

Resolución de la ecuación de difusión mediante diferencias finitas

David Freire Fernández

9 de febrero de 2021

1 Ecuación de difusión

La ecuación de difusión está relacionada con el estudio de caminantes aleatorios. Si consideramos una partícula realizando un paseo aleatorio en una dimensión, su movimiento es estocástico y definimos el kernel $K(x, x_0; t)$ como la densidad de probabilidad de observar a la partícula en la posición x en un tiempo t si parte de x_0 en $t = 0$. La ecuación que determina este kernel viene dada por:

$$\frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 K(x, x_0; t)}{\partial x^2} \quad (1.1)$$

Conocida como ecuación de difusión. El coeficiente D depende de las características del sistema. Recordemos que las funciones de densidad de probabilidad deben estar normalizadas:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx = 1 \quad \forall t \quad (1.2)$$

Si imponemos la condición anterior en $t=0$, entonces se mantendrá normalizada para todo t si y solo si:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx \right) = 0 \quad (1.3)$$

Para que eso se cumpla:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) dx \right) = D \left(\left. \frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow \infty} - \left. \frac{\partial K(x, x_0; t)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow -\infty} \right) = 0 \quad (1.4)$$

Es decir, se deben de anular los dos sumandos a la derecha de la igualdad.

Suponiendo N partículas que empiezan desde un mismo origen en $t = 0$:

$$K(x, x_0; t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left(\frac{-x^2}{4Dt} \right) \quad (1.5)$$

En los casos siguientes consideraremos $D = 1$ y definimos:

$$u(x, t) \equiv K(x - x_0, x_0; t)$$

2 Conducción de calor en una varilla delgada

Consideremos una varilla delgada de longitud L y definimos la función de distribución de temperatura como $T(x, t)$. Supongamos que mantenemos los dos extremos de la varilla a la misma temperatura $T(0, t) = T(L, t) = T_0 \forall t$. Si la distribución de temperaturas inicial en todos los puntos, excepto los extremos es $T(x, 0)$, entonces la evolución de la distribución de temperatura con el tiempo vendrá determinada por la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

siendo α el parámetro de difusividad térmica.

Si definimos:

$$u(x, t) = \frac{T\left(xL, \frac{L^2}{\alpha}t\right) - T_0}{T_0} \quad (2.2)$$

con $x \in [0, 1]$. Este función es adimensional, nos va a llevar a expresiones más simplificadas, nos da la fracción de la diferencia de temperatura entre los extremos de la varilla y cumple las siguientes condiciones de Dirichlet:

$$u(0, t) = u(1, t) = 0$$

Entonces nuestra ecuación 2.1 se reduce a:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.3)$$

Y la ecuación 1.4 es de la forma:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_0^1 u(x, t) dx \right) = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=1} - \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0}$$

El problema es que para nuestras condiciones de contorno (ambos extremos a la misma temperatura), no se cumple la relación 1.4 para todos los tiempos.

Para $u(x, 0) = \sin(\pi x)$, la solución analítica de este caso es

$$u(x, t) = \sin(\pi x) \exp(-\pi^2 t)$$

Que como podemos comprobar:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_0^1 u(x, t) dx \right) = -2\pi e^{-\pi^2 t}$$

Es decir, se cumple la condición de normalización tan solo para tiempos altos (perfectamente para $t \rightarrow \infty$). Esta relación lo que nos dice es que para tiempos largos, la varilla estará a temperatura constante, siendo esta temperatura la de los extremos (T_0).

2.1 Algoritmo

Queremos resolver numéricamente la ecuación 2.3 en el intervalo $x \in [0, 1]$ para $t \in [0, t_f]$. Para ello vamos a definir una malla 2-dimensional y vamos a aproximar la ecuación diferencial mediante diferencias finitas.

La malla tendrá N_x puntos espaciales $x_i \in [0, 1]$

$$x_i = i \cdot \Delta x \quad i = 0, \dots, N_x - 1$$

con $\Delta x = \frac{1}{N_x - 1}$.

