

Introducción al Cómputo Científico con Python

Gerardo Tinoco Guerrero

UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO
GERARDO.TINOCO@UMICH.MX

23 al 27 de Junio de 2025
XXXIII ENOAN-EMMN



Introducción

Cómputo Científico
Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas
Ecuación de Poisson
Ecuación de Transporte
Ecuación del Calor
Ecuación de Transporte y Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico
Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas
Ecuación de Poisson
Ecuación de Transporte
Ecuación del Calor
Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

¿Qué es el cómputo científico?

Introducción al
Cómputo Científico
con Python

Gerardo Tinoco
Guerrero

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Definición

- ▶ Se trata de la construcción de modelos matemáticos y técnicas numéricas para resolver problemas científicos, de ciencias sociales y problemas de ingeniería.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Definición

- ▶ Se trata de la construcción de modelos matemáticos y técnicas numéricas para resolver problemas científicos, de ciencias sociales y problemas de ingeniería.
- ▶ Típicamente es la aplicación de modelado numérico y otras formas de cálculo de problemas en varias disciplinas científicas.

Motivación

Un gran número de ecuaciones diferenciales, que describen el comportamiento de fenómenos “reales”, no pueden ser resueltos en forma analítica:

$$\begin{aligned}\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(uh)}{\partial x} + \frac{\partial(vh)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(uh)}{\partial t} + \frac{\partial(u^2h + \frac{1}{2}gh^2)}{\partial x} + \frac{\partial(uvh)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(vh)}{\partial t} + \frac{\partial(uvh)}{\partial x} + \frac{\partial(v^2h + \frac{1}{2}gh^2)}{\partial y} &= 0\end{aligned}$$

¿Cuál es la importancia del modelado numérico?

Introducción al
Cómputo Científico
con Python

Gerardo Tinoco
Guerrero

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Diferentes métodos de aproximación

Cada método tiene sus fortalezas y debilidades con respecto a los demás, sin embargo algunos de los más usados son

- ▶ Diferencias Finitas.
- ▶ Volúmenes Finitos.
- ▶ Elementos Finitos.
- ▶ Métodos Espectrales.
- ▶ Métodos Libres de Mallas.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Para trabajar

<https://gtinoco.siiia.com.mx/docencia.html>

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Idea

- ▶ La idea principal del Método de Diferencias Finitas consiste en reemplazar las derivadas de las ecuaciones diferenciales por alguna combinación lineal de los valores de la función.

Idea

- ▶ La idea principal del Método de Diferencias Finitas consiste en reemplazar las derivadas de las ecuaciones diferenciales por alguna combinación lineal de los valores de la función.

Pregunta

¿Cómo podemos encontrar una combinación lineal adecuada?

Discretización del dominio

Primero necesitamos realizar una discretización del dominio sobre el que se va a trabajar.

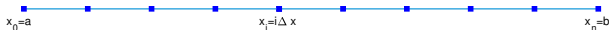
Considerando el intervalo $[a, b]$ en 1 dimensión espacial. Podemos dividir dicho intervalo en n intervalos uniformes, de medida Δx , para obtener una discretización adecuada.



Definición

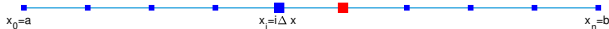
Ahora, por definición sabemos que

$$\frac{du}{dx} \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}.$$



Diferencias hacia adelante

$$\begin{aligned}\frac{du}{dx}\bigg|_{x_i} &\approx \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{(x_i + \Delta x) - x_i} \\ &\equiv \frac{u_{i+1} - u_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}\end{aligned}$$



Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

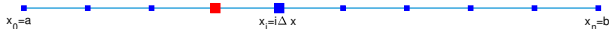
Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias hacia atrás

$$\begin{aligned}\frac{du}{dx}\bigg|_{x_i} &\approx \frac{u(x_i) - u(x_i - \Delta x)}{x_i - (x_i - \Delta x)} \\ &\equiv \frac{u_i - u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}\end{aligned}$$



Introducción

Cómputo Científico
Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas
Ecuación de Poisson
Ecuación de Transporte
Ecuación del Calor
Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias centradas

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} \Big|_{x_i} &\approx \frac{u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x)}{(x_i + \Delta x) - (x_i - \Delta x)} \\ &\equiv \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \end{aligned}$$



Diferencias de Segundo Orden

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dx^2} \Big|_{x_i} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{du}{dx} \right) \Big|_{x_i} \approx \frac{d}{dx} \left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \right) \\ &\approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \end{aligned}$$



Generalizando

¿Cómo podemos generalizar lo anterior a $2D$?

