

Tema 2

Ecuación de Transporte.

Introducción a la Discretización

Sistemas con dependencia espacial y temporal: ecuación de transporte. Introducción a la discretización en diferencias finitas, aproximación de los términos en derivadas.

Referencias del Capítulo:

- Numerical Recipes. W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky and W.T. Vetterling. Cambridge University Press (1988).
- Computational Techniques for Fluid Dynamics. C.A.J. Fletcher. Springer-Verlag (1991).

M2: Ecuación de Transporte.

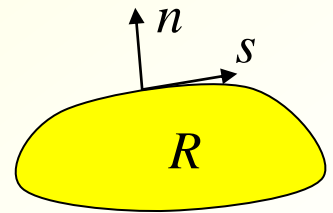
Consideramos un sistema en el que el transporte de información puede ser difusivo y/o convectivo. La forma de ecuación más general tiene la forma:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

donde T es la variable a estudiar (p.e.: temperatura) que se ve forzada con una velocidad de convección u y se difunde con una difusividad α .

Para tener un problema bien planteado necesitamos aportar:

- Condiciones iniciales (especificar $T(x)$ para un t_o y todo x).
- Condiciones de frontera para todo t .



∂R =frontera

1. Condiciones de Dirichlet: $T=f$ en ∂R .

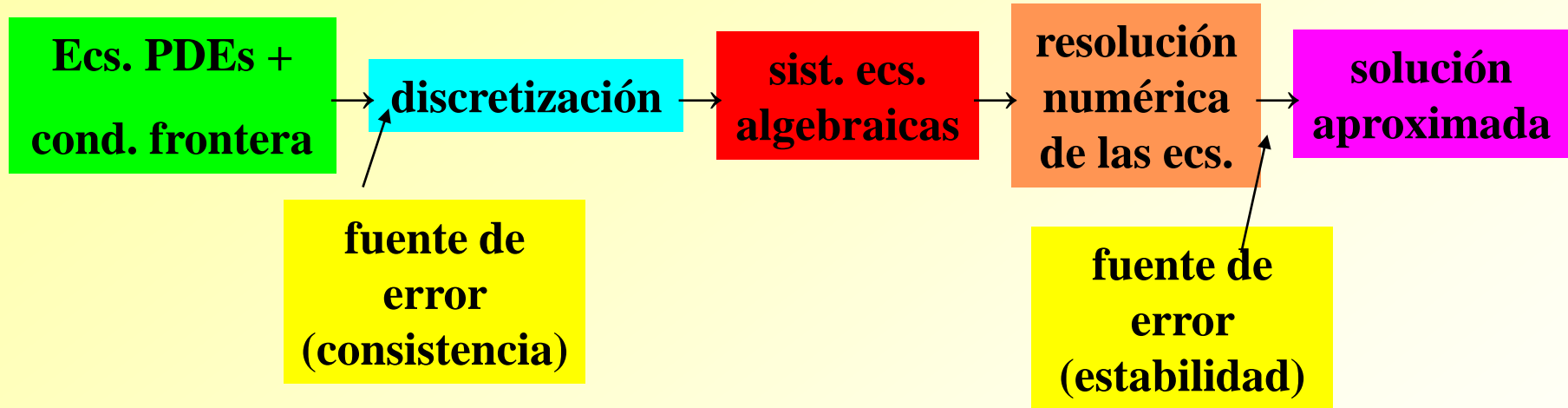
2. Condiciones de Neumann (de la derivada): $\frac{\partial T}{\partial n} = f$ o $\frac{\partial T}{\partial s} = g$ en ∂R

3. Condiciones de mezcla o de Robin:

$$\frac{\partial T}{\partial n} + kT = f \text{ con } k > 0 \text{ en } \partial R$$

M2: Ecuación de Transporte.

Esquema general de resolución numérica:



M2: Introducción a la Discretización.

Consideremos el siguiente ejemplo (ecuación del transporte del calor en 1D):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

con las condiciones de frontera: $T(x=0, t)=b$

$$T(x=1, t)=d$$

$$T(x, t=0)=T_0(x) \quad 0 \leq x \leq 1$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t}$$

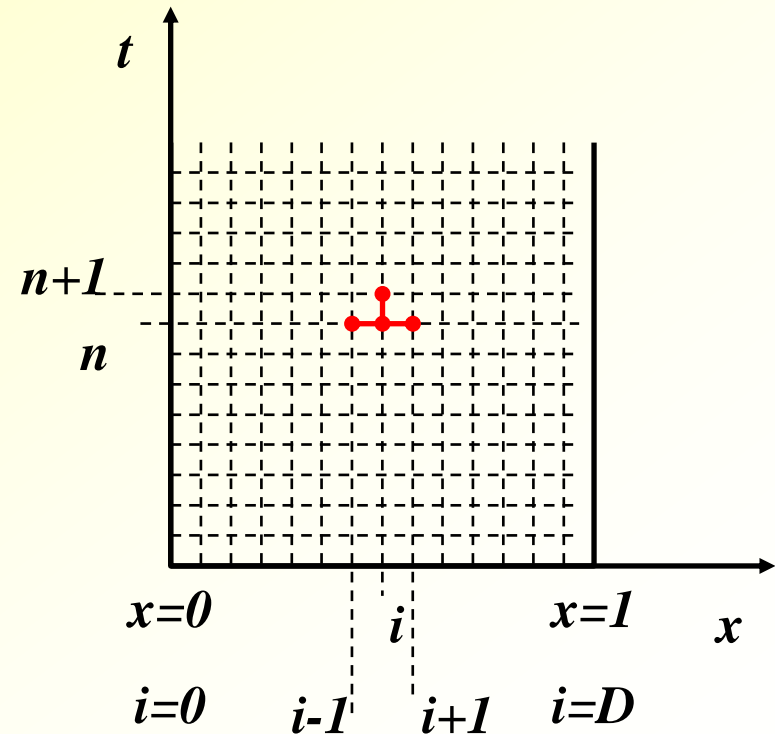
$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &\approx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{T(x + \Delta x, t) - T(x, t)}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\partial T(x + \Delta x, t)}{\partial x} - \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{T(x + \Delta x, t) - T(x, t)}{\Delta x} - \frac{T(x, t) - T(x - \Delta x, t)}{\Delta x} \right) = \frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

M2: Introducción a la Discretización.

