bmatrix},$$

y

$$U^0 = \begin{bmatrix} \mathrm{sen}(\pi x_1) \\ \mathrm{sen}(\pi x_2) \\ \mathrm{sen}(\pi x_3) \\ \vdots \\ \mathrm{sen}(\pi x_{m-1}) \end{bmatrix}, \quad U^j = \begin{bmatrix} u_1^j \\ u_2^j \\ u_3^j \\ \vdots \\ u_{m-1}^j \end{bmatrix}, \quad C = k \begin{bmatrix} \mathrm{sen}(3\pi x_1) \\ \mathrm{sen}(3\pi x_2) \\ \mathrm{sen}(3\pi x_3) \\ \vdots \\ \mathrm{sen}(3\pi x_{m-1}) \end{bmatrix}.$$

Respecto a la existencia y unicidad de soluciones de este sistema de ecuaciones lineales, se debe decir lo siguiente. Una matriz A de orden $n \times n$ es de diagonal estrictamente dominante por filas cuando se satisface que

$$|a_{i,i}| > \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n} |a_{i,j}|,$$

para todo $i = 1, \ldots, n$. El Lema de Hadamard establece precisamente que todo matriz de diagonal estrictamente dominante por filas es invertible [?]. En la matriz A anterior, desde la fila para $i = 1$ hasta la fila $i = m - 1$ la condición $|a_{i,i}| > |a_{i-1,i}| + |a_{i,i+1}|$ se cumple, dado que $1 + 2\lambda > 2\lambda$ y $1 + 2\lambda > \lambda$. Dado que A es invertible, entonces este sistema tiene una única solución para cada U^{j+1} y $j = 1, \ldots, m - 1$.

En cuanto a la solución de este sistema de ecuaciones lineales, se considera el algoritmo de Thomas. Este método de solución se fundamenta en la descomposición LU de la matriz tridiagonal A.

Sea A una matriz tridiagonal de la forma

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{m-2} & b_{m-2} & c_{m-2} \\ & & & & a_{m-1} & b_{m-1} \end{bmatrix},$$

donde todos los a_i, bi y c_i son constantes no nulas dadas. Se asume que A tiene una descomposición LU, de tal manera que $A = LU$ y donde

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ a'_2 & 1 & & & & \\ & a'_3 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & 1 & \\ & & & & a'_{m-1} & 1 \end{bmatrix}$$

y

$$U = \begin{bmatrix} b'_1 & c_1 & & & & \\ & b'_2 & c_2 & & & \\ & & b'_3 & c_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & b'_{m-2} & c_{m-2} \\ & & & & 0 & b'_{m-1} \end{bmatrix}.$$

Las constantes a'_i y b'_i se determinan de la siguiente manera. Como $A = LU$ entonces al realizar este producto e igualar componente a componente, se tiene que

$$\begin{aligned} b'_1 = b_1 &\Longrightarrow b'_1 = b_1 \\ a'_2 b'_1 = a_2 &\Longrightarrow a'_2 = \frac{a_2}{b'_1} \\ a'_2 c_1 + b'_2 = b_2 &\Longrightarrow b'_2 = b_2 - a'_2 c_1 \\ &\vdots \\ a'_{m-1} b_{m-2} + b'_{m-1} = b_{m-1} &\Longrightarrow b'_{m-1} = b_{m-1} - a'_{m-1} b_{m-2} \end{aligned}$$

Las matrices L y U encontradas se utilizan para resolver el sistema de ecuaciones lineales $Ax = d$. Dado que en este sistema $A = LU$ entonces el sistema $Ax = d$ toma la forma $LUx = d$. Haciendo $Ux = y$ se tiene que $Ly = d$. De esta manera, la solución del sistema de ecuaciones $Ax = b$ se obtiene resolviendo sucesivamente los sistemas de ecuaciones

$$Ly = d, \qquad Ux = y.$$

Ahora, la solución del sistema de ecuaciones $Ly = d$ se obtiene mediante la sustitución progresiva

$$\begin{aligned} y_1 &= d_1, & i &= 0, \\ y_i &= d_i - a'_i y_{i-1}, & i &= 2, \ldots, m-1. \end{aligned}$$

