

TEMA 8:

PROBLEMAS PARABÓLICOS:

TIPOS DE PROBLEMAS DE VALOR INICIAL EN UNA (O MÁS) DIRECCIONES ESPACIALES EN INGENIERÍA QUÍMICA. MÉTODOS NUMÉRICOS DE RESOLUCIÓN

1. INTRODUCCIÓN: SISTEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA CON VARIACIÓN EN EL TIEMPO Y EN EL ESPACIO: PROBLEMAS PDE.
2. CONDICIONES DE INTEGRACIÓN ASOCIADAS A PROBLEMAS PDE-PARABÓLICOS.
3. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS PDE-PARABÓLICOS: MÉTODO DE LÍNEAS.
 - 3.1. Aplicación de las condiciones frontera en el método de líneas.
4. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS PDE-PARABÓLICOS: MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS:
 - 4.1. Método explícito.
 - 4.2. Método implícito.
 - 4.3. Método de Crank-Nicolson.
 - 4.4. Consideraciones particulares para problemas en coordenadas polares.
 - 4.5. Consideraciones particulares para problemas no lineales.
 - 4.6. Consideraciones particulares para problemas parabólicos en más de una dimensión espacial
5. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA.

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

1. INTRODUCCIÓN: SISTEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA CON VARIACIÓN EN EL TIEMPO Y EN EL ESPACIO: PROBLEMAS PDE

En el Tema 7 se introdujo que las ecuaciones PDE de 2° orden con dos variables independientes:

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f(u) + g = 0 \text{ se clasifican como PARABÓLICAS si } b^2 - 4ac = 0$$

Los sistemas que incluyen difusión o conducción de calor en estado dinámico son los ejemplos más clásicos de ecuaciones PDE parabólicas. Estas ecuaciones implican a una derivada de primer orden respecto del tiempo y a una o más derivadas de segundo orden respecto a variables espaciales. Por lo tanto, pueden clasificarse a su vez como PDE-IVP ya que una de las variables independientes, el tiempo, es una variable abierta.

Limitándonos a los sistemas que incluyen sólo una variable espacial, la forma general de estas ecuaciones es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \frac{\partial u}{\partial r} \right)$$

donde: $\alpha = 0 \Rightarrow$ simetría plana.

$\alpha = 1 \Rightarrow$ simetría cilíndrica

$\alpha = 2 \Rightarrow$ simetría esférica

Aunque desde una perspectiva rigurosa la clasificación de ecuación parabólica sólo incluye a ecuaciones de 2° orden lineales con dos variables independientes, en muchos textos se consideran ecuaciones parabólicas ecuaciones de 2° orden lineales con más de dos variables independientes ya que el método de resolución es el mismo.

Ejemplo 8.1.

Ecuación de conducción de calor (e.n.e.): $\alpha_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \alpha_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \alpha_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$ (3 var. espaciales y tiempo)

2ª ley de Fick de la difusión (e.n.e.): $D_{abx} \frac{\partial^2 C_a}{\partial x^2} + D_{aby} \frac{\partial^2 C_a}{\partial y^2} + D_{abz} \frac{\partial^2 C_a}{\partial z^2} = \frac{\partial C_a}{\partial t}$ (3 var. espaciales y tiempo)

¿Qué se pretende obtener con la solución de una ecuación PDE-Parabólica en Ingeniería Química?

Tomemos un ejemplo sencillo. La distribución de temperatura en una pared sólida con conductividad térmica constante. Hemos resuelto este problema para el caso en el que el sistema se encuentra en estado estacionario y la variación de temperatura sólo tiene importancia en una dirección espacial.

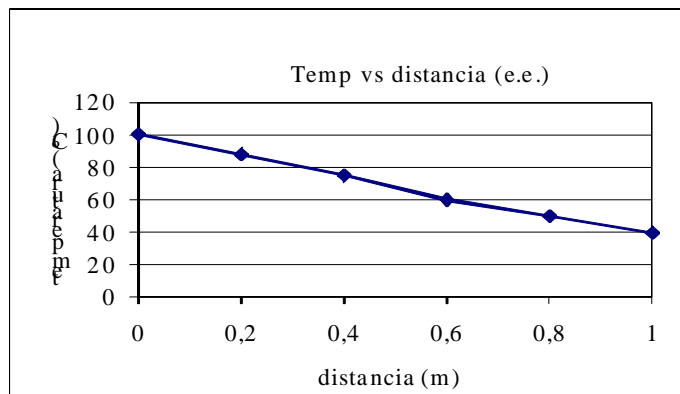


Figura 8.1. Perfil de temperatura en una pared. Estado estacionario.

En este caso la ecuación que representa el problema es una ODE-BVP de la forma: $\frac{d^2T}{dx^2} = 0$, que necesita de dos condiciones frontera para resolverse singularmente (ej. $T(0)=100^\circ\text{C}$ y $T(1)=40^\circ\text{C}$). La solución numérica a este problema se muestra en la Figura 8.1.

Si partimos de la suposición de que inicialmente toda la pared se encontraba a la misma temperatura (ej. 40°C) y de repente la cara interior se pone en contacto con un foco de calor y alcanza los 100°C , la temperatura en los diferentes puntos de la pared irá cambiando con el tiempo hasta alcanzar un nuevo

estado estacionario. En este caso la ecuación que gobierna el sistema será: $\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ (con una condición inicial y dos condiciones frontera).

La solución a esta ecuación deberá proporcionar:

- Un perfil de temperatura en la pared para cada tiempo (hasta el momento en que se alcance el estado estacionario).
- La evolución con el tiempo de la temperatura en un punto x_i de la pared (hasta alcanzar la temperatura correspondiente a ese punto en el estado estacionario).

Es decir, **la solución** de una ecuación PDE PARABÓLICA es una matriz de valores de la variable dependiente correspondientes a cada nodo de la malla espacial y a cada tiempo de la malla temporal que pueden ser representados como:

- a) un conjunto de perfiles a lo largo de todo el intervalo espacial (cada uno de ellos correspondiente a un tiempo de integración) ó
- b) un conjunto de perfiles que muestran la evolución de la variable dependiente en cada nodo en función del tiempo.