Por lo tanto la ecuación de difusión nos queda:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{\Delta x^2}$$
$$\Rightarrow T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n)$$

Esquema de integración
completamente **explícito**
FTCS



M2: Introducción a la Discretización.

Hemos reducido el problema de encontrar una solución función continua de x y t a encontrar una solución aproximada en unos cuantos lugares del espacio de fases, T_i^n .

Conocida la solución en n , para conocerla en $n+1$ habrá que aplicar el algoritmo para todos los nodos i

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n)$$

M2: Introducción a la Discretización.

Otra forma de discretización alternativa:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t}$$

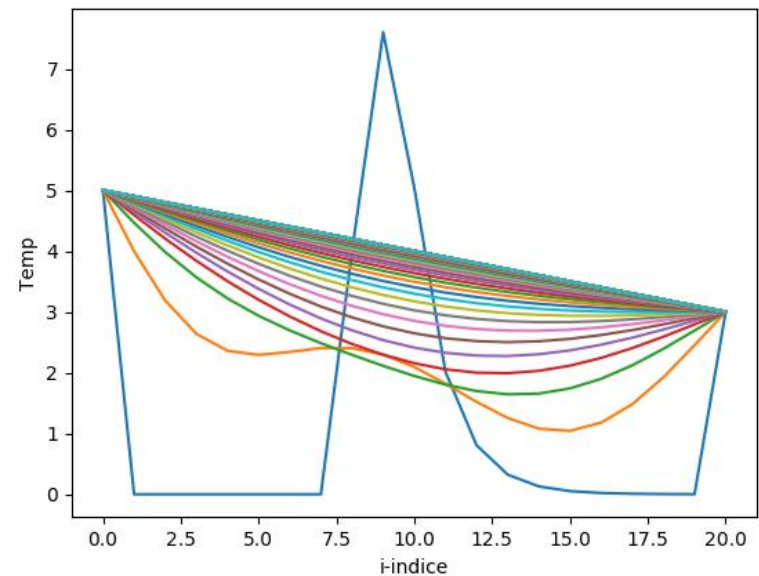
$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &\approx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{T(x + \Delta x, t) - T(x, t)}{\Delta x} \right) = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\partial T(x + \Delta x, t)}{\partial x} - \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{T(x + 2\Delta x, t) - T(x + \Delta x, t)}{\Delta x} - \frac{T(x + \Delta x, t) - T(x, t)}{\Delta x} \right) \\ &= \frac{T_i^n - 2T_{i+1}^n + T_{i+2}^n}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

- Hay muchas formas de discretizar una derivada
- La discretización empleada debe, en la medida de lo posible, conservar la simetría de las ecuaciones originales.

```

2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 N=20; dimt=1000
6 deltat=0.1; deltax=0.5; alfa=1
7
8 T=np.zeros(N+1)
9 T[9:11]=10
10
11 Tnew=np.zeros(N+1)
12 plt.close('all')
13 plt.figure(1); plt.plot(T, '-r'); plt.pause(0.01)
14
15 for n in range(dimt):
16     for i in range(1,N):
17         Tnew[i]=T[i]+alfa*deltat/deltax/deltax*(T[i+1]-2.*T[i]+T[i-1])
18     Tnew[0]=5      # cond frontera
19     Tnew[N]=3
20     for i in range(0,N+1): #actualizacion variables
21         T[i]=Tnew[i]
22     if n%10==0:          # dibujar
23         plt.figure(1);
24         plt.plot(T)
25         plt.pause(0.01)
26         plt.show
27
28 plt.xlabel('i-indice')
29 plt.ylabel('Temp')
30

```




```

% Programa que integra la ecuación de difusión con FTCS
clear all; close all;
deltat=0.01; deltax=0.5;  %Valores de los parametros
dimt=100000; grabt=100; dimx=100; alfa=1;
T(1:dimx)=0.;T(40:60)=10.; % Condiciones iniciales
%Dibuja la condicion inicial
figure(1);hold off;plot(T(1:dimx),'LineWidth',2.000);title(0);
axis([1 dimx 0 10]); pause;
% comienza el cálculo
for n=1:dimt
    for i=2:dimx-1    %Calcula los nuevos valores para todos los i
        Tnew(i)=T(i)+deltat*alfa/deltax/deltax*(T(i-1)-2*T(i)+T(i+1));
    end
    Tnew(1)=T(1); Tnew(dimx)=T(dimx); %cond. de frontera
    if mod(n,grabt)==0 % Dibuja la solución para un tiempo intermedio
        figure(1);hold off;plot(Tnew(1:dimx),'LineWidth',2.000);title(n);
        axis([1 dimx 0 10]); pause;
    end
    % Reactualiza las variables
    T=Tnew;
end

```

Ejercicio 1: a) Implementar el esquema *Forward in Time Centered in Space* (FTCS) para resolver la ecuación unidimensional de difusión. Simular el caso de una barra unidimensional metálica cuyos extremos se encuentran en contacto con dos focos térmicos a 0°C y 10°C respectivamente (condiciones de frontera de Dirichlet).

Estabilidad: $\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} < 1/2$

b) Considerar diferentes condiciones iniciales.

c) Considerar el caso en que uno de los focos térmicos varía su temperatura con el tiempo de forma $\sin(0,5 t)$

