Ecuaciones Diferenciales Parciales

Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas

Cristopher Arenas
cristopher.arenas@usm.cl

Universidad Técnica Federico Santa María
Computación Científica II - ILI286

v0.36b

EDPs Parabólicas

Se llamará EPD parabólica a una EDP que tiene la forma:

$$A\,u_{xx} + B\,u_{xy} + C\,u_{yy} + F(u_x, u_y, u, x, y) = 0$$

y se cumple $B^2 - 4\,A\,C = 0$. O bien, teniendo una forma más general, que es posible reducirla a un caso equivalente al anterior.

1. Ecuación de Difusión/Ecuación de Calor

$$u_t(x,t) = D\, u_{xx}(x,t)$$

2. Ecuación de Advección-Difusión

$$u_t(x,t) = D\, u_{xx}(x,t) + b\, u_x(x,t)$$

$D > 0$ es llamado coeficiente de difusividad.

- Se asocian con una evolución en el tiempo, además de cambios en el espacio.
- En general las soluciones son disipativas, es decir, los valores máximos disminuyen en el tiempo.

Sea $t \in [0, T_{max}]$ y $x \in [a, b]$. ¿Qué función $u(x, y)$ es solución de la siguiente EDP?

$$
\begin{aligned}
u_t(x,t) &= u_{xx}(x,t) \\
u(x,0) &= f(x) \\
u(a,t) &= l(t) \\
u(b,t) &= r(t)
\end{aligned}
$$

Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas

Diferencias Finitas

Reemplazar una derivada por una diferencia de ciertos valores que sea aproximadamente equivalente. El problema contínuo se reemplaza por un problema finito consistente en un número finito de ecuaciones involucrando los valores de las aproximaciones utilizadas sobre valores discretos de función incógnita u.

Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas

¿Cómo puede aplicarse diferencias finitas para la ecuación de difusión con condiciones de Dirichlet?

$$u_t(x,t) = D\, u_{xx}(x,t)$$

Se tienen las aproximaciones:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t) - u(x,t-\Delta t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t-\Delta t)}{2\,\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+\Delta x,t) - 2\,u(x,t) + u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

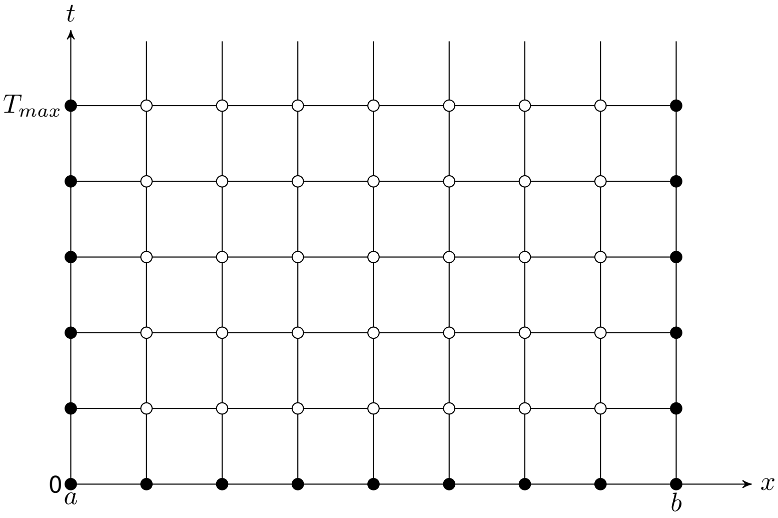
Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas

No se busca resolver la ecuación en todos los puntos, sino únicamente en los puntos de la discretización. Esto es, los valores:

$$
\begin{aligned}
w_{i,n} \approx u(x_i, t_n) \quad & i \in \{0, 1, \ldots, N_x\} \\
& n \in \{0, 1, \ldots, N_t\}.
\end{aligned}
$$

Existen por lo tanto $(N_x + 1) \times (N_t + 1)$ incógnitas que se deben encontrar.

Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas



Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas

A diferencia de las ecuaciones elípticas, no se resolverán todas las incógnitas simultáneamente, sino que se hará *evolucionar* la solución:

$$
\begin{array}{cc}
w_{0,0}, w_{1,0}, w_{2,0}, \ldots, w_{N_x,0} & (t = t_0) \\
\downarrow & \\
w_{0,1}, w_{1,1}, w_{2,1}, \ldots, w_{N_x,1} & (t = t_1 = t_0 + \Delta t) \\
\downarrow & \\
w_{0,2}, w_{1,2}, w_{2,2}, \ldots, w_{N_x,2} & (t = t_2 = t_1 + \Delta t) \\
\downarrow & \\
\vdots & \\
\downarrow & \\
w_{0,N_t}, w_{1,N_t}, w_{2,N_t}, \ldots, w_{N_x,N_t} & (t = t_{N_t})
\end{array}
$$