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Generalizando

¿Cómo podemos generalizar lo anterior a $2D$?

Es necesario

- Discretizar la región donde se planea trabajar.

Generalizando

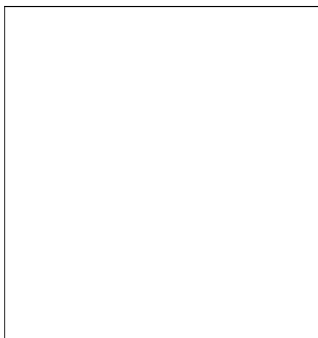
¿Cómo podemos generalizar lo anterior a $2D$?

Es necesario

- ▶ Discretizar la región donde se planea trabajar.
- ▶ Discretizar las ecuaciones en $2D$.

Región de Estudio

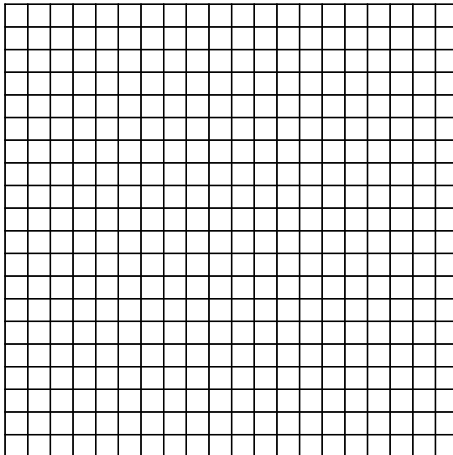
Para este caso, utilizamos el cuadrado unitario $[0, 1] \times [0, 1]$. Sin embargo se puede usar una región rectangular $[a, b] \times [c, d]$.



Discretización para Diferencias Finitas Clásicas

Introducción al
Cómputo Científico
con Python

Gerardo Tinoco
Guerrero



Introducción

Cómputo Científico
Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias hacia adelante

Ahora tenemos pasos Δx , Δy . Podemos generalizar los esquemas en diferencias hacia adelante.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x}, \\ \frac{\partial u_{i,j}}{\partial y} &\approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}.\end{aligned}$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias hacia atrás

Para las diferencias hacia atrás,

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} &\approx \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x}, \\ \frac{\partial u_{i,j}}{\partial y} &\approx \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}.\end{aligned}$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias centradas

Para las diferencias centradas,

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_{i,j}}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}, \\ \frac{\partial u_{i,j}}{\partial y} &\approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y}.\end{aligned}$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ecuación de Poisson

La ecuación de Poisson es una ecuación en Derivadas Parciales de segundo orden. Cuenta con una gran cantidad de usos en electrostática, ingeniería mecánica y física teórica.

Se expresa como

$$\nabla^2 \phi = f, \quad (1)$$

donde ϕ y f son funciones reales.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ecuación de Poisson en 1D

En una dimensión espacial, la ecuación de Poisson toma la forma

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -f. \quad (2)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ecuación de Poisson en 1D

En una dimensión espacial, la ecuación de Poisson toma la forma

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -f. \quad (2)$$

Solución numérica de la ecuación de Poisson

Se busca un esquema de diferencias finitas para aproximar la ecuación de Poisson en un dominio regular.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Esquema en Diferencias Finitas

El primer paso es reemplazar las derivadas parciales por su aproximación en diferencias finitas, esto es

$$\frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{\Delta x^2} = -f_i \quad (3)$$

Si variamos i en esta ecuación, tendremos varias ecuaciones del estilo

$$\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{\Delta x^2} = -f_2$$

las cuales deben de resolverse de manera simultanea.