En la Figura 8.2. se muestra el resultado de la integración del problema ejemplo como un conjunto de perfiles a lo largo del intervalo de integración espacial en función del tiempo. En la figura 8.3. Se muestra este mismo resultado en forma de evolución de cada nodo con el tiempo.

TEMPERATURA DE LA PARED					
distancia (m)	t=0	t=0,01	t=1	t=2	t=tf
0	40	100	100	100	100
0,2	40	40	75	80	88
0,4	40	40	55	65	75
0,6	40	40	45	50	60
0,8	40	40	40	42	50
1	40	40	40	40	40

TEMPERATURA EN CADA NODO DE LA PARED						
tiempo (s)	x=0,0	x=0,2	x=0,4	x=0,6	x=0,8	x=1,0
0	40	40	40	40	40	40
0,01	100	40	40	40	40	40
1	100	75	45	40	40	40
2	100	80	65	50	42	40
3	100	88	75	60	50	40

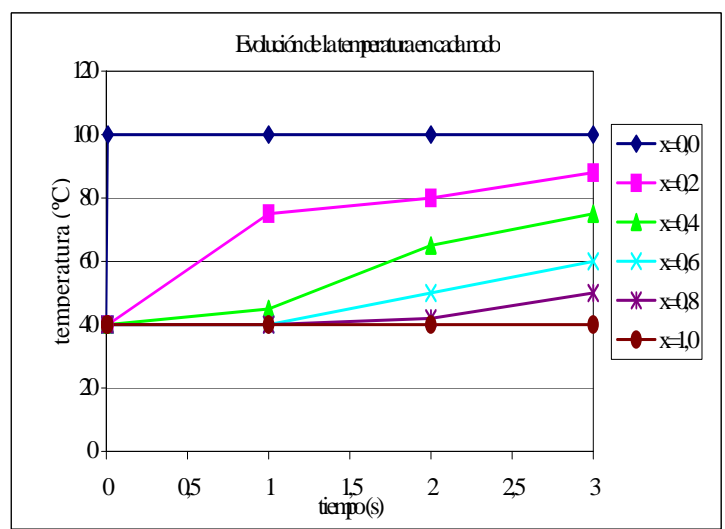
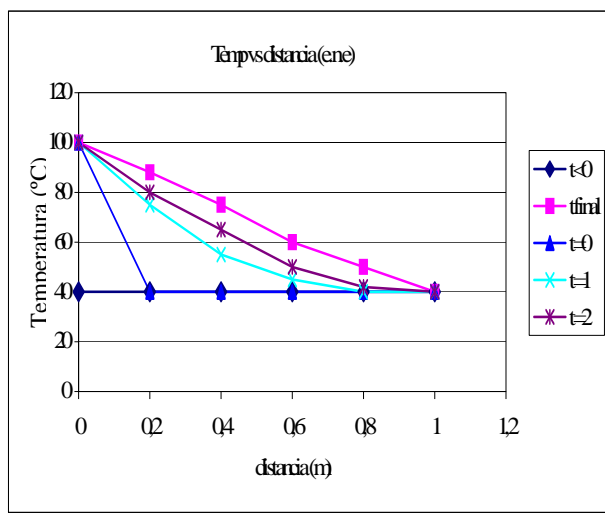


Figura 8.2. Evolución de la temperatura en cada nodo en función del tiempo

Figura 8.3. Temperatura en el sistema para cada tiempo

2. CONDICIONES DE INTEGRACIÓN ASOCIADAS A PROBLEMAS PDE-PARABÓLICOS.

Las ecuaciones parabólicas implican una derivada de primer orden respecto del tiempo, por lo tanto se necesitará una condición inicial que nos defina el valor de la variable dependiente en todo el intervalo de integración para tiempo cero.

A su vez las ecuaciones parabólicas tienen una o más derivadas de segundo orden respecto a variables espaciales. Para proceder a la integración de cada una de estas derivadas será necesario definir una condición frontera en cada extremo del intervalo de integración de cada variable espacial. Esta condición se cumplirá para cualquier valor de las demás variables independientes y para cualquier tiempo de integración.

Las condiciones frontera pueden implicar a la variable dependiente o a su derivada.

En resumen, una ecuación parabólica se acompaña de una condición inicial y un número de condiciones frontera igual al doble de variables espaciales de la ecuación.

Ejemplo 8.2.

Tomemos como ejemplo un gas A que se difunde en un líquido B estancado en una probeta alta.

En estado dinámico la ecuación que modela este sistema será:

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = D_{ab} \frac{\partial^2 C_a}{\partial z^2} \text{ con las condiciones } \begin{cases} C_a(z,0) = 0 \\ C_a(0,t) = C_{a0} \\ \left. \frac{\partial C_a}{\partial z} \right|_{z=l} = 0 \end{cases}$$

3. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS PDE PARABÓLICOS: MÉTODO DE LÍNEAS.

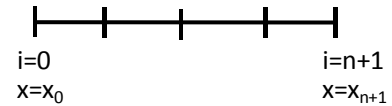
Aplicaremos el *método de líneas (MOL)* a la resolución de problemas PDE-parabólicos en una dirección espacial, tomando como ejemplo general una ecuación en coordenadas rectangulares:

$$\boxed{U_t = \alpha U_{xx}} \text{ o lo que es equivalente: } \boxed{\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}}.$$

Primer paso

Consiste en la creación de una malla de n nodos en el intervalo espacial:

$$h = x_{i+1} - x_i, \quad i = 0, \dots, n-1 \quad \text{desde } x_0 \text{ hasta } x_{n+1}:$$



Segundo paso

Consiste en aplicar la ecuación diferencial en cada nodo espacial, es decir transformamos una ecuación continua en n ecuaciones discontinuas, una por cada nodo espacial: $\frac{\partial U_i}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i^2}$

Tercer paso

Consiste en aplicar diferencias finitas centrales a la derivada espacial de segundo orden en cada uno

de los puntos nodales i : $\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_i^2} = \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2}$, con lo cual hemos eliminado una de las

derivadas parciales de la ecuación que ahora será de la forma: $\frac{dU_i}{dt} = \alpha \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2}$.