Esquema Explícito

Se utiliza la aproximación *adelantada* de la derivada temporal:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$
$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+\Delta x,t) - 2\,u(x,t) + u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

o utilizando la variable $w_{i,n}$:

$$u_t(x_i,t_n) \approx \frac{w_{i,n+1} - w_{i,n}}{\Delta t}$$
$$u_{xx}(x_i,t_n) \approx \frac{w_{i+1,n} - 2\,w_{i,n} + w_{i-1,n}}{\Delta x^2}$$

Reemplazando en la ecuación de difusión, se tiene:

$$\frac{w_{i,n+1} - w_{i,n}}{\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n} - 2\,w_{i,n} + w_{i-1,n})$$

Sea $\sigma = \dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2}$. Reescribiendo la expresión anterior y reordenando términos:

$$w_{i,n+1} = \sigma\,w_{i+1,n} + (1 - 2\,\sigma)w_{i,n} + \sigma\,w_{i-1,n}$$

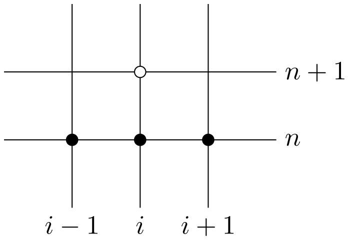
Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas
Esquema Explícito

El esquema explícito para la ecuación de difusión es:

$$w_{i,n+1} = \sigma\, w_{i+1,n} + (1 - 2\,\sigma) w_{i,n} + \sigma\, w_{i-1,n}$$

con $\sigma = \dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2}$.

Stencil:



El esquema numérico explícito es por tanto:

$$\begin{bmatrix} w_{0,0} \\ w_{1,0} \\ w_{2,0} \\ \vdots \\ w_{N_x,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(N_x) \end{bmatrix}$$

y para $n \geq 0$:

$$\begin{bmatrix} w_{0,n+1} \\ w_{1,n+1} \\ w_{2,n+1} \\ \vdots \\ w_{N_x,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sigma & 1-2\,\sigma & \sigma & \dots & 0 \\ 0 & \sigma & 1-2\,\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n} \\ w_{1,n} \\ w_{2,n} \\ \vdots \\ w_{N_x,n} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} l(t_{n+1}) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ r(t_{n+1}) \end{bmatrix}$$

Ventajas

- Simple de programar.
- Bajo costo computacional.

Desventajas

- Esquema explícito requiere que $\dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2} < \dfrac{1}{2}$ para ser estable.
- Discretización temporal está condicionado a la discretización espacial.
- Error de aproximación: $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Esquema Implícito

Se utiliza la aproximación *atrasada* de la derivada temporal:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t) - u(x,t-\Delta t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$
$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+\Delta x,t) - 2\,u(x,t) + u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

o utilizando la variable $w_{i,n}$:

$$u_t(x_i,t_n) \approx \frac{w_{i,n} - w_{i,n-1}}{\Delta t}$$
$$u_{xx}(x_i,t_n) \approx \frac{w_{i+1,n} - 2\,w_{i,n} + w_{i-1,n}}{\Delta x^2}$$

Reemplazando en la ecuación de difusión, se tiene:

$$\frac{w_{i,n} - w_{i,n-1}}{\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n} - 2\,w_{i,n} + w_{i-1,n})$$

Sea $\sigma = \dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2}$. Reescribiendo la expresión anterior y reordenando términos:

$$-\sigma\,w_{i+1,n} + (1 + 2\,\sigma)w_{i,n} - \sigma\,w_{i-1,n} = w_{i,n-1}$$

válida para $n \geq 1$. Una expresión equivalente, válida para $n \geq 0$ es:

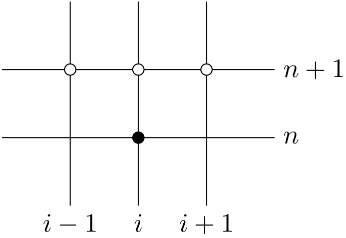
$$-\sigma\,w_{i+1,n+1} + (1 + 2\,\sigma)w_{i,n+1} - \sigma\,w_{i-1,n+1} = w_{i,n}$$

El esquema implícito para la ecuación de difusión es:

$$-\sigma\, w_{i+1,n+1} + (1 + 2\,\sigma) w_{i,n+1} - \sigma\, w_{i-1,n+1} = w_{i,n}$$

con $\sigma = \dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2}$.