Un sistema Matricial

Al juntar todas estas ecuaciones, obtendremos un sistema de la forma

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f_1 \\ -f_2 \\ -f_3 \\ \vdots \\ -f_m \end{pmatrix} \quad (4)$$

Condiciones de Frontera

Es normal que en un problema de este estilo se cuenten con condiciones en las fronteras de la región, en este caso quiere decir que se conocen los valores de ϕ_1 y ϕ_m , tomando en cuenta lo anterior, tenemos el sistema

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \vdots \\ \phi_{m-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f_2 \\ -f_3 \\ -f_4 \\ \vdots \\ -f_{m-1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

tomando en cuenta que $(-f_1 - \phi_1/\Delta x^2)$ y $(-f_m - \phi_m/\Delta x^2)$ también forman parte de la aproximación.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Solución del Sistema

Una vez que se tiene ensamblado el sistema, tendremos un sistema lineal de la forma

$$A\phi = -f$$

el cual puede resolverse de una gran cantidad de formas.

Ejemplo Numérico

Aproximar la solución del problema

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 2 \sin(x) + x \cos(x).$$

Con condiciones de frontera

$$\phi(\partial\Omega) = x \cos(x)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Otro enfoque de Diferencias Finitas

Una vez que ya hemos reemplazado las derivadas de la ecuación por su aproximación en diferencias finitas

$$\frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{\Delta x^2} = -f_i$$

Podemos despejar ϕ_i para obtener la expresión

$$\phi_i = \frac{1}{2} \left(\Delta x^2 f + \phi_{i-1} + \phi_{i+1} \right) \quad (6)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ecuación de Poisson en 2D

En dos dimensiones espaciales, la ecuación de Poisson toma la forma

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = -f. \quad (7)$$

Solución numérica de la ecuación de Poisson

Se busca un esquema de diferencias finitas para aproximar la ecuación de Poisson en un dominio regular.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Esquema en Diferencias Finitas

Siguiendo la misma idea que en el caso en 1D, comenzamos por reemplazar las derivadas parciales por su aproximación en diferencias finitas,

$$\frac{\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{\Delta y^2} = -f_{i,j} \quad (8)$$

Esto nuevamente nos generará un sistema de ecuaciones. Para facilitar las cuentas y tomando en cuenta que se trata de una región regular, supongamos que

$$\Delta x = \Delta y = h.$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Un sistema Matricial

Al juntar todas la ecuaciones y tomando en cuenta las condiciones de frontera, nuestro sistema de ecuaciones ahora tendrá la forma

$$A\phi = -f \quad (9)$$

donde

$$\phi = [\phi_{11}, \phi_{21}, \dots, \phi_{m1}, \phi_{12}, \phi_{22}, \dots, \phi_{m2}, \dots, \phi_{mn}]^T,$$

$$f = h^2[f_{11}, f_{21}, \dots, f_{m1}, f_{12}, f_{22}, \dots, f_{m2}, \dots, f_{mn}]^T.$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Matriz por bloques

Y, por último,

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Matriz por bloques

Para el caso de $m = 5$

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{array} \right) \quad (11)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ejemplo Numérico

Aproximar la solución del problema

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 10e^{2x+y}$$

Con condiciones de frontera

$$\phi(\partial\Omega) = 2e^{2x+y}$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Otro enfoque de Diferencias Finitas

Nuevamente, una vez que ya hemos reemplazado las derivadas de la ecuación por su aproximación en diferencias finitas

$$\frac{\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j+1}}{\Delta y^2} = -f_{i,j},$$

y suponiendo que

$$\Delta x = \Delta y = h,$$

podemos despejar $\phi_{i,j}$ para obtener la expresión

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4} \left(\phi_{i-1,j} + \phi_{i+1,j} + \phi_{i,j-1} + \phi_{i,j+1} - h^2 f_{i,j} \right) \quad (12)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ecuación de Advección