ATENCIÓN: como solo tenemos una derivada respecto del tiempo, la ecuación en cada nodo se ha transformado en una ODE.

Obtenemos por tanto un sistema de n ecuaciones diferenciales totales de primer orden (tantas como nodos en la dirección x) con sus correspondientes condiciones iniciales.

Cuarto paso

Corresponde a la modificación del sistema general de ecuaciones ODE-IVP en función de las condiciones de integración de cada problema particular.

Quinto paso

Corresponde a la resolución del sistema de ODE-IVPs generado.

En Resumen:

El método de líneas consiste en transformar una ecuación PDE-parabólica en un sistemas de ODEs del valor inicial y resolver este sistema mediante las técnicas aplicables a resolución de ODEs del valor inicial (Temas 3, 4 de este curso), es decir, algoritmos tipo Euler, Runge-Kutta, Adams, etc.

Ejemplo 8.3.

Aplicación del método MOL a la ecuación PDE parabólica de 2º orden lineal en una dirección

espacial $\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$. Obtención del sistema ODE-IVP general:

Solución:

Respecto de la variable espacial x el intervalo cerrado es (0, 1), respecto a la variable temporal el intervalo es abierto (0, ∞).

Tomando $\Delta x = 0.1 \Rightarrow$ desde $x = 0$ hasta $x = 1$ tendremos 11 nodos: $i = 0, 1, \dots, 10$

Si en cada nodo aplicamos la aproximación $\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_i = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}$, siendo i el índice

correspondiente a la discretización espacial. Obtendremos:

$$\text{Para el nodo } i=0 \text{ (x=0)} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_0 = \frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{(0,1)^2}$$

$$\text{Para el nodo } i=1 \text{ (x=0,1)} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_1 = \frac{T_2 - 2T_1 + T_0}{(0,1)^2}$$

$$\text{Para el nodo } i=2 \text{ (x=0,2)} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_2 = \frac{T_3 - 2T_2 + T_1}{(0,1)^2}$$

.....

$$\text{Para el nodo } i=9 \text{ (x=0,9)} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_9 = \frac{T_{10} - 2T_9 + T_8}{(0,1)^2}$$

Para el nodo $i=10$ ($x=1$) $\Rightarrow \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{10} = \frac{T_{11} - 2T_{10} + T_9}{(0,1)^2}$

En cada nodo se cumple la ecuación $\frac{\partial T_i}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_i}{\partial x_i^2}$, por lo tanto podemos igualar:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \Big|_i = \alpha \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} \Leftrightarrow \frac{dT}{dt} \Big|_i = \alpha \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}$$

En la expresión anterior solo hay una derivada, luego hemos transformado una ecuación PDE en un sistema de ecuaciones ODE del valor inicial:

Para el nodo $i=0$ ($x=0$) $\Rightarrow \frac{dT}{dt} \Big|_0 = \frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{(0,1)^2}$ con $T_0(j=0) = 25$

Para el nodo $i=1$ ($x=0,1$) $\Rightarrow \frac{dT}{dt} \Big|_1 = \frac{T_2 - 2T_1 + T_0}{(0,1)^2}$ con $T_1(j=0) = 25$

..... con $T_i(j=0) = 25$

Para el nodo $i=9$ ($x=0,9$) $\Rightarrow \frac{dT}{dt} \Big|_9 = \frac{T_{10} - 2T_9 + T_8}{(0,1)^2}$ con $T_9(j=0) = 25$

Para el nodo $i=10$ ($x=1$) $\Rightarrow \frac{dT}{dt} \Big|_{10} = \frac{T_{11} - 2T_{10} + T_9}{(0,1)^2}$ con $T_{10}(j=0) = 25$

3.1. Aplicación de las condiciones de frontera en el método de líneas

Caso a) Las dos condiciones frontera son constantes:

Los valores de las variables dependientes T_0 , T_n son conocidas, por lo tanto no se necesitan las ecuaciones ODEs correspondientes a los nodos inicial y final.

Una PDE- parabólica con dos condiciones de frontera constantes en la que se ha discretizado el intervalo de integración espacial en n puntos nodales se resuelve, en método MOL, mediante un sistema de $n-2$ ODEs correspondientes a los $n-2$ puntos nodales interiores.

Caso b) Una condición frontera aislante o de flujo:

En este caso, en el nodo en el que tenemos la condición de frontera aislante (o de flujo) no se conoce el valor de la variable dependiente, por ejemplo T_n , por lo tanto ahora habrá de incluir la ecuación ODE correspondiente a este nodo. Además la aproximación a la derivada segunda en ese nodo frontera implica utilizar un nodo que no existe en el intervalo de integración (T_{-1} ó T_{n+1}) y esto obligará a utilizar la *técnica de los límites ficticios* (Tema 5 de este curso) para sustituir este nodo por otro incluido en el intervalo de integración.

Una PDE- parabólica con una condición de frontera constante y otra condición de frontera aislante (o de flujo) en la que se ha discretizado el intervalo de integración espacial en n puntos nodales se resuelve, en método MOL, mediante un sistema de $n-1$ ODEs correspondientes a los $n-2$ puntos nodales interiores y al punto nodal exterior correspondiente a la condición aislante (flujo).

Caso c) Dos condiciones frontera de flujo (o aislante):

En los nodos en los que tenemos las condiciones de frontera aislante (o de flujo) no se conoce el valor de la variable dependiente, T_0 , T_n , por lo tanto, habrá de incluir las ecuación ODE correspondientes a estos nodos. Además la aproximación a la derivada segunda en ambos nodos frontera implica utilizar dos nodos que no existen en el intervalo de integración (T_{-1} y T_{n+1}) y esto obligará a utilizar la *técnica de los límites ficticios* para sustituir estos nodos por otros incluidos en el intervalo de integración.