Equivalentemente, tendrá N_t puntos temporales con $t_j \in [0, t_f]$

$$t_i = j \cdot \Delta t \quad j = 0, \dots, N_t - 1$$

con $\Delta t = \frac{t_f}{N_t - 1}$.

Entonces, aproximamos nuestra función $u(x, t)$ por los valores que obtendremos de nuestro algoritmo, i.e.:

$$u(x, t) \approx u(x_i, t_j)$$

Las derivadas parciales las podemos aproximar mediante diferencias finitas como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &\approx \frac{1}{\Delta t} (u_{i,j+1} - u_{i,j}) \\ \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} &\approx \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \end{aligned}$$

Entonces, sustituyéndolo en la ecuación 2.3 obtenemos:

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \quad (2.4)$$

Esto lo podemos resolver fácilmente con un algoritmo iterativo tipo Gauss-Seidel.

El parámetro $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ determina la estabilidad en la evolución temporal, este parámetro (conocido como de Courant) debe ser:

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$$

2.2 Estructura del programa

Debido a la relación 2.4 obtenida, podemos crear 2 arrays unidimensionales de tal manera que dentro de un mismo ciclo, calculemos $u_{i,j+1}$ para todo i , escribimos en un fichero e iteramos de nuevo en el tiempo, así hasta $j \cdot \Delta t = t_f$. De esta manera, ahorramos espacio en memoria al no necesitar almacenar los datos en arrays 2-dimensionales.

En el programa estos arrays son $u[N_x]$ y $d2udx2[N_x]$. Los datos se almacenan en $u[0], \dots, [N_x - 1]$ y $d2udx2[0], \dots, d2udx2[N_x - 1]$. Los valores de N_x , N_t y t_f deben introducirse al ejecutar el programa.

La salida está en un fichero de texto d.dat que contiene tres columnas: $(t_j, x_i, u_{i,j})$.

2.3 Resultados y discusión

Programando el algoritmo anterior en el programa del anexo difusion1.cpp, obtenemos que $u(x, t)$ evoluciona de la forma:

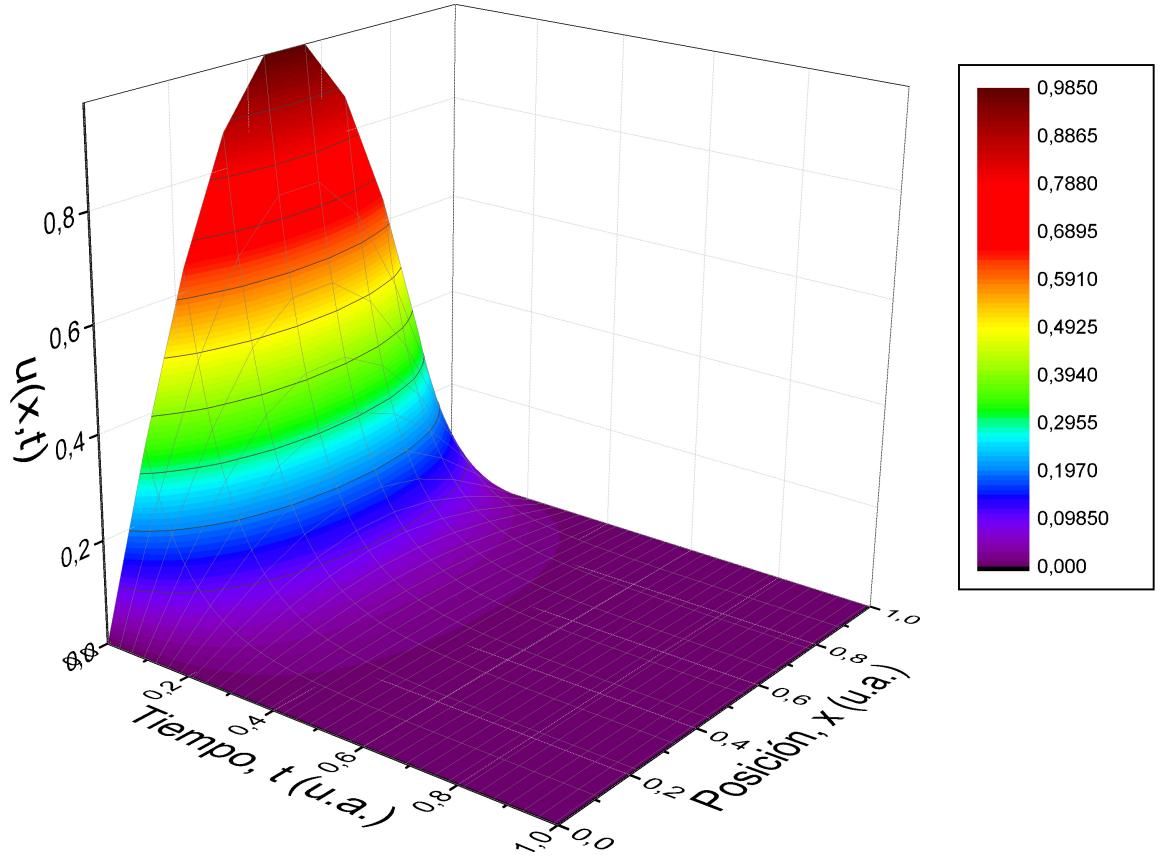


Figure 1: Gráfica en 3D de $u(x,t)$.

Aquí podemos observar el decaimiento exponencial de $u(x,0) = \sin(\pi x)$ en función de t , como predice la ecuación (1.5). Como vemos, rápidamente decae uniformemente a un valor constante 0. Esto nos indica que $T(x,t) \forall x,t$ alcanza un valor constante $T(x,t) = T_0$, es decir, alcanza el valor de la temperatura de los extremos, como era de esperar. Esto también lo podemos observar en la superficie de contorno:

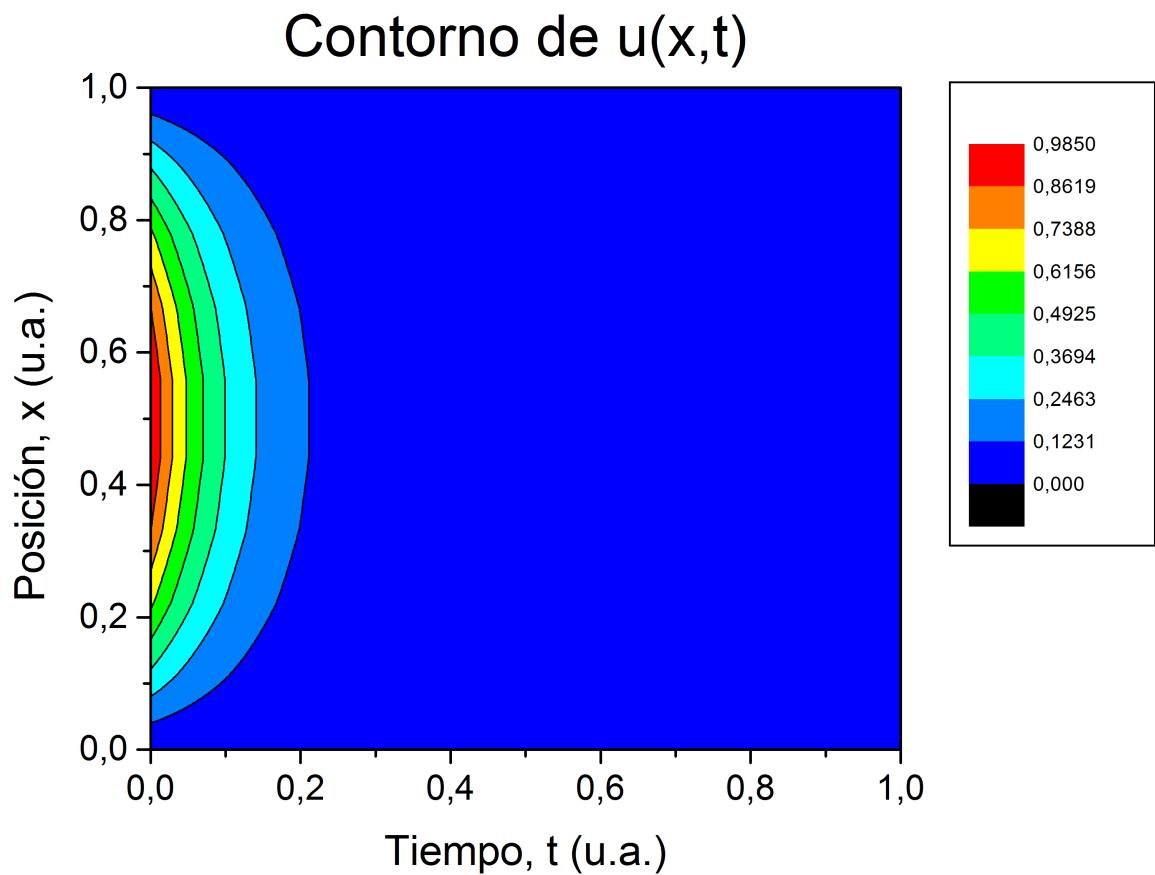


Figure 2: Contorno de $u(x,t)$.

Si comparamos los resultados obtenidos, con la solución analítica $u(x,t) = \sin(\pi x) \exp(-\pi^2 t)$ obtenemos:

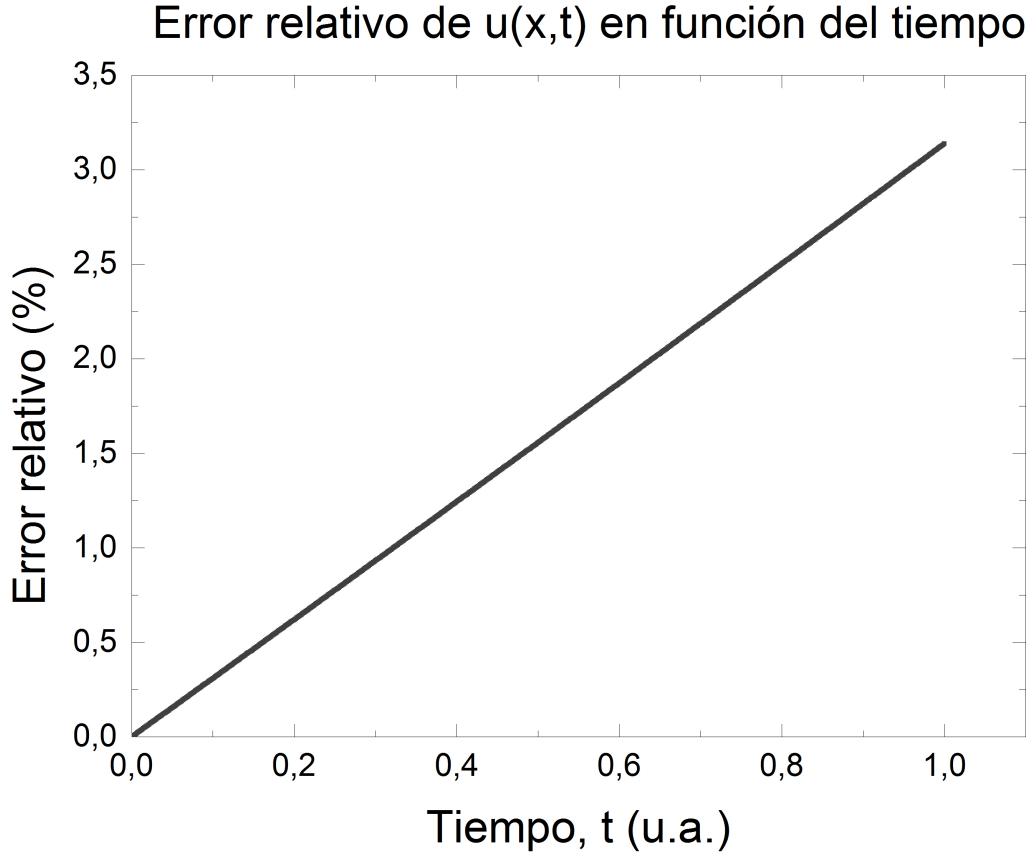


Figure 3: Error relativo en función del tiempo.