Si una sustancia esta siendo transportada en un fluido a una velocidad constante a , entonces la función del flujo puede escribirse como

$$f(u) = au$$

Entonces podemos saber el flujo de materia que pasa por el punto x simplemente multiplicando la densidad local $u(x, t)$ por la velocidad de transporte. Como el total de la masa que pasa entre x_1 y x_2 cambia únicamente debido al flujo en los puntos finales, podemos calcularla como

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} u(x, t) dx = f(u(x_1, t)) - f(u(x_2, t)),$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ecuación de Advección

Si asumimos que u y f son funciones *suaves*, podemos escribir

$$\int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} f(u(x, t)) \right] dx = 0,$$

de aquí

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

o, escrito de otra forma

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + a \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) = 0.$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

¿Cómo discretizar la ecuación?

Tenemos que discretizar el operador, y para ello tomaremos en cuenta esquemas de Diferencias Finitas tanto para la derivada temporal como para la derivada espacial.

Discretización FTBS

Para la parte temporal tomaremos un esquema de diferencias hacia adelante, y un esquema de diferencias hacia atrás en el espacio.

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_i^k - u_{i-1}^k}{\Delta x}$$

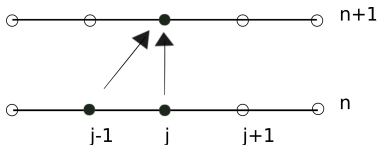
Discretización

Sustituyendo en la ecuación de advección

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = -a \left(\frac{u_i^k - u_{i-1}^k}{\Delta x} \right).$$

O, despejando

$$u_i^{k+1} = u_i^k - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^k - u_{i-1}^k).$$



Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización FTCS

Para el caso centrado, nuevamente tomamos un esquema en diferencias hacia adelante en el tiempo, pero ahora tomamos diferencias centradas en el espacio.

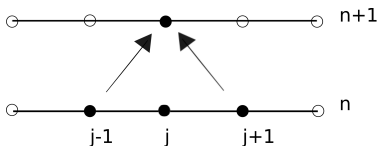
$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1}^k - u_{i-1}^k}{2\Delta x}$$

Discretización FTCS

En este caso

$$u_i^{k+1} = u_i^k - a \frac{\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^k - u_{i-1}^k).$$



Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Discretización FTFS

En este caso tomaremos un esquema de diferencias hacia adelante, para tiempo y espacio.

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1}^k - u_i^k}{\Delta x}$$

entonces

$$u_i^{k+1} = u_i^k - a \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^k - u_i^k).$$

Ecuación de Advección

La ecuación de advección en dos dimensiones espaciales puede escribirse como

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} = 0,$$

donde a y b son las velocidades en las direcciones horizontal y vertical respectivamente.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Diferentes esquemas para la ecuación de Advección

► FTBS:

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k - \Delta t \left(a \frac{u_{i,j}^k - u_{i-1,j}^k}{\Delta x} + b \frac{u_{i,j}^k - u_{i,j-1}^k}{\Delta y} \right)$$

► FTCS:

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k - \Delta t \left(a \frac{u_{i+1,j}^k - u_{i-1,j}^k}{2\Delta x} + b \frac{u_{i,j+1}^k - u_{i,j-1}^k}{2\Delta y} \right)$$

► FTFS:

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k - \Delta t \left(a \frac{u_{i+1,j}^k - u_{i,j}^k}{\Delta x} + b \frac{u_{i,j+1}^k - u_{i,j}^k}{\Delta y} \right)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Ecuación de Difusión

La ecuación de difusión se utiliza para modelar las fluctuaciones de densidad de un material que se encuentra difundiéndose. Puede ser escrita, de manera general, como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \nabla^2 u.$$

donde u representa la concentración de material que se difunde y ν es el coeficiente de difusividad.

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización

En el caso en una dimensión espacial, la ecuación de difusión se escribe

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

Ahora, ¿Cómo se puede hacer un esquema de diferencias finitas para aproximar u ?

Discretización

En este caso, podemos ver que necesitamos utilizar diferencias finitas de segundo orden para la parte espacial.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2},$$

con lo que obtenemos

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right)$$

Ahora surge la duda, ¿Qué hacemos con la derivada temporal?