Una PDE- parabólica con dos condiciones de frontera de flujo (o aislante) en la que se ha discretizado el intervalo de integración espacial en n puntos nodales se resuelve, en método MOL, mediante un sistema de n ODEs correspondientes a los $n-2$ puntos nodales interiores y a los dos puntos nodales exteriores.

Ejemplo 8.4.

Partiendo del sistema de ODE-IVP general al que se ha llegado en el ejemplo 8.3. Obtener los sistemas particulares para los casos:

a) **condiciones de contorno definidas por:**
$$\begin{cases} T(0, x) = 25^\circ\text{C} \\ T(t, 0) = 100^\circ\text{C} \\ T(t, 1) = 25^\circ\text{C} \end{cases}$$

En este caso no son necesarias la primera y última ecuación ODE. El sistema se expresa:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Para el nodo } i=0 \text{ (} x=0 \text{)} \Rightarrow T_0 = 100 \\ \text{Para el nodo } i=1 \text{ (} x=0,1 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_1 = \frac{T_2 - 2T_1 + 100}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_1(t=0) = 25 \\ \dots\dots\dots \quad \text{con } T_i(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=9 \text{ (} x=0,9 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_9 = \frac{25 - 2T_9 + T_8}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_9(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=10 \text{ (} x=1 \text{)} \Rightarrow T_{10} = 25 \end{array} \right\}$$

b) **condiciones de contorno definidas por:**
$$\begin{cases} T(0, x) = 25^\circ\text{C} \\ \frac{\partial T}{\partial x}(t, 1) = 0 \\ T(t, 0) = 100^\circ\text{C} \end{cases}$$

En este caso la ecuación para $x=1,0$ vuelve a ser necesaria, el sistema se expresa entonces:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Para el nodo } i=0 \text{ (} x=0 \text{)} \Rightarrow T_0 = 100 \\ \text{Para el nodo } i=1 \text{ (} x=0,1 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_1 = \frac{T_2 - 2T_1 + 100}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_1(t=0) = 25 \\ \dots\dots\dots \quad \text{con } T_i(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=9 \text{ (} x=0,9 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_9 = \frac{T_{10} - 2T_9 + T_8}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_9(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=10 \text{ (} x=1 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_{10} = \frac{T_{11} - 2T_{10} + T_9}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_{10}(t=0) = 25 \end{array} \right\}$$

Aparece una nueva variable, T_{11} , que por no pertenecer al intervalo de integración debe ser sustituida. Aplicando la técnica de los límites ficticios se obtiene para este caso que en el

punto $x=1,0$ se cumple $\Rightarrow \left. \frac{dT}{dx} \right|_{i=10} = 0 = \frac{T_{11} - T_9}{2h} \Rightarrow \boxed{T_{11} = T_9}$ por lo tanto podemos

expresar la ecuación correspondiente al nodo $i=10$ de la forma:

$$\text{Para el nodo } i=10 \text{ (} x=1 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_{10} = \frac{2T_9 - 2T_{10}}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_{10}(t=0) = 25$$

c) condiciones de contorno definidas por:

$$\begin{cases} T(0, x) = 25^\circ\text{C} \\ \frac{\partial T}{\partial x}(t, 1) = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial x}(t, 0) = \alpha(T_F - T_0) \end{cases}$$

En este caso la ecuación para $x=0,0$ vuelve a ser necesaria, el sistema se expresa entonces:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Para el nodo } i=0 \text{ (} x=0 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_0 = \frac{T_1 - 2T_0 + T_{-1}}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_0(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=1 \text{ (} x=0,1 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_1 = \frac{T_2 - 2T_1 + 100}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_1(t=0) = 25 \\ \dots\dots\dots \quad \text{con } T_i(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=9 \text{ (} x=0,9 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_9 = \frac{T_{10} - 2T_9 + T_8}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_9(t=0) = 25 \\ \text{Para el nodo } i=10 \text{ (} x=1 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_{10} = \frac{T_{11} - 2T_{10} + T_9}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_{10}(t=0) = 25 \end{array} \right.$$

Aparece una nueva variable, T_{-1} , que por no pertenecer al intervalo de integración debe ser sustituida. Aplicando la técnica de los límites ficticios se obtiene para este caso que en el punto

$x=0,0$ se cumple $\Rightarrow \left. \frac{dT}{dx} \right|_{i=0} = \alpha(T_F - T_0) = \frac{T_{-1} - T_1}{2h} \Rightarrow \boxed{T_{-1} = 2h\alpha(T_F - T_0) + T_1}$ por lo tanto

podemos expresar la ecuación correspondiente al nodo $i=0$ de la forma:

$$\text{Para el nodo } i=0 \text{ (} x=0,0 \text{)} \Rightarrow \left. \frac{dT}{dt} \right|_0 = \frac{2T_1 - 2(1 + 0,1\alpha)T_0 + 0,2\alpha}{(0,1)^2} \quad \text{con } T_0(t=0) = 25$$

Resumen método de líneas (MOL) aplicado a la resolución de PDE-parabólicas.

- Este método convierte un problema de Ingeniería Química definido por una PDE parabólica en un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden mediante discretización de las derivadas parciales de segundo orden espaciales.
- La integración del sistema ODE-IVP generado se lleva a cabo mediante un algoritmo adecuado.