Como podemos ver en la imagen anterior el error relativo aumenta con el tiempo de manera lineal. Esto es debido principalmente a que no se cumple la condición de normalización para todo tiempo.

3 Difusión en un círculo

Como hemos visto en el apartado anterior, nuestro sistema no cumplía la condición de normalización para todos los tiempos, tan solo para tiempos grandes. Esto lo podemos resolver imponiendo condiciones de contorno periódicas, i.e. como si nuestro sistema 1-dimensional estará cerrado (como un círculo). De esta manera tenemos:

$$u(0, t) = u(1, t); \quad \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial u(1, t)}{\partial x}$$

De esta forma se cumple la condición 1.4.

En este caso el algoritmo de discretización es idéntico al apartado anterior excepto en la frontera en la que:

$$u_{0,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{1,j} - 2u_{i,j} + u_{N_x-1,j})$$

$$u_{N_x-1,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{0,j} - 2u_{i,j} + u_{N_x-2,j})$$

En este caso vamos a considerar inicialmente una partícula en la posición más central del círculo x_0 , i.e. $u(x, 0) = \delta(x - x_0)$ (recordemos que $x_i \in [0, 1]$).

En el archivo d2.dat vamos a escribir lo mismo que en el caso anterior.
 En el archivo d3.dat vamos a escribir:

$$U_j = \sum_{i=0}^{N_x-1} u_{i,j}$$

Para comprobar que nuestra función está normalizada para todo j (en cada instante de tiempo). Además vamos a calcular el valor esperado del cuadrado de la posición de la partícula para cada instante de tiempo:

$$\langle r^2 \rangle_j = \sum_{i=0}^{N_x-1} u_{i,j} (x_i - x_0)^2 \quad (3.1)$$

Ya que podemos demostrar teóricamente que para tiempos grandes:

$$\langle r^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x_0; t) (x - x_0)^2 dx \sim 2t \quad (3.2)$$

Esta relación es lo que caracteriza a un movimiento Browniano, ya que lo que esperaríamos clásicamente es que $r^2 \sim t^2$.

Por lo que calculando 3.1 podemos comprobar si se cumple la relación lineal con el tiempo esperada.

También, en este fichero se escriben valores de $u_{i,j}$ para comprobar que para tiempos largos, $u(x, t) \sim \text{constante}$.

3.1 Resultados y discusión

Los resultados obtenidos del programa diffusion2.cpp son:

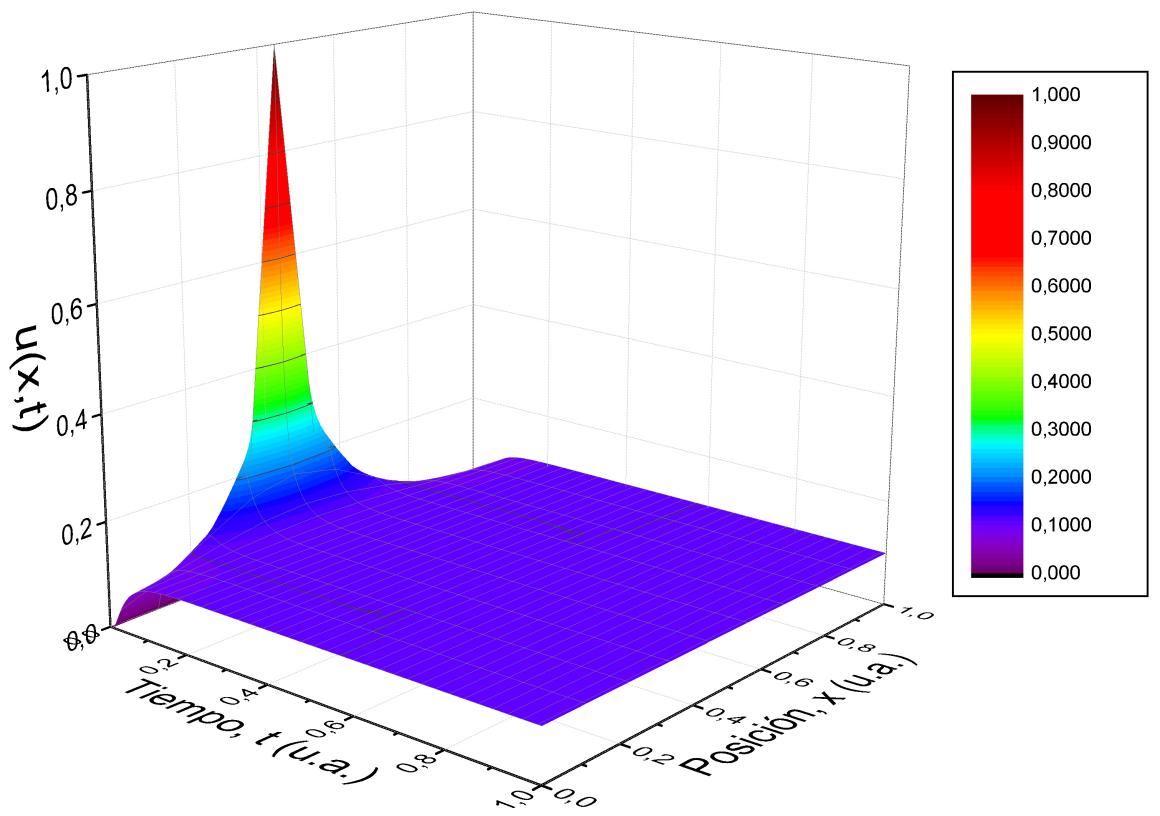


Figure 4: Gráfica en 3D de $u(x,t)$.