A continuación, la solución del sistema de ecuaciones $Ux = y$ se obtiene mediante la sustitución regresiva,

$$
\begin{aligned}
b'_{m-1}x_{m-1} = y_{m-1} &\Longrightarrow x_{m-1} = \frac{y_{m-1}}{b'_{m-1}},\\
b'_i x_i + c_i x_{i+1} = y_i &\Longrightarrow x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{b'_i}, \qquad i = m-1, m-2, \ldots, 1.
\end{aligned}
$$

En el caso del sistema de ecuaciones lineales (3.18), se resuelve con el método de Tomas haciendo $a = c = -\lambda$, $b = 1 + 2\lambda$, y el vector $d = BU^j + C$. El algoritmo de Crank-Nicolson para resolver este problema es el siguiente.

3.2.0.1. 3.2.2 El caso no lineal

Se considera nuevamente el problema (2.1)-(2.4) con las siguientes particiones en el espacio y en tiempo,

$$
\begin{aligned}
m \in \mathbb{N},\ h = \frac{1}{m},\ x_i = jh, &\qquad j = 0, 1, \ldots, m,\\
n \in \mathbb{N},\ T > 0,\ k = \frac{T}{n},\ t_j = jk, &\qquad j = 0, 1, \ldots, m,\\
t_{j+1/2} = t_j + k/2 = jk + k/2 = (j + 1/2)k, &\qquad j = 0, 1, \ldots, m-1.
\end{aligned}
$$

Al considerar que $u_i^j \approx u_i^j$, hacer $\lambda = \frac{k}{2h^2}$ y omitir el término del orden del error, las condiciones iniciales del problema, junto con (3.3) para $i = 1, \ldots, n-1$, (3.7) y (3.10), se obtiene el esquema de solución numérica completo del problema (2.1)-(2.4) esta determinado por el sistema de ecuaciones lineales,

- $i = 0$

$$(1 + 2\lambda(1 - h\beta))u_0^{j+1} - 2\lambda u_1^{j+1} = (1 - 2\lambda(1 - h\beta))u_0^j + 2\lambda u_1^j - p(v_0^{j+1} - v_0^j) - 4\lambda h\alpha$$

- $i = 1$

$$-\lambda u_0^{j+1} + (1 + 2\lambda)\, u_1^{j+1} - \lambda u_2^{j+1} = \lambda u_0^j + (1 - 2\lambda)\, u_1^j + \lambda u_2^j - p\left(v_1^{j+1} - v_1^j\right)$$

- $i = 2$

$$-\lambda u_1^{j+1} + (1 + 2\lambda)\, u_2^{j+1} - \lambda u_3^{j+1} = \lambda u_1^j + (1 - 2\lambda)\, u_2^j + \lambda u_3^j - p\left(v_2^{j+1} - v_2^j\right)$$

- $i = 3$

$$-\lambda u_2^{j+1} + (1+2\lambda)\, u_3^{j+1} - \lambda u_4^{j+1} = \lambda u_2^{j} + (1-2\lambda)\, u_3^{j} + \lambda u_4^{j} - p\left(v_3^{j+1} - v_3^{j}\right)$$

$$\vdots$$

- $i = m-1$

$$-\lambda u_{m-2}^{j+1} + (1+2\lambda)\, u_{m-1}^{j+1} - \lambda u_m^{j+1} = \lambda u_{m-2}^{j} + (1-2\lambda)\, u_{m+1}^{j} + \lambda u_m^{j} - p\left(v_{m-1}^{j+1} - v_{m-1}^{j}\right)$$