Stencil:



El esquema numérico implícito es por tanto:

$$\begin{bmatrix} w_{0,0} \\ w_{1,0} \\ w_{2,0} \\ \vdots \\ w_{N_x,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(N_x) \end{bmatrix}$$

y para $n \geq 0$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\sigma & 1+2\,\sigma & -\sigma & \dots & 0 \\ 0 & -\sigma & 1+2\,\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n+1} \\ w_{1,n+1} \\ w_{2,n+1} \\ \vdots \\ w_{N_x,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n} \\ w_{1,n} \\ w_{2,n} \\ \vdots \\ w_{N_x,n} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} l(t_{n+1}) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ r(t_{n+1}) \end{bmatrix}$$

Ventajas

- Esquema implícito es incondicionalmente estable.
- Discretización temporal no está condicionada a la discretización espacial.

Desventajas

- Requiere resolver un sistema lineal en cada paso temporal.
- Error de aproximación: $\mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Esquema de Crank-Nicolson

Combina métodos explícitos con métodos implícitos considerando las siguientes aproximaciones:

$$
\begin{aligned}
u_t(x,t) &= \frac{u(x,t+\Delta t)-u(x,t)}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)\\
u_{xx}(x,t) &= \frac{1}{2}\left(\frac{u(x+\Delta x,t)-2\,u(x,t)+u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2}\right.\\
&\quad + \left.\frac{u(x+\Delta x,t+\Delta t)-2\,u(x,t+\Delta t)+u(x-\Delta x,t+\Delta t)}{\Delta x^2}\right)\\
&\quad + \mathcal{O}(\Delta x^2)
\end{aligned}
$$

Utilizando la notación $w_{i,n}$ y reemplazando las aproximaciones en la ecuación de calor, se tiene:

$$\frac{w_{i,n+1} - w_{i,n}}{\Delta t} = \frac{D}{2}\frac{w_{i+1,n} - 2\,w_{i,n} + w_{i-1,n}}{\Delta x^2} + \frac{D}{2}\frac{w_{i+1,n+1} - 2\,w_{i,n+1} + w_{i-1,n+1}}{\Delta x^2}$$

El esquema numérico puede reescribirse utilizando $\sigma = \dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2}$ como:

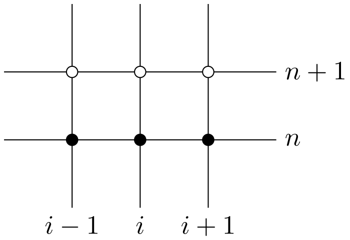
$$-\sigma\, w_{i+1,n+1} + (2+2\,\sigma) w_{i,n+1} - \sigma\, w_{i-1,n+1} = \sigma w_{i+1,n} + (2-2\,\sigma) w_{i,n} + \sigma\, w_{i-1,n}$$

El esquema de Crank-Nicolson para la ecuación de calor es:

$$-\sigma\, w_{i+1,n+1}+(2+2\,\sigma)w_{i,n+1}-\sigma\, w_{i-1,n+1} = \sigma w_{i+1,n}+(2-2\,\sigma)w_{i,n}+\sigma\, w_{i-1,n}$$

con $\sigma = \dfrac{D\,\Delta t}{\Delta x^2}$.

Stencil:



El esquema numérico de Crank-Nicolson es por tanto:

$$\begin{bmatrix} w_{0,0} \\ w_{1,0} \\ w_{2,0} \\ \vdots \\ w_{N_x,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(N_x) \end{bmatrix}$$

y para $n \geq 0$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\sigma & 2+2\,\sigma & -\sigma & \dots & 0 \\ 0 & -\sigma & 2+2\,\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n+1} \\ w_{1,n+1} \\ w_{2,n+1} \\ \vdots \\ w_{N_x,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sigma & 2-2\,\sigma & \sigma & \dots & 0 \\ 0 & \sigma & 2-2\,\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n} \\ w_{1,n} \\ w_{2,n} \\ \vdots \\ w_{N_x,n} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} l(t_{n+1}) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ r(t_{n+1}) \end{bmatrix}$$

Ventajas

- Método es incondicionalmente estable.
- Error de aproximación: $\mathcal{O}(\Delta t^2) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$.
- Discretización temporal no está condicionada a la discretización espacial.

Desventajas

- Requiere resolver un sistema lineal en cada paso temporal.

Método de las líneas (MOL)

Consiste en discretizar solamente el espacio y dejar la discretización temporal para una fase posterior.

Ejemplo: Considerar la ecuación de calor sobre el dominio $\Omega = [a, b] \times [0, T_{max}]$:

$$\begin{aligned} u_t(x,t) &= D\, u_{xx}(x,t) \\ u(x,0) &= g(x) \\ u(a,t) &= l(t) \\ u(b,t) &= r(t) \end{aligned}$$

¿Cómo se aplica el método de las líneas en la ecuación de calor?