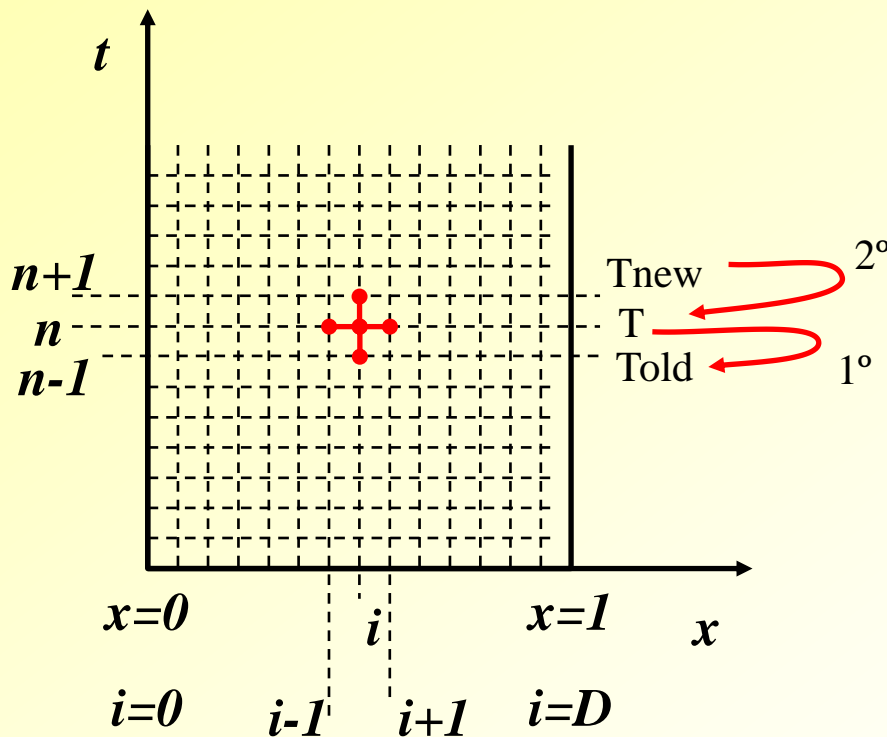
d) Considerar el caso de condiciones de frontera de flujo nulo.

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{frontera} = 0 \approx \frac{T_1^n - T_0^n}{\Delta x} \quad \Rightarrow \quad T_0^n = T_1^n$$

Ejercicio 2: Implementar los siguientes algoritmos en un programa que resuelva la ecuación unidimensional de difusión. En todos los ejercicios probar con condiciones de frontera de Dirichlet (contacto con un foco térmico) y de flujo nulo (caso particular de condiciones de Neuman correspondiente con un sistema aislado)

Esquema Explícitos a tres niveles temporales y centrado en el espacio.

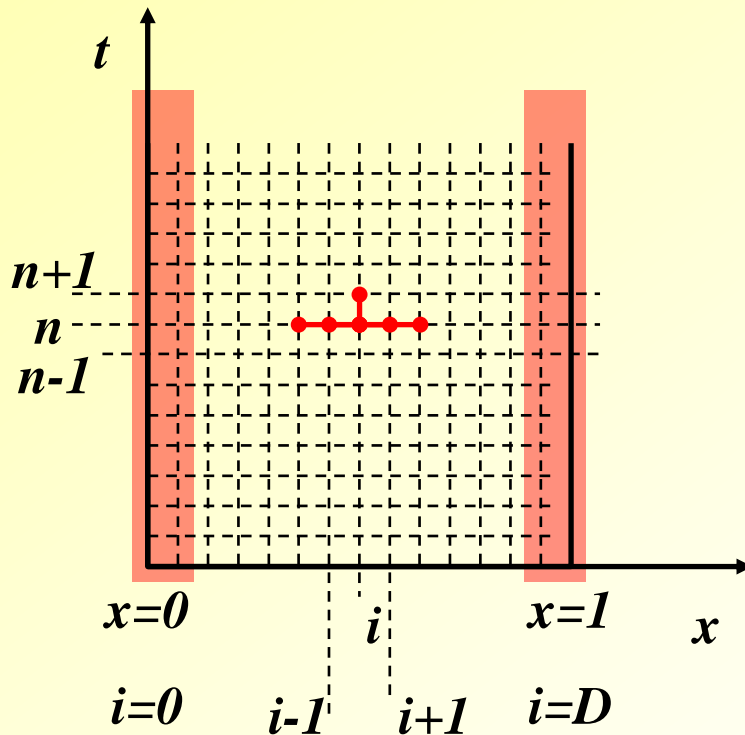
$$\frac{0.5 T_j^{n-1} - 2 T_j^n + 1.5 T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha \left(\frac{T_{j+1}^n - 2 T_j^n + T_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right) = 0$$



Ejercicio 3: Implementar los siguientes algoritmos en un programa que resuelva la ecuación unidimensional de difusión. En todos los ejercicios probar con condiciones de frontera de Dirichlet (contacto con un foco térmico) y de flujo nulo (caso particular de condiciones de Neuman correspondiente con un sistema aislado)

Esquema Explícitos hacia adelante en el tiempo (dos niveles) y centrado en el espacio pero a cinco vecinos según:

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} - \frac{\alpha}{\Delta x^2} \left(-\frac{1}{12} T_{j-2}^n + \frac{4}{3} T_{j-1}^n - 2.5 T_j^n + \frac{4}{3} T_{j+1}^n - \frac{1}{12} T_{j+2}^n \right) = 0$$



M2: Discretización.

Aproximación de términos en derivadas:

- Expansión en serie de Taylor
- Método general.

Ejercicios:

- Resolver la ecuación de difusión con condición de frontera de flujo nulo y FTCS
$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n)$$
- Resolver la ecuación de difusión con un esquema de discretización a 5 vecinos para la derivada espacial.
- Resolver la ecuación de difusión con un esquema de discretización a 3 niveles para la derivada temporal.

M2: Método General de Discretización.

Consideraremos el siguiente ejemplo y emplearemos expansiones en serie de Taylor:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n = a T_{j-1}^n + b T_j^n + c T_{j+1}^n + O(\Delta x^m)$$

Queremos conocer los coeficientes a, b y c que hacen que esa igualdad sea cierta y estimar el error cometido.

Hacemos desarrollo en serie de Taylor en torno a Δx y Δt igual a cero.

$$T_{j-1}^n = T(x - \Delta x, t) = T_j^n - \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_j^n + \dots$$

$$T_{j+1}^n = T(x + \Delta x, t) = T_j^n + \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_j^n + \dots$$

M2: Método General de Discretización.

Por tanto:

$$a T_{j-1}^n + b T_j^n + c T_{j+1}^n + O(\Delta x^m) = (a + b + c)T_j^n + \\ + (-a + c)\Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_j^n + (a + c) \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_j^n + (-a + c) \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots$$

a, b, c son parámetros indeterminados, tomamos condiciones sobre ellos:

$$a + b + c = 0 \\ (-a + c) \Delta x = 1$$

Podemos tomar otra condición adicional puesto que el parámetro c está aún libre. Escogemos la condición que, por ejemplo, nos haga menor el error

$$a + c = 0$$

Por tanto: $c = -a = 1/(2 \Delta x), \quad b = 0$

M2: Método General de Discretización.