$i = m$

$$-2\lambda u_{m-1}^{j+1} + (1+2\lambda) u_m^{j+1} = 2\lambda u_{m-1}^{j} + (1-2\lambda) u_m^{j} - p(v_m^{j+1} - v_m^{j}).$$

para $j = 0, 1, \ldots, n-1$, y donde

$$u_i^0 = f_1(x_i), \qquad v_i^0 = f_2(x_i), \qquad i = 0, 1, \ldots, m,$$

y

$$E_i^{j+1/2} = -\frac{qk}{2}\exp\left(\frac{-2r}{u_i^j + u_i^{j+1}}\right), \;\; v_i^{j+1} = e^{2E_i^{j+1/2}},\; i = 0, 1, \ldots, m,\; j = 0, 1, \ldots, m-1.$$

Como se observa, este esquema de solución numérica se obtiene al agregarle al sistema de ecuaciones determinado por los nodos interiores en el espacio antes de la primera fila la ecuación obtenida para el nodo de la frontera izquierda y después de la última fila la ecuación obtenida para el nodo de la frontera derecha. La forma matricial de este sistema de ecuaciones es de la forma

$$
\begin{bmatrix}
1+2\lambda(1-h\beta) & -2\lambda & & & & & \\
-\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & & & & \\
 & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & \\
 & & & & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda \\
 & & & & & -2\lambda & 1+2\lambda
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_0^{j+1} \\ u_1^{j+1} \\ u_2^{j+1} \\ \vdots \\ u_{m-2}^{j+1} \\ u_{m-1}^{j+1} \\ u_m^{j+1}
\end{bmatrix}
=
$$

$$
\begin{bmatrix}
1-2\lambda(1-h\beta) & 2\lambda & & & & & \\
\lambda & 1-2\lambda & \lambda & & & & \\
 & \lambda & 1-2\lambda & \lambda & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & \lambda & 1-2\lambda & \lambda & \\
 & & & & \lambda & 1-2\lambda & \lambda \\
 & & & & & 2\lambda & 1-2\lambda
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_0^{j} \\ u_1^{j} \\ u_2^{j} \\ \vdots \\ u_{m-2}^{j} \\ u_{m-1}^{j} \\ u_m^{j}
\end{bmatrix}
$$

$$
-\,p\begin{bmatrix}
v_0^{j} - v_0^{j} \\ v_1^{j+1} - v_1^{j} \\ v_2^{j+1} - v_2^{j} \\ \vdots \\ v_{m-2}^{j+1} - v_{m-2}^{j} \\ v_{m-1}^{j+1} - v_{m-1}^{j} \\ v_m^{j+1} - v_m^{j}
\end{bmatrix}
-
\begin{bmatrix}
4\lambda h\alpha \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0
\end{bmatrix},
\qquad j = 0, 1, \ldots .n-1.
$$

o bien como

$$
AU^{j+1} = BU^{j} - p\left(V^{j+1} - V^{j}\right) - G, \tag{3.19}
$$

donde

$$A = \begin{bmatrix} 1+2\lambda(1-h\beta) & -2\lambda & & & & & & \\ -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & & & & & \\ & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & \\ & & & & & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda \\ & & & & & & -2\lambda & 1+2\lambda \end{bmatrix}, \tag{3.20}$$

$$B = \begin{bmatrix} 1-2\lambda(1-h\beta) & 2\lambda & & & & & & \\ \lambda & 1-2\lambda & \lambda & & & & & \\ & \lambda & 1-2\lambda & \lambda & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \lambda & 1-2\lambda & \lambda & \\ & & & & & \lambda & 1-2\lambda & \lambda \\ & & & & & & 2\lambda & 1-2\lambda \end{bmatrix} \tag{3.21}$$

son matrices tridiagonales cuadradas de orden $m+1$, y

$$U^j = \begin{bmatrix} u_0^j \\ u_1^j \\ u_2^j \\ \vdots \\ u_{m-2}^j \\ u_{m-1}^j \\ u_m^j \end{bmatrix}, \qquad V^j = \begin{bmatrix} v_0^j \\ v_1^j \\ v_2^j \\ \vdots \\ v_{m-2}^j \\ v_{m-1}^j \\ v_m^j \end{bmatrix}, \qquad G = \begin{bmatrix} 4\lambda h\alpha \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{3.22}$$