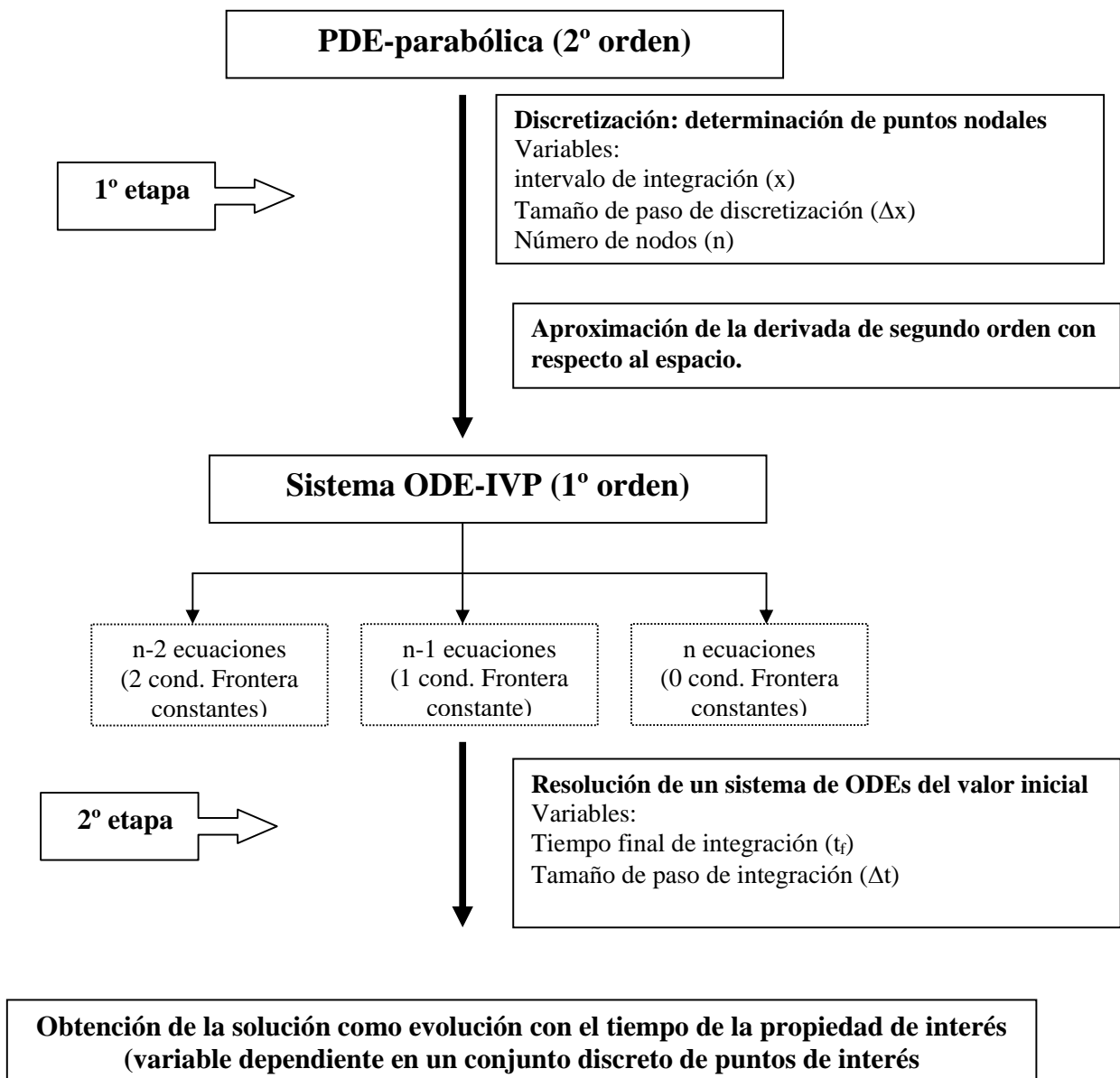


Figura 8.4. Esquema de la aplicación del Método de Líneas (MOL)

4. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE PROBLEMAS PDE-PARABÓLICOS: MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

La resolución de un problema PDE-Parabólico con una dimensión espacial mediante diferencias finitas conlleva los siguientes pasos:

Primer paso:

Crear una red de nodos en dos dimensiones. Para ello es necesario dar un valor final al tiempo, de esta forma las dos variables son cerradas:

Variable espacial: $x_{i+1}=x_i+\Delta x$ con $i = 0, \dots, n$; siendo $x_0=0,0$ y $x_{n+1}=1,0$

Variable temporal: $t_{j+1}=t_j+\Delta t$ con $j = 0, \dots, n$; siendo $t_0=0,0$ y $t_{n+1}=t_{\text{final}}$.

Se obtendrá una malla en dos dimensiones como la representada en la Figura 8.5:

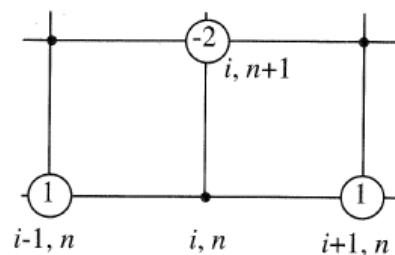


Figura 8.5. Malla correspondiente a la discretización de la variable espacial y temporal.

Segundo paso:

Discretizar la ecuación: $\frac{\partial T_{ij}}{\partial t_j} = \alpha \frac{\partial^2 T_{ij}}{\partial x_i^2}$ en tantas ecuaciones como nodos tenga la red.

Tercer paso:

Aplicar diferencias finitas a la segunda derivada espacial: $\left. \frac{\partial^2 T_{ij}}{\partial x_i^2} \right|_{ij} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2}$

Cuarto paso:

Aplicar diferencias finitas a la primera derivada temporal.

El resultado de aplicar diferencias finitas a las dos derivadas de la ecuación es que hemos transformado una ecuación PDE-Parabólica en un sistema de ecuaciones algebraicas.

En función del tipo de aproximación a la primera derivada que se aplique se distinguen tres métodos de diferencias finitas:

4.1 Método explícito:

En este método se aplican diferencias hacia delante a la derivada de primer orden respecto del tiempo. El punto seleccionado para realizar la aproximación es el punto (j):

$$\left. \frac{dT}{dt} \right|_{i,j} = \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t).$$

Del conjunto de las aproximaciones a la segunda derivada (paso 3) y a la primera derivada (paso 4) en cada nodo i,j se obtiene un conjunto de ecuaciones:

$$T_{i,j+1} - T_{i,j} = \frac{\Delta t \alpha}{\Delta x^2} [T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}]$$

o lo que es lo mismo: $T_{i,j+1} = k[T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}] + T_{i,j}$, siendo $k = \frac{\Delta t \alpha}{\Delta x^2}$

El sistema de ecuaciones así obtenido contendrá solo valores de T en la j-ésima posición en el lado derecho de la ecuación. (Figura 8.6).

Como todos estos valores son conocidos esta fórmula puede usarse para determinar $T_{i,j+1}$ para todos los valores de i entre los puntos frontera.