Por tanto:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n = \frac{1}{2 \Delta x} (T_{j+1}^n - T_{j-1}^n) - \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_j^n + \dots$$

Es la aproximación en diferencias finitas centrada de esta derivada (otras opciones serían *forward* o *upstream*). El error de la aproximación es $O(\Delta x^2)$ (error de truncamiento)

M2: Método General de Discretización. Ejemplo

Consideraremos el siguiente ejemplo asimétrico:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n = a T_j^n + b T_{j+1}^n + c T_{j+2}^n + O(\Delta x^m)$$

Hacemos desarrollo en serie de Taylor en torno a Δx y Δt igual a cero.

$$T_{j+1}^n = T(x + \Delta x, t) = T_j^n + \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_j^n + \dots$$

$$T_{j+2}^n = T(x + 2\Delta x, t) = T_j^n + 2\Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n + \frac{4\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n + \frac{8\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3}\right)_j^n + \dots$$

Sustituyendo:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n = (a + b + c)T_j^n + (b + 2c)\Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j^n + \left(\frac{b}{2} + 2c\right)\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n + \dots$$

M2: Método General de Discretización. Ejemplo

Como a , b , c son parámetros indeterminados, tomamos condiciones sobre ellos que nos garanticen la igualdad y minimicen el error:

$$\left. \begin{array}{l} a + b + c = 0 \\ (b + 2c) \Delta x = 1 \\ \frac{b}{2} + 2c = 0 \end{array} \right\} \quad a = \frac{-3}{2\Delta x}; \quad b = \frac{2}{\Delta x}; \quad c = \frac{-1}{\Delta x}$$

Por tanto:
$$\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_j^n = \frac{-1.5T_j^n + 2T_{j+1}^n - 0.5T_{j+2}^n}{\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{3} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots$$

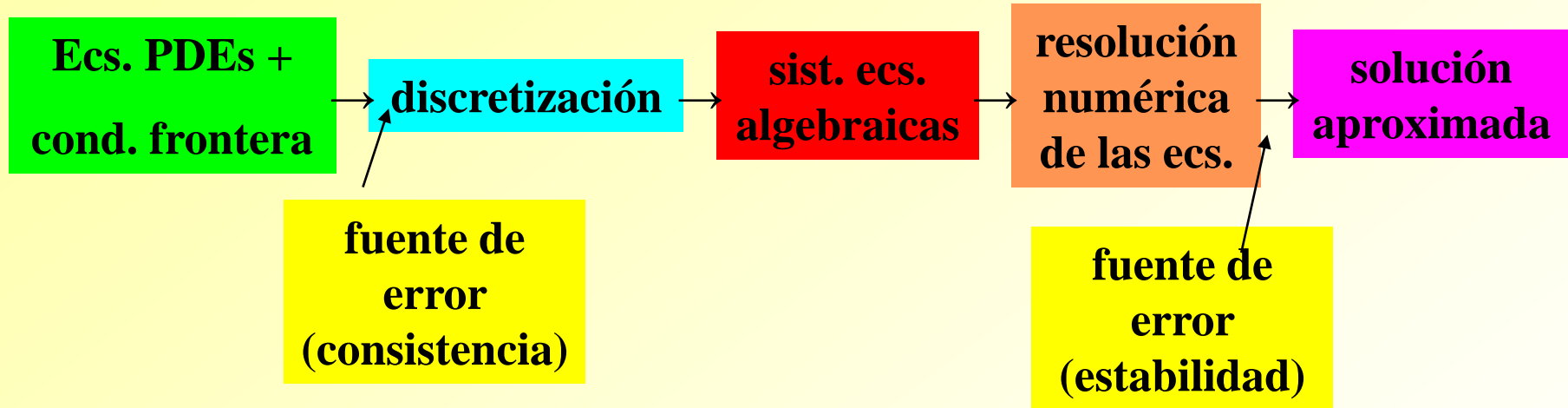
Es la aproximación en diferencias finitas de esta derivada (hacia adelante, *forward* o *upstream*). El error de la aproximación es $O(\Delta x^2)$ (error de truncamiento)

Si metemos más términos en el cálculo de la derivada ganamos precisión (consistencia) pero es menos estable!

M2: Ecuación 1D difusión. Consistencia

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Esquema general de resolución numérica:



Consistencia + Estabilidad = Convergencia

M2: Ecuación 1D difusión. Consistencia

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

En el límite $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ estas ecuaciones algebraicas (esquema de discretización) deben devolver las PDE originales.

Hacemos expansión en serie de Taylor en torno a $\Delta x=0$ y $\Delta t=0$

Consideramos como ejemplo el esquema FTCS de la ecuación 1D de difusión

$$T_j^{n+1} = T_j^n + s(T_{j-1}^n - 2T_j^n + T_{j+1}^n) \quad \text{con} \quad s = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

$$T_j^{n+1} = T(x, t + \Delta t) = T_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{\Delta t^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial t^3} \right)_j^n + \dots$$

$$T_{j-1}^n = T(x - \Delta x, t) = T_j^n - \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_j^n - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots$$

$$T_{j+1}^n = T(x + \Delta x, t) = T_j^n + \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right)_j^n + \dots$$

M2: Ecuación 1D difusión. Consistencia

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Sustituyendo en el esquema y simplificando lo que se pueda llegamos a

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_j^n - \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n + E_j^n = 0$$

donde todos los términos a mayores se han incluido en E_j^n

$$E_j^n = \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right)_j^n - \alpha \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}\right)_j^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

Recuperamos nuestra PDE y encontramos el error de truncado que estamos cometiendo, $E_j^n = O(\Delta t, \Delta x^2)$.

Se dice que el esquema es consistente si se verifica $\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} E_j^n \rightarrow 0$

Que para este esquema se verifica. Por tanto el FTCS es consistente con la ecuación 1D de difusión.