Este proceso en el tiempo, permite obtener los perfiles de temperatura $u(x,t)$ y de generación interna o volumétrica $v(x,t)$, a partir de las condiciones iniciales

$$U^0 = \begin{bmatrix} f_1(x_0) \\ f_1(x_1) \\ f_1(x_2) \\ \vdots \\ f_1(x_{m-2}) \\ f_1(x_{m-1}) \\ f_1(x_m) \end{bmatrix}, \qquad V^0 = \begin{bmatrix} f_2(x_0) \\ f_2(x_1) \\ f_2(x_2) \\ \vdots \\ f_2(x_{m-2}) \\ f_2(x_{m-1}) \\ f_2(x_m) \end{bmatrix}. \tag{3.23}$$

Respecto a la existencia y unicidad de soluciones del sistema de ecuaciones lineales (3.19), se observa que desde la fila para $i = 1$ hasta la fila $i = m$ de la matriz A la condición $|a_{i,i}| > |a_{i-1,i}| + |a_{i,i+1}|$ se cumple, dado que $a_{i,i} = 1 + 2\lambda$, $a_{i-1,i} = a_{i,i+1} = -\lambda$ y $1 + 2\lambda > 2\lambda$. En la fila $i = 0$ se tiene que se debe cumplir que

$$|1 + 2\lambda(1 - h\beta)| > 2\lambda,$$

donde $h = 1/m$ y $\lambda = k/(2h^2)$ son cantidades positivas. Resolviendo esta desigualdad se encuentra que

$$0 < \beta < \frac{1}{2h\lambda} \quad \text{o} \quad \beta > \frac{1}{h}\left(2 + \frac{1}{2\lambda}\right).$$

Cuando se cumple algunas de estos dos condiciones, la matriz tridiagonal A es de diagonal estrictamente dominante y por tanto invertible . Esto último hace que el sistema de ecuaciones lineales (3.19) tenga una única solución U^{j+1} para cada $j =$

$0, 1, \ldots, n-1$. El siguiente algoritmo ejecutado en `C++`, permite obtener las estimaciones de u (la temperatura) y de v (la generación volumétrica) para el problema considerado. Dado que V^{j+1} depende de u en el tiempo t_{j+1}, se debe realizar una estimación de u_i^{j+1} mediante $\hat{u}_i^{j+1}$, el cual se considera es igual a 1. Se realiza un proceso iterativo que permite calcular esta estimación con una tolerancia $\epsilon > 0$ previamente establecida. El vector de estas estimaciones se denota como

$$\hat{U}^{j+1} = (\hat{u}_0^{j+1}, \hat{u}_1^{j+1}, \ldots, \hat{u}_m^{j+1})^T = (1, 1, \ldots, 1)^T.$$

En este algoritmo se considera que $m = n = 8$, $k = h^2$, $p = q = r = 1$, $\alpha = \beta = 1$, $f_1(x) = 3$ y $f_2(x) = 5$. De igual modo, las estimaciones de la U^{j+1} en el tiempo t_{j+1} mediante $\hat{U}^{j+1}$, se obtiene con 10 dígitos decimales exactos, es decir, $\epsilon = 0{,}5 \times 10^{-10}$. Adicionalmente, como

$$2\lambda h = \frac{2kh}{2h^2} = \frac{k}{h} = \frac{h^2}{h} = h = \frac{1}{m},$$

se sigue que la condición que $0 < \beta < \frac{1}{2\lambda h}$ se cumple y por tanto el sistema de ecuaciones lineales (3.19) tiene una única solución.