Discretización

Para la parte temporal, podemos reemplazar la derivada temporal por su aproximación en diferencias hacia adelante

$$\frac{du}{dt} \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t},$$

y con esto podemos escribir

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = \nu \frac{u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k}{\Delta x^2},$$

o, despejando u_i^{k+1} ,

$$u_i^{k+1} = u_i^k + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k).$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ejemplo Numérico

Aproximar la solución del problema de difusión sujeto a las condiciones

$$u(0, t) = e^{-\pi^2 \nu t} \cos(\pi x)$$

y

$$u(x, 0) = \cos(\pi x)$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización

En el caso de dos dimensiones espaciales, la ecuación de difusión se escribe como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right).$$

Nuevamente surge la duda, ¿Cómo se puede hacer un esquema de diferencias finitas para aproximar u ?

Discretización

Al igual que en el caso en $1 + 1D$, podemos utilizar diferencias finitas de segundo orden para la parte espacial.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2},$$

con lo que obtenemos

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right)$$

¿Podemos hacer lo mismo para la derivada temporal?

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización

Para la parte temporal, reemplazamos nuevamente la derivada temporal por su aproximación en diferencias hacia adelante

$$\frac{du}{dt} \approx \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t},$$

y con esto podemos escribir

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t} = \nu \left(\frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} \right),$$

o, despejando $u_{i,j}^{k+1}$,

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} \left(u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k \right) + \frac{\nu \Delta t}{\Delta y^2} \left(u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k \right).$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ejemplo Numérico

Aproximar la solución del problema de difusión sujeto a las condiciones de frontera

$$u(x, y, t)|_{\Omega} = e^{(-2\pi^2 \nu t) \cos(\pi x) \cos(\pi y)}$$

y condición inicial

$$u(x, y, 0) = e^{\cos(\pi x) \cos(\pi y)}$$

Ecuación de Difusión

La ecuación de advección-difusión describe fenómenos físicos donde las partículas, energía o algunas otra cantidad física es transportada y difundida en un medio debido a dos procesos diferentes: Advección y Difusión.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-\nu \nabla u(\vec{r}, t) + \vec{v} u(\vec{r}, t)) = 0,$$

donde u representa la concentración de material que se difunde, ν es el coeficiente de difusividad y $\vec{v}$ son las velocidades de transporte.

Discretización

En el caso en una dimensión espacial, la ecuación de advección-difusión se escribe

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a \frac{\partial u}{\partial x}$$

Ahora, ¿Cómo se puede hacer un esquema de diferencias finitas para aproximar u ?

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización

En este caso, podemos ver que necesitamos utilizar diferencias finitas de segundo orden para la parte espacial.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2},$$

con lo que obtenemos

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right) - a \frac{\partial u}{\partial x}.$$

Ahora surge la duda, ¿Qué hacemos con la otra derivada espacial?

Discretización

Para la segunda derivada espacial, es una buena idea usar diferencias finitas centradas.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x},$$

con lo que obtenemos

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right) - a \left(\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \right).$$

¿Cómo manejamos la derivada temporal?

Discretización

Para la parte temporal, al igual que en los casos anteriores, podemos reemplazar la derivada temporal por su aproximación en diferencias hacia adelante

$$\frac{du}{dt} \approx \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t},$$

y con esto podemos escribir

$$\frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = \nu \left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} \right) - a \left(\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \right),$$

despejando u_i^{k+1} ,

$$u_i^{k+1} = u_i^k + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} \left(u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k \right) - \frac{a \Delta t}{2\Delta x} \left(u_{i+1}^k - u_{i-1}^k \right).$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Ejemplo Numérico

Aproximar la solución del problema de advección-difusión sujeto a las condiciones de frontera

$$u(x, t)|_{\Omega} = \left(\frac{1}{4t + 1} \right) e^{-\frac{(x - at - 0.5)^2}{\nu(4t + 1)}},$$

y condición inicial

$$u(x, 0) = e^{-\frac{(x - 0.5)^2}{\nu}}.$$

Discretización

En el caso de dos dimensiones espaciales, la ecuación de difusión se escribe como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - a \frac{\partial u}{\partial x} - b \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Nuevamente surge la duda, ¿Cómo se puede hacer un esquema de diferencias finitas para aproximar u ?