M2: Ecuación 1D difusión. Consistencia

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Manipulemos el error teniendo en cuenta que se verifica la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right) = \alpha^2 \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$$

por tanto el error queda de la forma:

$$E_j^n = \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right)_j^n - \alpha \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \right)_j^n = \frac{\alpha \Delta x^2}{2} \left(\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{1}{6} \right) \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \right)_j^n$$

Vemos que si tomamos $\alpha \Delta t / \Delta x^2 = 1/6$ el error se hace significativamente menor y pasa a ser del orden $O(\Delta t^2, \Delta x^4)$

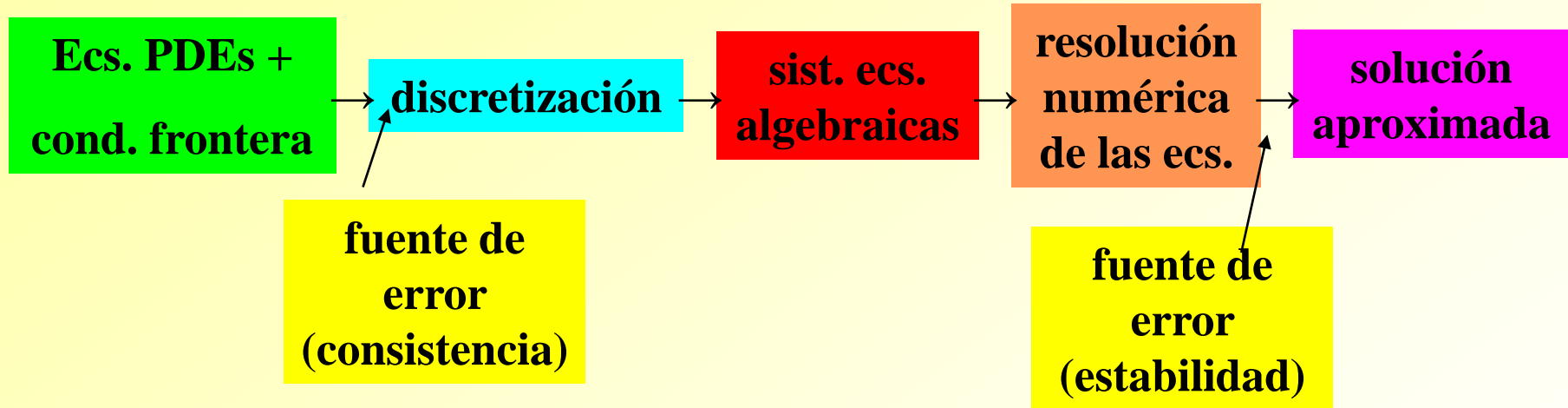
El análisis de la consistencia nos permite:

- Comprobar que estamos integrando las ecuaciones diferenciales adecuadas
- Estimar el error
- Ver qué valores de Δt y Δx hacen mínimo ese error o al menos compatible con el problema estudiado.

M2: Ecuación 1D difusión. Estabilidad

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Esquema general de resolución numérica:



Consistencia + Estabilidad = Convergencia

M2: Ecuación 1D difusión. Estabilidad

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

La solución de un esquema de integración son números reales, T_j^n . Sin embargo, el ordenador sólo trabaja con un número finito de cifras decimales y nos da $^*T_j^n$. La diferencia entre ambos valores es el error que introduce el ordenador, $\zeta_j^n = T_j^n - ^*T_j^n$

Si estos errores se compensan unos con otros, el efecto se hace despreciable y el esquema se dice **estable**. Por el contrario, si se acumulan se dice que el esquema es **inestable** y las soluciones divergen.

Estos errores verifican las mismas ecuaciones que el esquema de integración del que derivan.

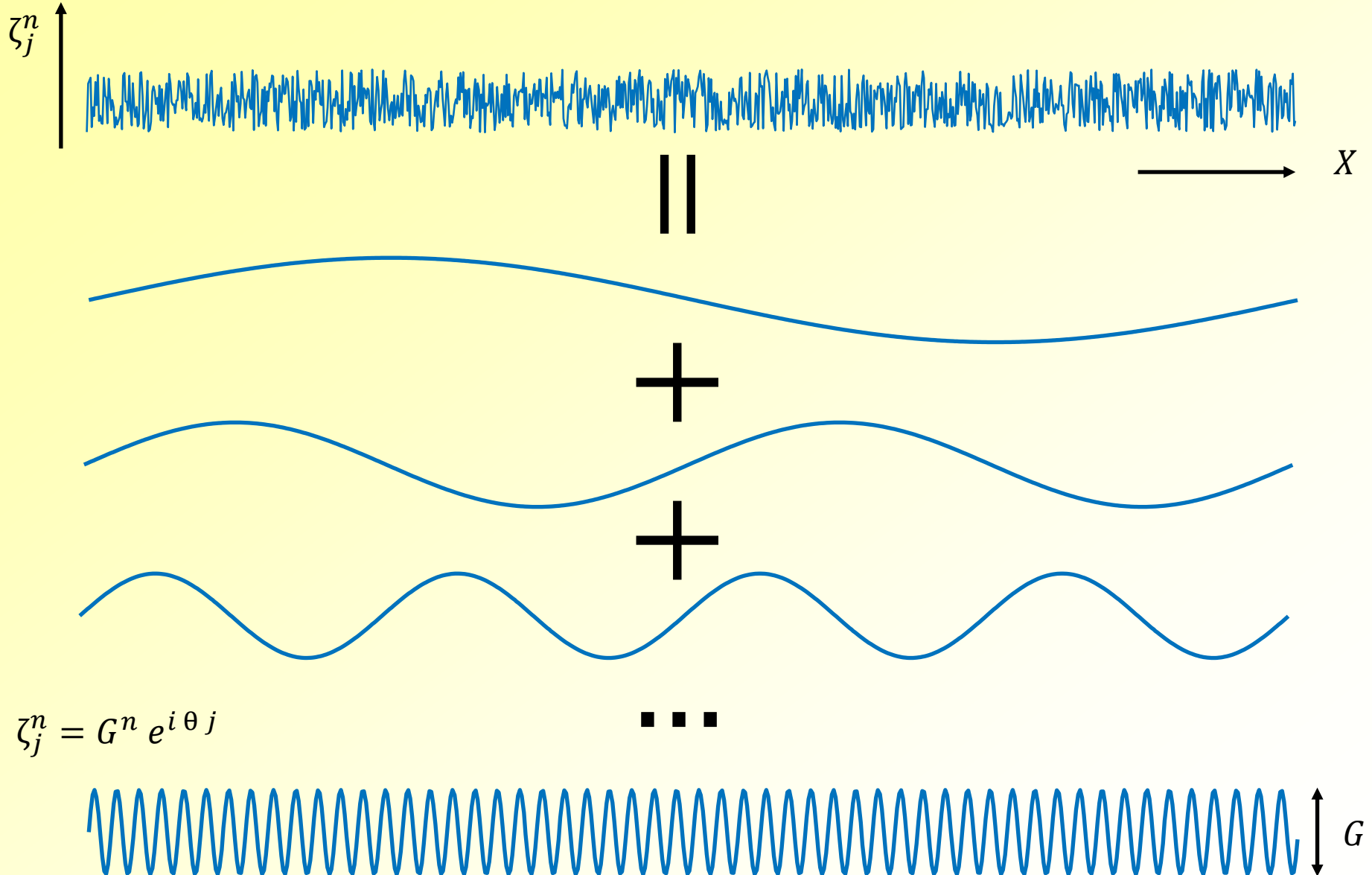
Ejemplo: Esquema FTCS para la ecuación de difusión 1D