4. CONCLUSIONES

- Se realizó una revisión teórica de los dos métodos de Hartree para resolver el problema considerado por Crank-Nicolson, del cual se considera una discretización en el tiempo y en el espacio, pero de manera independiente. Esta estrategia permite encontrar soluciones aproximadas del problema, los cuales son de difícil solución por encontrarse acopladas las ecuaciones diferenciales parciales del problema y que la segunda de ellas, relacionada físicamente con fenómenos de generación interna o volumétrica en fenómenos de transporte, es una ecuación diferencial parcial no lineal que depende de la solución de la primera ecuación diferencial parcial.

- Como resultado del estudio del método de Crank-Nicolson, se encontrarón soluciones aproximadas del problema no lineal planteado y de un problema lineal propuesto, mediante un sistema de ecuaciones lineales de tipo implícito, donde la matriz del sistema es una matriz tridiagonal, con este se concluyó que el método de Crank-Nicolson, es numéricamente estable y de segundo orden en el tiempo y espacio.

- Por otro lado aunque el artículo original de Crank-Nicolson no incluía un esquema explícito de solución numérica del problema por ellos considerado, en este trabajo se presenta un algoritmo de solución que involucra el método de Thomas y un esquema iterativo que permite estimar a u en el tiempo t_{j+1}.

Bibliografía

[1] BURDEN, Richard; DOUGLAS, Faires. Análisis numérico: Cengage Learning, 2011. p.704 - 718.

[2] CARRILLO, Julio César. The Finite Element Method for Parabolic Problem. Notes on Advanced Numerical Analysis: Technical Report, University of Louisiana at Lafayette, 2005.

[3] CRANK, John; NICOLSON, Phyllis. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. Proc. Camb. Phil. Soc, 1947. p. 50-67.

[4] HARTREE, Douglas,A solution of the laminar boundary-layer equation for retarded flow, Council, 1949.

[5] HARTREE, Douglas, WOMERSLEY, John Ronald; A method for the numerical or mechanical solution of certain types of partial differential equations. London Series A, 1937. p. 353-366.

[6] HABERMAN, Richard. Applied partial differential equations with Fourier series and boundary value problems, Pearson Prentice Hall, 2004.

[7] KREITH, Frank; MANGLIK, Raj y BOHNS, Henry. Principios de transferencia de calor: Cengage Learning, 2012.

[8] LEVEQUE, Randall. Finite Difference Methods for Differential Equations, SIAM, 2004.

[9] MORTON, Keith William; MAYERS, David Francis. Numerical solution of partial differential equations,Cabridge University Press, 2003.

[10] OBREGÓN, Wilson. Estimación numérica de la explosión para un problema parabólico debido a condiciones de frontera no lineales y término lineal, 2012.

[11] RICHARDSON, Lewis Fry. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stress in masonry dam, Philos, 1910. p. 307-357.

LISTA DE ANEXOS

Los siguientes algoritmos fueron usados para resolver numéricamente los casos de estudio del presente trabajo.

1. **Algoritmo para encontrar la solución de la Ecuación de Calor con condiciones de Dirichlet, propuesta en** (1.8)

Algoritmo 4.1 Algoritmo de Diferencias Progresivas, Regresivas y Centrales

---

Entradas: $m, n \in \mathbb{N}$
Salida: U^{j+1} : vector estimación de la temperatura u en el tiempo t_{j+1}

procedure DIFERENCIAS PROGRESIVAS, REGRESIVAS, CENTRALES(m, n)
    $h \leftarrow \dfrac{1}{m}$, $k \leftarrow h^2$, $\lambda \leftarrow \frac{k}{2h^2}$
    $x_i \leftarrow ih$, $t_j \leftarrow jk$, $i = 1, \ldots, m-1$, $j = 0, 1, \ldots, n$
    Construir las matrices A_p, A_r y A_c, y los vectores U^0
    for $j = 0$ to $n - 1$ **do**
        Resolver para U_p^j, $U_p^j = AU_p^{j+1}$, U_r^j, $AU_r^j = U_r^{j-1}$,U_p^j, $AU_c^j = U_c^{j+1}$ $\triangleright$ Se utiliza el método de Tomas
        return U^{j+1}
    end for
end procedure

---

2. Algoritmo para hallar la solución al caso lineal por el método de Crank-Nicolson (3.12)

Algoritmo 4.2 Algoritmo de Crank-Nicolson, caso lineal unidimensional.