Contorno de $u(x,t)$

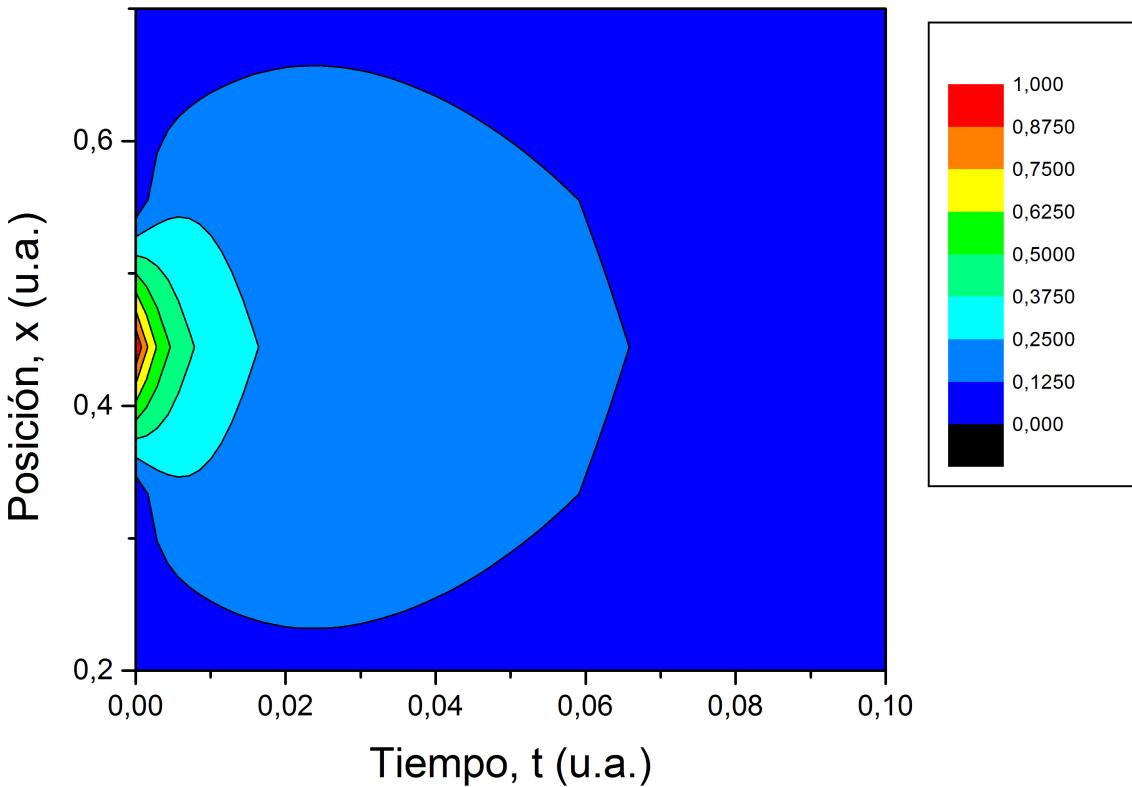


Figure 5: Contorno de $u(x,t)$.

En este caso la $u(x,t)$ la podemos interpretar como la función densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en (x, t) . Como podemos ver, para $t=0$, la partícula está en una posición bien definida y empieza su paseo. En su evolución temporal cada vez se va volviendo más y más uniforme está densidad de probabilidad, i.e. cada vez la tenemos más deslocalizada, hasta que a partir de un tiempo (en nuestro caso cercano a 0.06) ya está casi completamente deslocalizada. Esto quizás se vea mejor en la siguiente figura (ya que en la anterior figura, los nueve colores utilizados nos limitan la resolución):

Evolución temporal de $u(x,t)$ para distintas posiciones

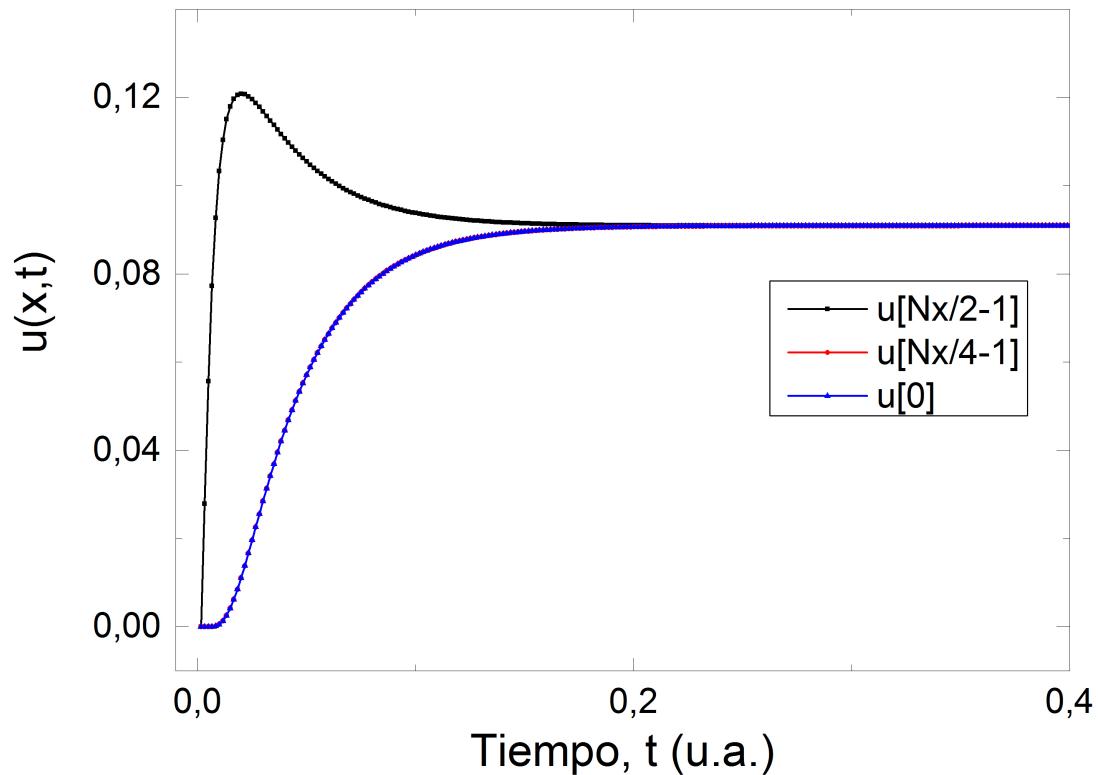


Figure 6: Evolución temporal de $u(x,t)$ para 3 valores distintos de x en función del tiempo.