$$T_i^{n+1} = T_i^n + s(T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n) \quad \text{con} \quad s = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

$$\Rightarrow \quad \zeta_i^{n+1} = \zeta_i^n + s(\zeta_{i-1}^n - 2\zeta_i^n + \zeta_{i+1}^n)$$

M2: Ecuación 1D difusión. Estabilidad

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$



M2: Ec. 1D difusión. Estabilidad. Met. von Neumann

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Es el más común y fácil de aplicar.

Los errores se expanden en series de Fourier y el esquema de integración será estable si todos los modos independientemente decaen

$$\zeta_j^0 = \sum_{m=1}^{J-2} a_m e^{i\theta_m j} \quad j = 1, \dots, J \quad \text{con } i = \sqrt{-1}, \quad \theta_m = m \pi \Delta x$$

Como el algoritmo es lineal nos basta con analizar la propagación del error de un modo genérico $\zeta_j^0 = G e^{i\theta j}$, en general $G \in \mathbb{C}$

Por tanto $\zeta_j^n = G^n e^{i\theta j}$

Sustituyendo en esquema FTCS: $\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + s(\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n)$ con $s = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$

$$G^{n+1} e^{i\theta j} = G^n e^{i\theta j} + s(G^n e^{i\theta(j-1)} - 2G^n e^{i\theta j} + G^n e^{i\theta(j+1)})$$

$$\Rightarrow G = 1 - 4s \sin^2(\theta/2)$$

El esquema será estable si $|G| \leq 1 \quad \forall \theta$

M2: Ec. 1D difusión. Estabilidad. Met. von Neumann

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$|G| \leq 1 \quad \forall \theta \quad \text{como} \quad G = 1 - 4s \sin^2(\theta/2)$$

$$\Rightarrow \quad -1 \leq 1 - 4s \sin^2(\theta/2) \leq 1 \quad \forall \theta$$



$$-2 \leq -4s \sin^2(\theta/2)$$

$$\Rightarrow \quad 2s \sin^2(\theta/2) \leq 1$$

$$\Rightarrow \quad 2s \leq 1$$

$$\Rightarrow \quad s \leq 1/2$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \leq 1/2}$$

$$-4s \sin^2(\theta/2) \leq 0 \quad \forall \theta$$

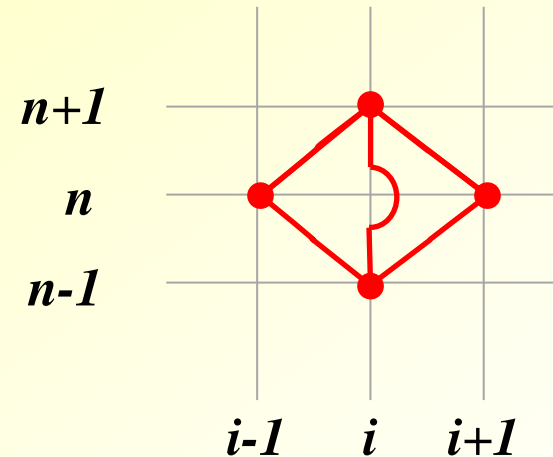
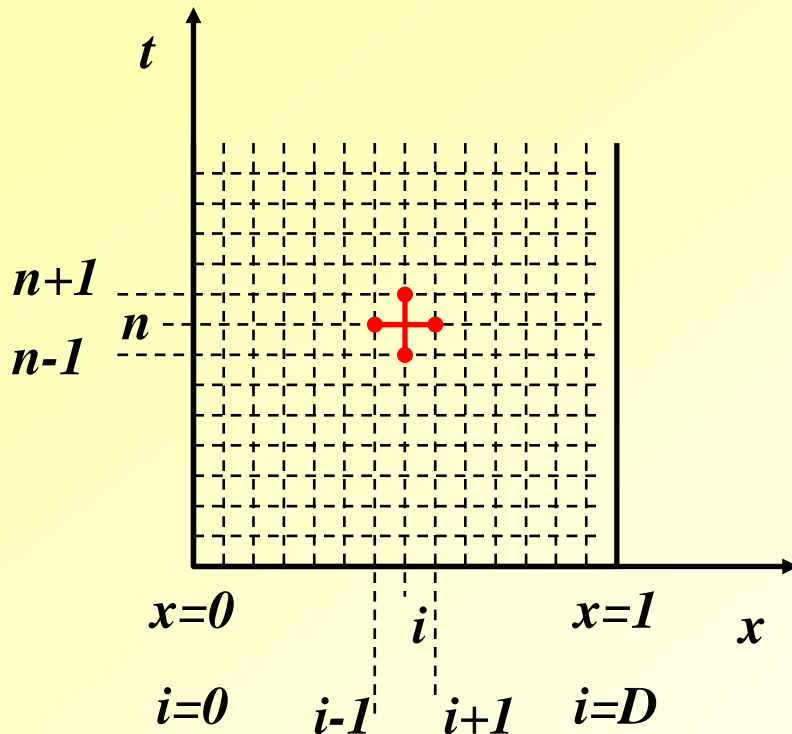
siempre

Condición de Estabilidad (se tiene que cumplir para que el ordenador nos dé una solución y no diverja). Es independiente de la consistencia del método.