Las condiciones frontera se utilizan para determinar los valores en los puntos extremos.

El sistema de ecuaciones algebraicas generado es un sistema explícito, en el que en cada ecuación solo existe una variable desconocida por lo que pueden determinarse las temperaturas en cada nodo individualmente.

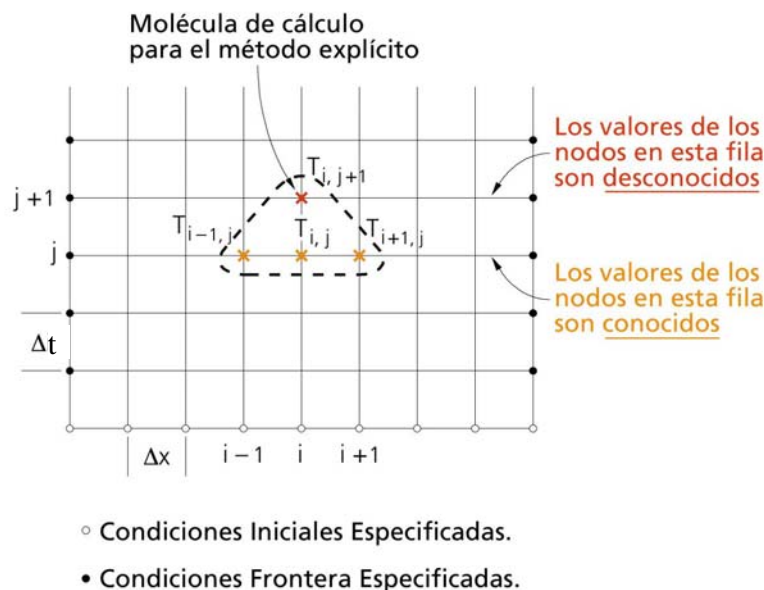


Figura 8.6. Nodos involucrados en el cálculo del nodo i+1, j+1 en el método explícito. [Reelaborado a partir de Riggs, 1994].

El error del método es proporcional a $\mathcal{O}(\Delta t + \Delta x^2)$ ya que para aplicar diferencias finitas se han usado aproximaciones de orden 2 en el caso del espacio y de orden 1 en el caso del tiempo.

La estabilidad del método viene determinada por $k < \frac{1}{2}$, a causa de estas limitaciones este método no es muy adecuado para gran número de problemas por lo que se han desarrollado algoritmos que permitan integrar el sistema con mayor exactitud y estabilidad.

4.2 Método implícito:

Este método se denomina también *Método diferencial inverso* o *Método de las diferencias hacia atrás*.

En este método se aplican **diferencias hacia atrás** a la derivada de primer orden respecto del tiempo.

El punto seleccionado para realizar la aproximación es el punto (j+1):

$$\left. \frac{dT}{dt} \right|_{i,j+1} = \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t).$$

Del conjunto de las aproximaciones a la segunda derivada (paso 3) y a la primera derivada (paso 4) en cada nodo i,j se obtiene un conjunto de ecuaciones:

$$T_{i,j+1} - T_{i,j} = \frac{\Delta t \alpha}{\Delta x^2} [T_{i+1,j+1} - 2T_{i,j+1} + T_{i-1,j+1}]$$

o lo que es lo mismo: $T_{i,j+1} = k[T_{i+1,j+1} - 2T_{i,j+1} + T_{i-1,j+1}] + T_{i,j}$, siendo $k = \frac{\Delta t \alpha}{\Delta x^2}$

IMPORTANTE: en cada una de estas ecuaciones tenemos tres incógnitas ($T_{i-1,j+1}, T_{i,j+1}, T_{i+1,j+1}$) y un valor conocido ($T_{i,j}$). Entonces todos los nodos que estén a un mismo nivel j se tienen que resolver conjuntamente: tenemos que resolver un sistema de ecuaciones lineales para cada tiempo j .

Si reagrupamos términos en la expresión anterior: $-kT_{i+1,j+1} + (1+2k)T_{i,j+1} - kT_{i-1,j+1} = T_{i,j}$

Por lo tanto, tenemos un sistema tridiagonal que puede expresarse matricialmente:

$$\begin{bmatrix} (1+2k) & -k & 0 & 0 \\ -k & (1+2k) & -k & 0 \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ 0 & 0 & -k & (1+2k) \end{bmatrix} \overline{T}_{j+1} = \overline{T}_j + k \begin{bmatrix} T_{0,j+1} \\ 0 \\ 0 \\ T_{n+1,j+1} \end{bmatrix}$$

siendo: $\overline{T}_{j+1} = (T_{1,j+1}, T_{2,j+1}, \dots, T_{n,j+1})^T$

Nota: esta expresión corresponde a un sistema con $n+1$ nodos espaciales en cada tiempo j teniendo con condiciones frontera constantes en los nodos $i=0$ (inicial) e $i=n+1$ (final). Por lo tanto tiene tantas ecuaciones como nodos interiores (n). Si alguna de las condiciones frontera es tipo Neumann o Robbins sería necesario añadir más ecuaciones al sistema y aplicar la técnica de los límites ficticios para eliminar nodos que no se encuentran dentro del intervalo de integración. La figura 8.7 muestra gráficamente los nodos implicados en el cálculo de un nodo.

El orden de exactitud de este método es el mismo que el método explícito ya que hemos utilizado aproximaciones del mismo orden: aproximaciones de orden 2 en el caso del espacio y de orden 1 en el caso del tiempo. Sin embargo la ventaja es que *este método es incondicionalmente estable.*

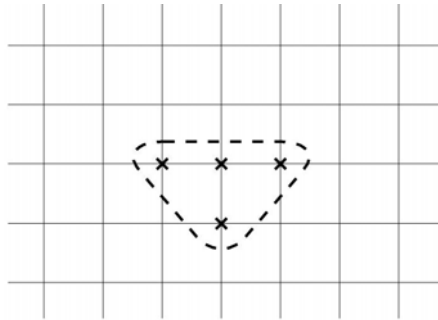


Figura 8.7. Nodos implicados en el cálculo de un nuevo nodo en el método implícito.