Entradas: $m, n \in \mathbb{N}$
Salida: U^{j+1} : vector estimación de la temperatura u en el tiempo t_{j+1}

procedure CRANKNICOLSONLINEAL(m, n)
    $h \leftarrow \dfrac{1}{m}$, $k \leftarrow h^2$, $\lambda \leftarrow \frac{k}{2h^2}$
    $x_i \leftarrow ih$, $t_j \leftarrow jk$, $i = 1, \ldots, m-1$, $j = 0, 1, \ldots, n$
    Construir las matrices A, B y los vectores U^0 y C
    for $j = 0$ to $n - 1$ **do**
        Resolver para U^{j+1}, $AU^{j+1} = BU^j + C$ $\triangleright$ Se utiliza el método de Tomas
        return U^{j+1}
    end for
end procedure

---

3. Algoritmo para hallar la solución al caso no lineal por el método de Crank-Nicolson (1.1)- (1.4)

Algoritmo 4.3 Algoritmo de Crank-Nicolson para el problema no lineal (1.1)-(1.4).

Entradas: $f_1(x)$, $f_2(x)$: funciones; α, β, p, q, r: parámetros; $m, n \in \mathbb{N}$; ϵ : tolerancia del error

Salida: U^{j+1} : vector estimación de la temperatura u en el tiempo t_{j+1}; V^{j+1}: vector estimación de la generación volumétrica v en el tiempo t_{j+1}; $j = 0, 1, \ldots, n-1$.

procedure CrankNicolsonSistemaNoLineal($f_1, f_2, \alpha, \beta, p, q, r, m, n, \epsilon$)
    $h \leftarrow \dfrac{1}{m}$, $k \leftarrow h^2$, $\lambda \leftarrow \frac{k}{2h^2}$
    $x_i \leftarrow ih$, $t_j \leftarrow jk$, $i = 0, 1, \ldots, m$, $j = 0, 1, \ldots, n$
    $U^0 \leftarrow (f_1(x_0), f_1(x_1), \ldots, f_1(x_m))^T$, $V^0 \leftarrow (f_2(x_0), f_2(x_1), \ldots, f_2(x_m))^T$, $\hat{U}^1 \leftarrow (1, 1, \ldots, 1)^T$
    Construir las matrices A, B y el vector G
    for $j = 0$ to $n-1$ **do**
        for $i = 0$ to m **do**
            $E_i^{j+1/2} \leftarrow -\frac{qk}{2} \exp\left(-\frac{2r}{u_i^j + \hat{u}_i^{j+1}}\right)$, $F_i^{j+1/2} \leftarrow e^{2E_i^{j+1/2}}$
            $v_i^{j+1} \leftarrow F_i^{j+1/2} v_i^j$ ▷ Construcción del vector V^{j+1}
        end for
        Resolver para U^{j+1}, $AU^{j+1} = BU^j - p\left(V^{j+1} - V^j\right) - G$ ▷ Se utiliza el método de Tomas
        while $\|U^{j+1} - \hat{U}^{j+1}\| < \epsilon$ **do**
            $\hat{U}^{j+1} \leftarrow U^{j+1}$
            Resolver para U^{j+1}, $AU^{j+1} = BU^j - p\left(V^{j+1} - V^j\right) - G$ ▷ Se utiliza el método de Tomas
        end while
        return U^{j+1}, V^{j+1}
    end for
end procedure