M2: Ec. 1D difusión. Esquema DuFort-Frankel

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Consideremos el siguiente esquema de integración completamente explícito a tres niveles temporales:



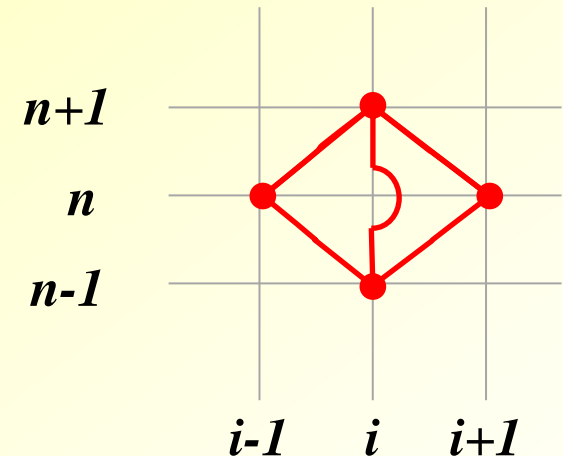
$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^{n-1}}{2 \Delta t} = \alpha \frac{T_{i-1}^n - 2 \frac{T_i^{n+1} + T_i^{n-1}}{2} + T_{i+1}^n}{\Delta x^2}$$

M2: Ec. 1D difusión. Esquema DuFort-Frankel

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^{n-1}}{2 \Delta t} = \alpha \frac{T_{i-1}^n - 2 \frac{T_i^{n+1} + T_i^{n-1}}{2} + T_{i+1}^n}{\Delta x^2}$$

$$\Rightarrow T_i^{n+1} = \frac{2s}{1 + 2s} (T_{i-1}^n + T_{i+1}^n) + \frac{1 - 2s}{1 + 2s} T_i^{n-1}$$



El error de consistencia es

$$E_i^n = \alpha \Delta x^2 \left(s^2 - \frac{1}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} = O(\Delta t^2, \Delta x^2)$$

El esquema es **incondicionalmente** estable, es decir, para todo Δt y para todo Δx los errores de truncamiento introducidos por el ordenador no divergen.

$$G = \frac{2s \cos \theta + (1 - 4s^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}{1 + 2s}$$

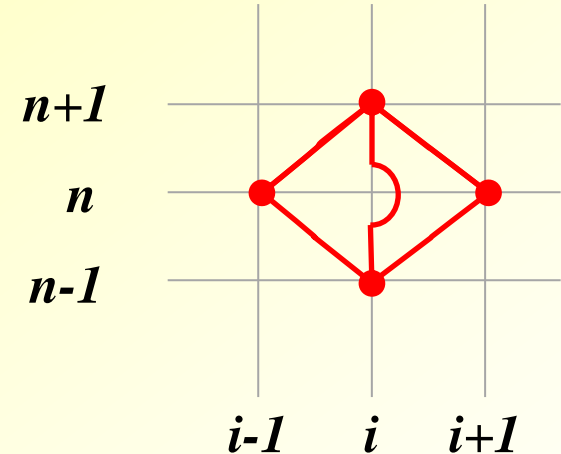
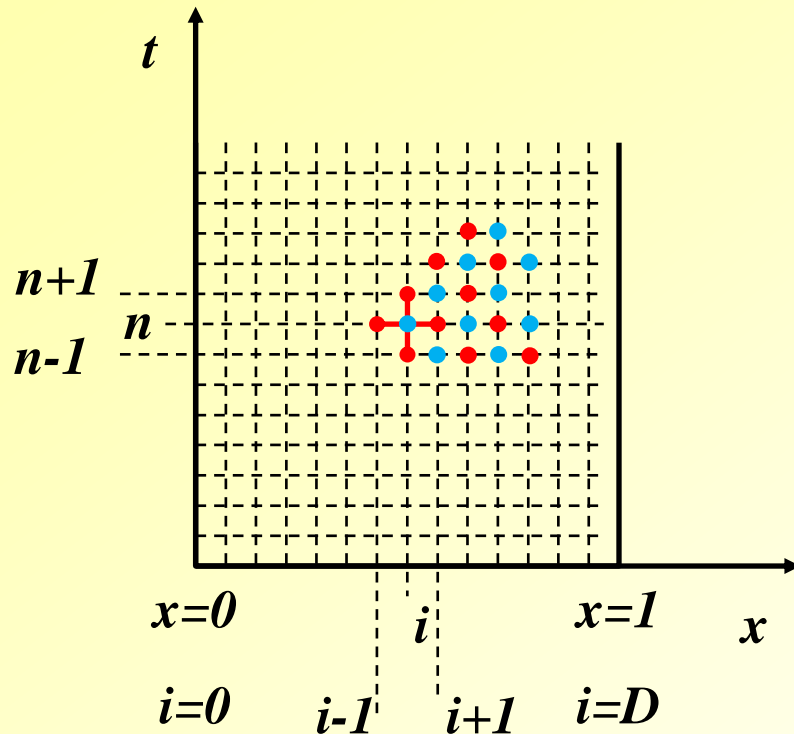
Las restricciones vienen de la consistencia, no de la estabilidad ($\Delta t \ll \Delta x$).

OJO: necesidad de intercambiar información entre dos intervalos de tiempo consecutivos.

M2: Ec. 1D difusión. Esquema DuFort-Frankel

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

OJO: necesidad de intercambiar información entre dos intervalos de tiempo consecutivos.



Solución: mezclar la información de los cuadrados rojos con los azules, por ejemplo:

```
22 for i in range(0,N+1):
23     Tnew[i]=0.5*(Tnew[i]+T[i])
24
```

M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

**Esquema
Completamente
Implícito**

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$

$$T_i^{n+1} = T_i^n + s(T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}) \quad \text{con } s = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

$$-sT_{i-1}^{n+1} + (1 + 2s)T_i^{n+1} - sT_{i+1}^{n+1} = T_i^n \quad \text{con } i = 1, \dots, N-1$$

$$i = 0 \quad T_0^{n+1} = a$$

$$i = 1 \quad -sT_0^{n+1} + (1 + 2s)T_1^{n+1} - sT_2^{n+1} = T_1^n$$

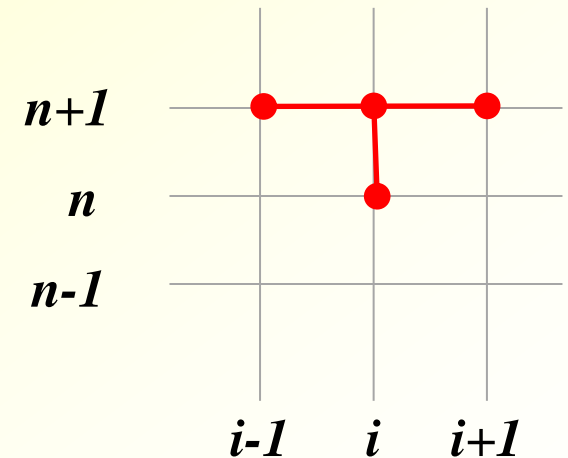
...