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización

Al igual que en el caso en $1 + 1D$, podemos utilizar diferencias finitas de segundo orden para la primera parte espacial y centradas para la segunda.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2},$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y},$$

con lo que obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & \nu \left(\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) \\ & - a \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \right) - b \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} \right). \end{aligned}$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Discretización

Para la parte temporal,

$$\frac{du}{dt} \approx \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t},$$

y con esto

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t} = & \nu \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) \\ & - a \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \right) - b \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} \right). \end{aligned}$$

o

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{k+1} = & u_{i,j}^k + \nu \Delta t \left(\frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} \right) \\ & - a \Delta t \left(\frac{u_{i+1,j}^k - u_{i-1,j}^k}{2\Delta x} \right) - b \Delta t \left(\frac{u_{i,j+1}^k - u_{i,j-1}^k}{2\Delta y} \right). \end{aligned}$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Ejemplo Numérico

Aproximar la solución del problema de advección-difusión sujeto a las condiciones de frontera

$$u(x, y, t)|_{\Omega} = \left(\frac{1}{4t+1} \right) e^{-\frac{(x-at-0.5)^2}{\nu(4t+1)} - \frac{(y-bt-0.5)^2}{\nu(4t+1)}},$$

y condición inicial

$$u(x, y, 0) = e^{-\frac{(x-0.5)^2}{\nu} - \frac{(y-0.5)^2}{\nu}}.$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

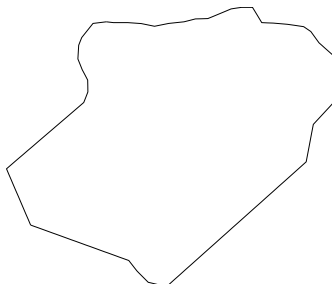
Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas



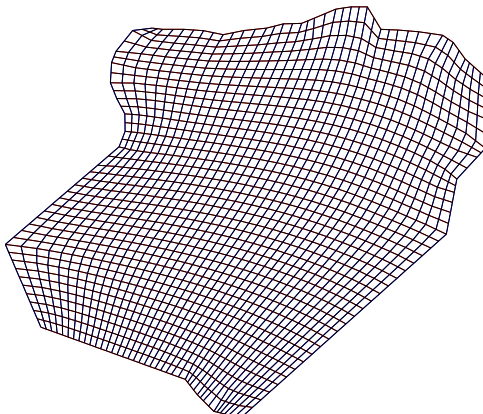
- ▶ Los esquemas clásicos de diferencias no se pueden aplicar en mallas irregulares.
- ▶ Necesitamos esquemas alternos y mallas adecuadas para el problema.

Ejemplo de una malla irregular

Introducción al
Cómputo Científico
con Python

Gerardo Tinoco
Guerrero

Usando UNAMALLA (<http://www.mathmoo.unam.mx/unamalla/>).



Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

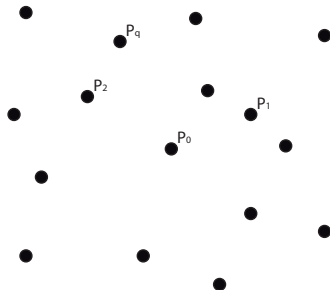
Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas



El enfoque de diferencias finitas

Para hacerlo necesitamos aproximar el operador lineal de segundo orden

$$Lu = Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F$$

en el punto p_0 , utilizando aproximaciones de los valores de u en algunos de sus vecinos.