4.3 Método de Crank- Nicolson

En este método se utilizan diferencias centrales para aproximar la derivada de primer orden respecto al tiempo. El punto seleccionado para realizar la aproximación es el punto $(j+1/2)$, es decir el punto medio entre dos nodos $j, j+1$:

$$\left. \frac{dT}{dt} \right|_{i,j+1/2} = \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

Del conjunto de las aproximaciones a la segunda derivada (paso 3) y a la primera derivada (paso 4) en cada nodo i,j se obtiene un conjunto de ecuaciones:

$$T_{i,j+1} = k [T_{i+1,j+1/2} - 2T_{i,j+1/2} + T_{i-1,j+1/2}] + T_{i,j}$$

Una expresión de este tipo no es evaluable dado que los nodos que existen en la red corresponden a valores de j enteros; para solucionar el problema se aplica a cada nodo la expresión:

$$T_{i,j+1/2} = \frac{1}{2}(T_{i,j} + T_{i,j+1})$$

con lo cual se obtiene la expresión:

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

Esta expresión corresponde a un sistema de ecuaciones acopladas para cada tiempo que puede expresarse de forma matricial:

$$\begin{bmatrix} (1+k) & -k/2 & 0 & 0 \\ -k/2 & (1+k) & -k/2 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -k/2 & (1+k) \end{bmatrix} \overline{T}_{j+1} = \begin{bmatrix} (1-k) & k/2 & 0 & 0 \\ k/2 & (1-k) & k/2 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & k/2 & (1-k) \end{bmatrix} \overline{T}_j + \begin{bmatrix} \frac{k}{2}(T_{0,j} + T_{0,j+1}) \\ 0 \\ 0 \\ \frac{k}{2}(T_{n+1,j} + T_{n+1,j+1}) \end{bmatrix}$$

Nota: esta expresión corresponde a un sistema con $n+1$ nodos espaciales en cada tiempo j teniendo con condiciones frontera constantes en los nodos $i=0$ (inicial) e $i=n+1$ (final). Por lo tanto tiene tantas ecuaciones como nodos interiores (n). Si alguna de las condiciones frontera es tipo Neumann o Robins sería necesario añadir más ecuaciones al sistema y aplicar la técnica de los límites ficticios para eliminar nodos que no se encuentran dentro del intervalo de integración. La figura 8.8 muestra gráficamente los nodos implicados en el cálculo de un nodo.

El orden de exactitud de este método es $\mathcal{O}(\Delta t^2 + \Delta x^2)$ ya que hemos utilizado aproximaciones de orden 2 en la derivada del espacio y del tiempo. Además **este método es incondicionalmente estable.**

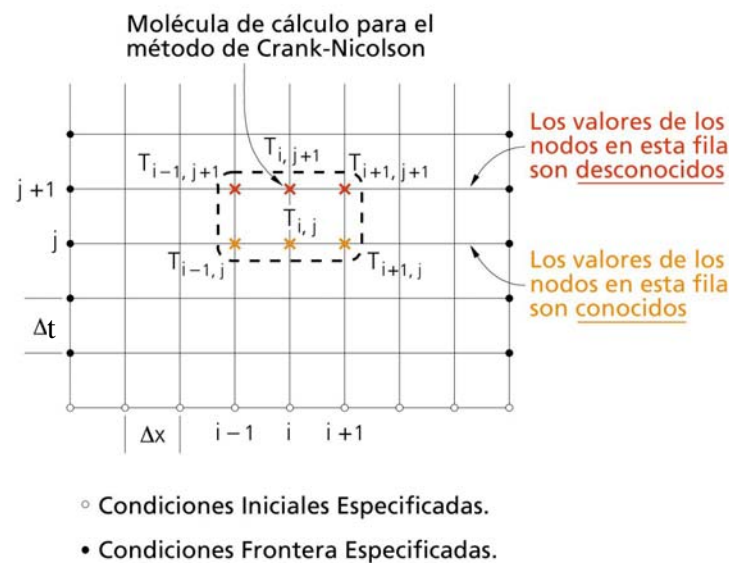


Figura 8.8. Nodos implicados en el cálculo de un nuevo nodo en el método de Crank-Nicolson. [Reelaborado a partir de Riggs, 1994].

Resumen del Método de Diferencias Finitas

PDE-parabólica (2º orden)

1º etapa

Discretización: determinación de puntos nodales

Variables:

Intervalo de integración (x)

Tamaño de paso de discretización (Δx)

Número de nodos (i)

Aproximación de la derivada de segundo orden con respecto al espacio.

Sistema ODE-IVP (1º orden)

2º etapa

Discretización de la variable tiempo

Variables:

Intervalo de integración ($t-t_{\text{final}}$)Tamaño de paso de discretización (Δt)

Número de nodos (j)

Aproximación de la derivada de primer orden con respecto al tiempo

Número de nodos (j)

Diferencias
hacia delanteDiferencias
hacia atrásDiferencias
centrales**Sistema de ecuaciones
algebraicas explícito****Sistema de ecuaciones
algebraicas implícito****Sistema de ecuaciones
algebraicas implícito****Obtención de la solución mediante método de Thomas u otro adecuado a sistemas de ecuaciones algebraicas lineales acopladas (casos implícitos lineales)**

4.4. Consideraciones particulares para problemas en coordenadas polares:

Los métodos descritos para coordenadas rectangulares son perfectamente válidos para coordenadas cilíndricas y esféricas.

Sin embargo, en estas dos coordenadas se produce un problema en el nodo $r=0$ ya que la consideración de simetría hace que $\left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$ y además el coeficiente $\frac{1}{r} = \frac{1}{0}$, por lo tanto se obtiene una

indeterminación en algún término de la ecuación. De forma alternativa, si en algún caso $\left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{r=0} \neq 0$,

para que se cumpla la ecuación $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\alpha}{r} \frac{\partial u}{\partial r}$ se debe cumplir que $\frac{\partial u}{\partial t} = \pm\infty$ ó $\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = \pm\infty$.

