

TEMA 9:
**TIPOS DE PROBLEMAS DE VALOR FRONTERA EN MÁS
DE UNA DIMENSIÓN ESPACIAL EN INGENIERÍA
QUÍMICA**

1. INTRODUCCIÓN.

**2. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS PDE-ELÍPTICOS EN DOS DIRECCIONES
ESPACIALES: DIFERENCIAS FINITAS.**

3. BIBLIOGRAFÍA SELECCIONADA.

Asignatura: Cálculo Avanzado de Procesos Químicos.
Titulación: Ingeniería Química
Curso: Cuarto
Cuatrimestre: Primero

1. INTRODUCCIÓN

En el Tema 7 se introdujeron los diferentes tipos de ecuaciones diferenciales parciales de interés en Ingeniería Química. En el Tema 8 se han desarrollado métodos de resolución de ecuaciones diferenciales parciales parabólicas que describen problemas en estado dinámico dentro del área de Ingeniería Química.

En muchas ocasiones los sistemas de interés no son dinámicos pero la propiedad varía en más de una coordenada espacial. Este tipo de problemas se modelan mediante ecuaciones diferenciales parciales de tipo elíptico.

De forma general una PDE-elíptica en dos dimensiones puede escribirse:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[a_1(x, y) \frac{\partial w}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[a_2(x, y) \frac{\partial w}{\partial y} \right] = d \left(x, y, w, \frac{\partial w}{\partial x}, \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad \text{con } a_1 a_2 > 0$$

Los ejemplos de ecuaciones PDE elípticas más interesantes desde el punto de vista ingenieril son las ecuaciones de Laplace y de Poisson:

Ecuación de Laplace (coordenadas cartesianas): $\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = 0$

Ecuación de Poisson (coordenadas cartesianas): $\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = g(x, y)$

Recordamos que una ecuación como esta necesita de 4 condiciones frontera para poder ser integrada y que en función del tipo de condiciones frontera que presente cada sistema se pueden distinguir tres tipos de problema:

1. Problema Dirichlet: $w = f(x, y)$
2. Problema de Neumann: $\frac{\partial w}{\partial n} = g(x, y)$
3. Problema de Robin: $\alpha(x, y)w + \beta(x, y) \frac{\partial w}{\partial n} = \gamma(x, y)$

2. RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS PDE-ELÍPTICOS EN DOS DIRECCIONES ESPACIALES: DIFERENCIAS FINITAS.

Tomaremos como ejemplo la ecuación de Laplace en coordenadas cartesianas:

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = 0$$

En una región cuadrada:

$$\begin{aligned} 0 &\leq x \leq 1 \\ 0 &\leq y \leq 1 \end{aligned}$$

Paso 1: tomamos $\Delta x = \Delta y$ (en el caso más sencillo) de forma que se obtiene una rejilla con lados paralelos a los ejes de coordenadas y espacios de rejilla tales que $\Delta x = \Delta y = h$. De esta forma si $Nh = 1$, entonces el número de puntos internos de la rejilla es $(N-1)^2$ tal como se muestra en la Figura 9.1.

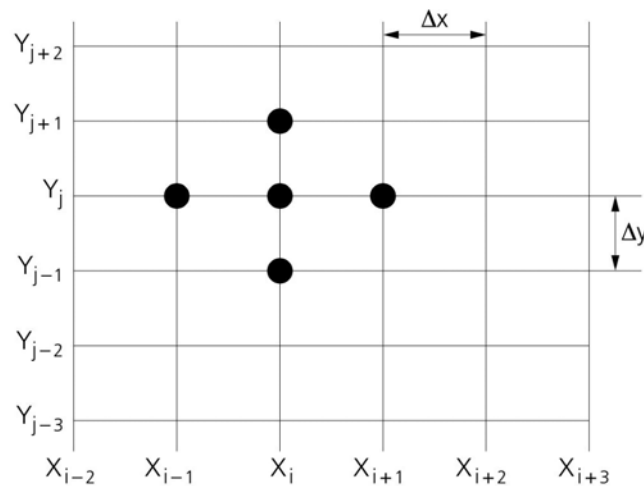


Figura 9.1. Rejilla para la región $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$ con $\Delta x = \Delta y = h$

Paso 2: Aproximamos en cada una de estos nodos las dos derivadas de segundo orden mediante diferencias centrales: obteniendo una ecuación de la forma:

$$\frac{1}{\Delta x^2} [u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}] + \frac{1}{\Delta y^2} [u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}] = 0$$

donde: $u_{i,j} \approx w(x_i, y_j)$

como $\Delta x = \Delta y = h$

la expresión se puede escribir:

$$u_{i,j-1} + u_{i+1,j} - 4u_{ij} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} = 0$$

Con un error de $\mathcal{O}(h^2)$

La figura 9.2 muestra los nodos implicados en el cálculo de un nuevo nodo.

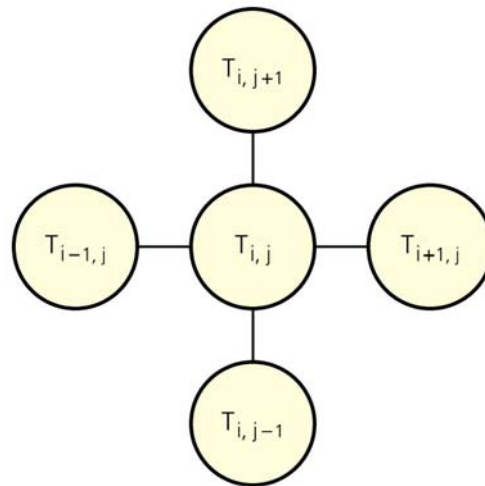


Figura 9.2. Molécula de cálculo de un nuevo nodo para un problema PDE-elíptico mediante diferencias finitas.