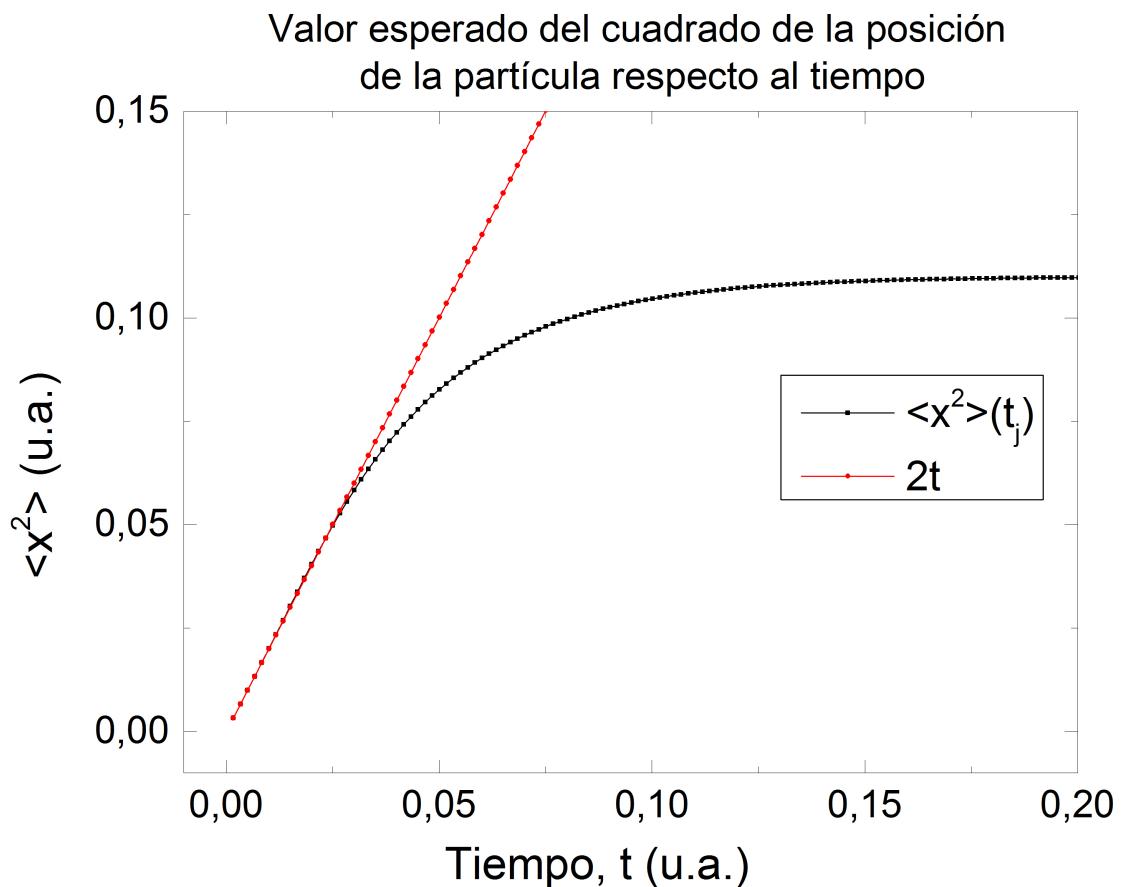


Figure 7: Valor esperado del cuadrado de la posición en función del tiempo.

Como podemos ver, antes de alcanzar el equilibrio, el valor esperado del cuadrado de la posición sigue una relación lineal con el tiempo de la forma $2t$, característica del movimiento Browniano.