Para evitar este problema en el nodo $i=0$ se puede aplicar la aproximación:

$$\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{\Delta t} = (\alpha + 1) \frac{2}{\Delta r^2} [U_{i+1,j} - U_{i,j}], \text{ para } i=0.$$

Esta aproximación se puede obtener tras el siguiente razonamiento, partiendo de una PDE parabólica de forma general: $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \frac{\partial U}{\partial r} \right)$, o lo que es lo mismo, $\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\alpha}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2}$.

Aplicando la regla de L'Hôpital, el término $\frac{\alpha}{r} \frac{\partial U}{\partial r}$ en $r=0$ puede aproximarse de esta forma:

$$\frac{\alpha}{r} \frac{\partial U}{\partial r} \approx \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial r^2}$$

Es decir, en el punto $r=0$ podemos sustituir:

$$\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\alpha \frac{\partial U}{\partial r} \right) = \frac{\alpha}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \approx \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \approx (\alpha + 1) \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \begin{cases} 2 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \text{ para coordenadas cilíndricas} \\ 3 \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \text{ para coordenadas esféricas} \end{cases}$$

obteniendo la ecuación PDE: $\frac{\partial U}{\partial t} = (\alpha + 1) \frac{\partial^2 U}{\partial r^2}$ (en el punto $r=0$). Aplicando diferencias finitas a esta

nueva expresión se obtiene la aproximación: $\frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{\Delta t} = (\alpha + 1) \frac{2}{\Delta r^2} [U_{i+1,j} - U_{i,j}]$ c.q.d.

4.5. Consideraciones particulares para problemas no lineales:

En los ejemplos lineales mostrados en las secciones anteriores del Tema, las propiedades físicas (U) dependen de una variable espacial y del tiempo. A veces estas propiedades dependen de funciones desconocidas $u(x,t)$, esto lleva a problemas no lineales.

Consideremos el ejemplo $\frac{\partial U}{\partial t} = a(U) * \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$. El método explícito apenas se ve afectado por la no

linealidad del problema. La notación general de las ecuaciones algebraicas a las que da lugar sería:

$$U_{i+1,j} = U_{i,j} + k * a(U) * [U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}]$$

Se introduce la dificultad del cálculo de $a(U_{i,j})$. El criterio de estabilidad para el método explícito es diferente al deducido para el problema lineal y no se dispone de un criterio generalizado. Para problemas "difíciles" (con términos de mayor carácter no lineal) se deben usar métodos implícitos.

En cualquier caso, estas ecuaciones originan sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales que se deben resolver para cada etapa de tiempo mediante métodos iterativos. El método más utilizado es el de Newton.

4.6. Consideraciones particulares para problemas parabólicos en más de una dimensión espacial:

Las ecuaciones parabólicas en una dirección espacial se pueden generalizar a dos o tres dimensiones. Consideremos una PDE parabólica en dos dimensiones rectangulares ($0 < x < 1$, $0 < y < 1$):

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \left[\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right].$$

Si hacemos una malla mediante $\Delta x = \Delta y$ el método explícito nos lleva a una

expresión de la forma:

$$U_{i,j}^{k+1} = \gamma (U_{i+1,j}^k + U_{i-1,j}^k + U_{i,j+1}^k + U_{i,j-1}^k - 1) + (1 - 4\gamma) U_{i,j}^k$$

donde:

$$\gamma = \alpha \Delta t / \Delta x^2$$

i = nodos en la dirección x

j = nodos en la dirección y

k = nodos en el tiempo.

En este esquema el máximo valor permisible para γ es 1/4. En un caso más general en el que $\Delta x \neq \Delta y$

el criterio es: $\left[\frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} \right] \leq \frac{1}{8}$. La ecuación análoga en tres dimensiones (con malla equidistante en

las tres dimensiones) tiene el coeficiente $(1 - 6\gamma)$ y el criterio $\gamma \leq \frac{1}{6}$ para mantener la convergencia y estabilidad. El método explícito resulta impracticable para problemas de dos y tres dimensiones precisamente porque los criterios de estabilidad restringen Δt a valores tan pequeños que obligan a resolver sistema de ecuaciones de gran tamaño, aumentando de forma exponencial el coste de cálculo.

La utilización de método implícitos permite aumentar Δt y por lo tanto reducir el tamaño de los sistemas de ecuaciones a resolver. El método de Crank-Nicolson aplicado a un problema rectangular en dos dimensiones permite obtener:

$$U_{i,j}^{k+1} - U_{i,j}^k = \frac{\gamma}{2} \left[\begin{array}{l} U_{i+1,j}^{k+1} - 2U_{i,j}^{k+1} + U_{i-1,j}^{k+1} + U_{i+1,j}^k - 2U_{i,j}^k + U_{i-1,j}^k + \\ + U_{i,j+1}^{k+1} - 2U_{i,j}^{k+1} + U_{i,j-1}^{k+1} + U_{i,j+1}^k - 2U_{i,j}^k + U_{i,j-1}^k \end{array} \right]$$

El problema ahora es que hemos generado un conjunto de $M \times N$ ecuaciones acopladas de deben ser resuelta a la vez en cada etapa de tiempo (M es el número de nodos desconocidos en la dirección x y N es el número de nodos desconocidos en la dirección y). Además la matriz de coeficientes ya no es tridiagonal por lo que el cálculo en cada etapa es mucho más lento y el espacio requerido en la memoria de los ordenadores para almacenar los elementos de la matriz puede llegar a ser exorbitante.

5. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

Constantinides A., Moustoufi, N.; *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*. Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ., USA. 1999.

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.

Riggs, J.B.; *An Introduction to Numerical Methods for Chemical Engineers*. Texas Tech University Press, Lubbock, Texas. 1994.

Schiesser, W.E., Silebi, C.A.; *Computational Transport Phenomena. Numerical Methods for the Solutions of Transport Problems*. Cambridge University Press, Cambridge, UK. 1997.

Walas, S. M.; *Modeling with Differential Equations in Chemical Engineering*. Ed Butterworth-Heinemann, Stoneham, MA, USA. 1991.