Tal como se aprecia en la Figura 9.2. en el cálculo de un nuevo nodo están implicados nodos conocidos y desconocidos por lo tanto han de resolverse conjuntamente en forma de un sistema de ecuaciones algebraicas.

Paso 3: Aplicación de las condiciones de integración.

Caso 1. Problema de Dirichlet.

Si las condiciones de contorno son todas del tipo Dirichlet, entonces el valor de la variable U es conocido en todos los puntos exteriores del intervalo de integración. El número de incógnitas vendrá dado por el número de nodos interiores de la rejilla resultante. Puede demostrarse que el sistema a resolver es

$$\bar{A} * \bar{U} = \bar{f}$$

siendo:

$$A = \begin{bmatrix} J & I & 0 & 0 & 0 \\ I & J & I & 0 & 0 \\ 0 & I & J & I & 0 \\ 0 & 0 & I & J & I \\ 0 & 0 & 0 & I & J \end{bmatrix}$$

con dimensiones $(n-2)^2 \times (n-2)^2$ siendo $(n-2)$ los nodos interiores en cada dirección espacial

I = matriz identidad de dimensiones $(n-2) \times (n-2)$

$$J = \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix},$$

matriz de dimensiones $(n-2) \times (n-2)$

$$U = [U_{1,1}, \dots, U_{n-1,1}, U_{1,2}, \dots, U_{n-1,2}, \dots, U_{1,n-2}, \dots, U_{n-2,n-2}]^T$$

$$f = \left[\begin{array}{l} f(0, y_1) + f(x_1, 0), f(x_2, 0), \dots, f(x_{n-2}, 0) + f(1, y_1), f(0, y_2), 0, \dots, 0, f(1, y_2), \dots, f(0, y_{n-2}) + \\ f(x_1, 1), f(x_1, 1), f(x_2, 1), \dots, f(x_{n-2}, 1) + f(1, y_{n-2}) \end{array} \right]^T$$

La matriz A en un bloque tridiagonal y la mayor parte de sus elementos son cero. NO ES UN SISTEMA TRIDIAGONAL. La resolución de este sistema se hará a través de técnicas de resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales (Gauss, etc.)

Caso 2. Problema de Neumann.

Supongamos que tenemos condiciones de Neuman $\frac{\partial w}{\partial n} = g(x, y)$ en todos los límites del intervalo de integración. Se puede demostrar que el sistema a resolver es:

$$A * \bar{u} = 2h\bar{g}$$

donde:

$$A = \begin{bmatrix} J & 2I & 0 & 0 & 0 \\ I & J & I & 0 & 0 \\ 0 & I & J & I & 0 \\ 0 & 0 & I & J & I \\ 0 & 0 & 0 & 2I & J \end{bmatrix}$$

con dimensiones $(n)^2 \times (n)^2$ siendo (n) los nodos totales en cada dirección.

I= matriz identidad de dimensiones $n \times n$

$$J = \begin{bmatrix} -4 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - \\ 0 & 1 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & -4 \end{bmatrix}, \text{ matriz de dimensiones } n \times n$$

$$U = [U_{0,0}, \dots, U_{n,0}, U_{0,1}, \dots, U_{n,1}, \dots, U_{0,n}, \dots, U_{n,n}]^T$$

$$g = [2g_{00}, g_{10}, \dots, 2g_{n0}, g_{01}, 0, \dots, 0, g_{n1}, \dots, 2g_{0n}, g_{1n}, \dots, g_{n-2,n-1}, 2g_{n-1,n-1}]^T$$

A diferencia del problema de Dirichlet, ahora la matriz A es singular. Así A solo tiene n^2-1 filas o columna que son linealmente independientes. La solución a este sistema incluye por consiguiente una constante arbitraria. Esta es una característica de la solución de un problema de Neumann.

Caso 3: problema de Robin

Considérense las condiciones limítrofes de la forma:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial w}{\partial x} - \phi_1 w = f_0(y), \quad x = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial x} + \eta_1 w = f_1(y), \quad x = 1 \end{array} \right\} \text{ para } 0 \leq y \leq 1$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial w}{\partial y} - \phi_2 w = g_0(y), \quad y = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial y} + \eta_2 w = f_1(y), \quad y = 1 \end{array} \right\} \text{ para } 0 \leq x \leq 1$$

donde ϕ y η son constantes y f y g son funciones conocidas. Estas condiciones pueden hacerse discretas mediante el método de los límites falsos y ser incluidas en la discretización (tal como hemos hecho en los ejemplos anteriores) El problema resultante será un sistema de ecuaciones algebraicas con una matriz de coeficientes de dimensiones $n^2 \times n^2$, siendo n el número de nodos totales en cada dirección espacial.

Por lo general un problema práctico contiene una combinación de los diferentes tipos de condiciones frontera por lo que los sistemas generados se encontrarán dentro de las dimensiones establecidas en los tres casos desarrollados.

3. BIBLIOGRAFÍA SELECCIONADA

Davis, M. E.; *Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos.* Compañía Editorial Continental de C. V. México, México D.F. 1990.

Gerald, C. F., Wheatley, P. O.; *Applied Numerical Analysis, 7th Ed.* Addison-Wesley Publishing Company, Boston, USA. 2004.

Morton, K.W., Mayers, D. F.; *Numerical Solution of Partial Differential Equations: An Introduction, Second Edition.* Cambridge University Press, Cambridge, UK. 2005.