Una combinación lineal

Queremos encontrar

$$L_0 = \Gamma_0 u(p_0) + \Gamma_1 u(p_1) + \cdots + \Gamma_q u(p_q).$$

Este esquema es consistente si

$$[Lu]_{p_0} - L_0 \rightarrow 0$$

cuando $p_1, \dots, p_q \rightarrow p_0$.

$$\begin{aligned} & [Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu]_{p_0} - \sum_{i=0}^q \Gamma_i u(p_i) = \\ & \left(F(p_0) - \sum_{i=0}^q \Gamma_i \right) u(p_0) + \left(D(p_0) - \sum_{i=1}^q \Gamma_i \Delta x_i \right) u_x(p_0) + \\ & \left(E(p_0) - \sum_{i=1}^q \Gamma_i \Delta y_i \right) u_y(p_0) + \left(A(p_0) - \sum_{i=1}^q \frac{\Gamma_i (\Delta x_i)^2}{2} \right) u_{xx}(p_0) + \\ & \left(B(p_0) - \sum_{i=1}^q \Gamma_i \Delta x_i \Delta y_i \right) u_{xy}(p_0) + \left(C(p_0) - \sum_{i=1}^q \frac{\Gamma_i (\Delta y_i)^2}{2} \right) u_{yy}(p_0) + \\ & \mathcal{O}(\max\{\Delta x_i, \Delta y_i\})^4 \end{aligned}$$

Lo que queremos

$$F(p_0) - \sum_{i=0}^q \Gamma_i = 0,$$

$$D(p_0) - \sum_{i=1}^q \Gamma_i \Delta x_i = 0,$$

$$E(p_0) - \sum_{i=1}^q \Gamma_i \Delta y_i = 0,$$

$$A(p_0) - \sum_{i=1}^q \frac{\Gamma_i (\Delta x_i)^2}{2} = 0,$$

$$B(p_0) - \sum_{i=1}^q \Gamma_i \Delta x_i \Delta y_i = 0,$$

$$C(p_0) - \sum_{i=1}^q \frac{\Gamma_i (\Delta y_i)^2}{2} = 0.$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Un problema equivalente

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & \Delta x_1 & \dots & \Delta x_q \\ 0 & \Delta y_1 & \dots & \Delta y_q \\ 0 & (\Delta x_1)^2 & \dots & (\Delta x_q)^2 \\ 0 & \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_q \Delta y_q \\ 0 & (\Delta y_1)^2 & \dots & (\Delta y_q)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(p_0) \\ D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2A(p_0) \\ B(p_0) \\ 2C(p_0) \end{pmatrix}.$$

- ▶ 6 ecuaciones y $q + 1$ incógnitas.
- ▶ Resolver en el sentido de cuadrados mínimos.

Resolviendo por cuadrados mínimos

Consideramos las últimas 5 ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 & \dots & \Delta x_q \\ \Delta y_1 & \dots & \Delta y_q \\ (\Delta x_1)^2 & \dots & (\Delta x_q)^2 \\ \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_q \Delta y_q \\ (\Delta y_1)^2 & \dots & (\Delta y_q)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Gamma_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2A(p_0) \\ B(p_0) \\ 2C(p_0) \end{pmatrix},$$

Para calcular Γ_0 utilizamos

$$\Gamma_0 = F(p_0) - \Gamma_1 \dots - \Gamma_q.$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a

Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

Aplicando al operador lineal

Podemos aplicar el esquema al operador

$$\nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

Esquema

$$u_0^{k+1} = u_0^k + \sum_{l=0}^q \Gamma_l(u_0, \dots, u_q) u_l^k,$$

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas
Generalizadas

¿Dudas?

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a Python para el cómputo Científico

Métodos Clásicos de Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los esquemas de Diferencias Finitas Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

Introducción

Cómputo Científico

Métodos de aproximación

Introducción a
Python para el
cómputo Científico

Métodos Clásicos de
Aproximación

Diferencias Finitas

Ecuación de Poisson

Ecuación de Transporte

Ecuación del Calor

Ecuación de Transporte y
Difusión

Introducción a los
esquemas de
Diferencias Finitas
Generalizadas

Diferencias Finitas

Generalizadas

¿Dudas?

gerardo.tinoco@umich.mx

¿Dudas?

gerardo.tinoco@umich.mx

¡Muchas Gracias por su Atención!