Sea $w_i(t) = u(x_i, t)$. Discretizando solamente la derivada espacial con diferencias finitas se obtiene la expresión válida para $0 < i < N_x$:

$$w_i'(t) = \frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1}(t) - 2\,w_i(t) + w_{i-1}(t))$$

Escribiendo matricialmente todas las ecuaciones se tiene:

$$\begin{bmatrix} w_1'(t) \\ w_2'(t) \\ \vdots \\ w_{n-2}'(t) \\ w_{n-1}'(t) \end{bmatrix} = \frac{D}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \\ \vdots \\ w_{n-2}(t) \\ w_{n-1}(t) \end{bmatrix} + \frac{D}{\Delta x^2}\begin{bmatrix} l(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ r(t) \end{bmatrix}$$

O vectorialmente:

$$\mathbf{w}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{w}(t))$$

Se tiene el problema

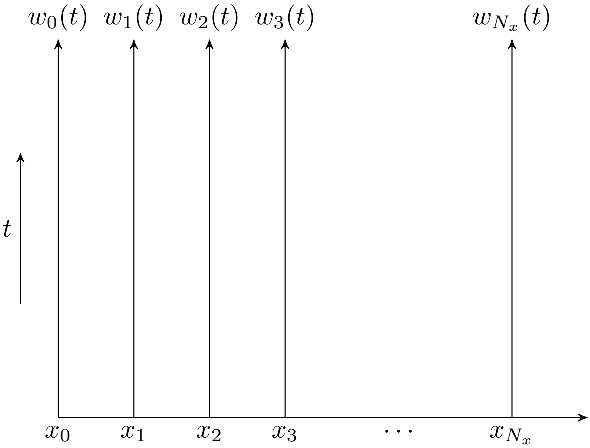
$$\mathbf{w}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{w}(t))$$
$$\mathbf{w}(0) = \mathbf{g}$$

considerando:

$$\mathbf{w}(t) = \begin{bmatrix} w_1(t) \\ w_2(t) \\ \vdots \\ w_{N_x-1}(t) \end{bmatrix} \qquad \mathbf{w}(0) = \begin{bmatrix} w_1(0) \\ w_2(0) \\ \vdots \\ w_{N_x-1}(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(x_1) \\ g(x_2) \\ \vdots \\ g(x_{N_x-1}) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{w}(t)) = \begin{bmatrix} f_1(t, \mathbf{w}(t)) \\ f_2(t, \mathbf{w}(t)) \\ \vdots \\ f_{N_x-1}(t, \mathbf{w}(t)) \end{bmatrix} = \frac{D}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} w_0(t) - 2\,w_1(t) + w_2(t) \\ w_1(t) - 2\,w_2(t) + w_3(t) \\ \vdots \\ w_{N_x-2}(t) - 2\,w_{N_x-1}(t) + w_{N_x}(t) \end{bmatrix}$$

Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas
Método de las líneas



- La EDP se convierte en un IVP, que puede resolverse con métodos como Euler, Trapezoide, etc.
- Utilizando el Método de Euler:

$$\mathbf{w}_{n+1} = \mathbf{w}_n + \Delta t\,\mathbf{f}(t_n, \mathbf{w}_n)$$

  se obtiene el esquema numérico explícito.
- Utilizando el método del trapezoide:

$$\mathbf{w}_{n+1} = \mathbf{w}_n + \frac{\Delta t}{2}\left(\mathbf{f}(t_n, \mathbf{w}_n) + \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{w}_{n+1})\right)$$

  se obtiene el esquema de Crank-Nicolson.

Diferencias Finitas para EDPs Parabólicas

Preguntas:

- ¿Qué tan bien funcionan los métodos? ¿Se puede tomar cualquier combinación de Δt y Δx?
- ¿Cómo se pueden implementar de manera eficiente los métodos descritos?
- ¿Cómo se extienden los métodos para la ecuación de calor en 2 dimensiones, $u_t(x,y,t) = D(u_{xx}(x,y,t) + u_{yy}(x,y,t))$?
- ¿Cómo se podrían implementar otras condiciones de frontera (Neumann, Robin)?
- ¿Qué cambios son necesarios para resolver otras EDPs parabólicas, como la ecuación de Difusión-Advección?
- ¿Qué pasaría si se trabajara en coordenadas cilíndricas o esféricas?

Referencias

Numerical Analysis, Timothy Sauer, Second Edition, Pearson, 2012. Chapter 8: Partial Differential Equations.