$$i \quad -sT_{i-1}^{n+1} + (1 + 2s)T_i^{n+1} - sT_{i+1}^{n+1} = T_i^n$$

...

$$i = N-1 \quad -sT_{N-2}^{n+1} + (1 + 2s)T_{N-1}^{n+1} - sT_N^{n+1} = T_{N-1}^n$$

$$i = N \quad T_N^{n+1} = b$$



M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

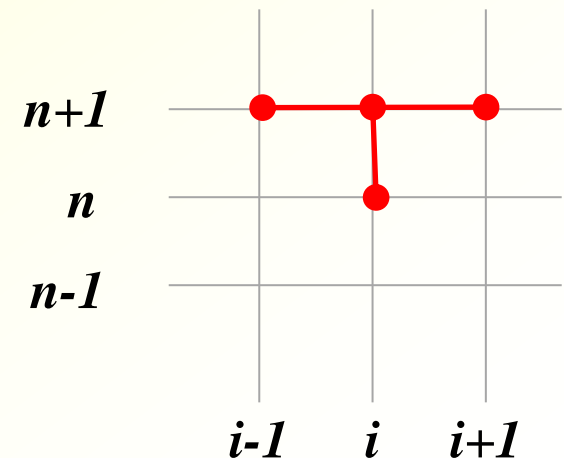
En forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -s & 1+2s & -s & 0 & \dots \\ & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & \dots & 0 & -s & 1+2s & -s & 0 & \dots \\ & & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & \dots & 0 & -s & 1+2s & -s \\ & & & & & \dots & \dots & \dots \\ & & & & & & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0^{n+1} \\ T_1^{n+1} \\ \dots \\ T_i^{n+1} \\ \dots \\ T_{N-1}^{n+1} \\ T_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ T_1^n \\ \dots \\ T_i^n \\ \dots \\ T_{N-1}^n \\ b \end{pmatrix}$$

$$AT^{n+1} = B \quad N+1 \times N+1 \text{ matriz}$$

$$T^{n+1} = A^{-1}B$$

Es una ecuación matricial que se resuelve invirtiendo la matriz tridiagonal.



M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$-sT_{j-1}^{n+1} + (1 + 2s)T_j^{n+1} - sT_{j+1}^{n+1} = T_j^n$$

Esquema Completamente Implícito. Consistencia

$$T_j^{n+1} = T(x, t + \Delta t) = T_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{\Delta t^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial t^3} \right)_j^n + \dots$$

$$T_{j+1}^{n+1} = T(x + \Delta x, t + \Delta t)$$

$$= \left(T_j + \Delta x \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_j + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_j + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right)_j + \dots \right)^{n+1}$$

$$= \left(T_j + \Delta x T_{xj} + \frac{\Delta x^2}{2} T_{xxj} + \frac{\Delta x^3}{6} T_{xxxj} + \dots \right)^{n+1}$$

$$= \left(T_j^n + \Delta t T_{tj}^n + \frac{\Delta t^2}{2} T_{ttj}^n + \frac{\Delta t^3}{6} T_{tttj}^n + \dots \right) +$$

$$+ \Delta x \left(T_{xj}^n + \Delta t T_{xtj}^n + \frac{\Delta t^2}{2} T_{xttj}^n + \frac{\Delta t^3}{6} T_{xtttj}^n + \dots \right) +$$

$$+ \frac{\Delta x^2}{2} \left(T_{xxj}^n + \Delta t T_{xxtj}^n + \frac{\Delta t^2}{2} T_{xxttj}^n + \frac{\Delta t^3}{6} T_{xxtttj}^n + \dots \right) + \dots$$

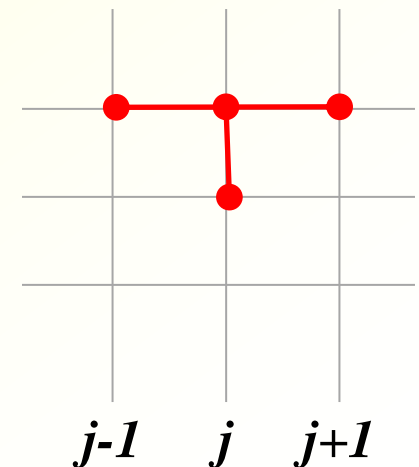
$$+ \frac{\Delta x^3}{6} \left(T_{xxxj}^n + \Delta t T_{xxxtj}^n + \frac{\Delta t^2}{2} T_{xxxttj}^n + \frac{\Delta t^3}{6} T_{xxxtttj}^n + \dots \right) + \dots$$

Primero hacemos desarrollo en serie de Taylor para el tiempo, después para el espacio

n+1

n

n-1



M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

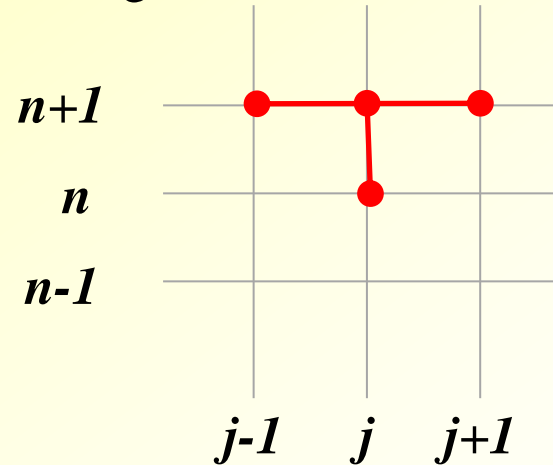
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Sustituyendo en el esquema y simplificando lo que se pueda llegamos a

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_j^n - \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_j^n + E_j^n = 0$$

Con un error de truncamiento dado por E_j^n

$$E_j^n = -\frac{\Delta t}{2} \left(1 + \frac{1}{6s}\right) \left(\frac{\partial^2 T}{\partial t^2}\right)_j^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$



Recuperamos nuestra PDE y encontramos el error de truncado que estamos cometiendo, $E_j^n = O(\Delta t, \Delta x^2)$.

El esquema es consistente puesto que se verifica

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} E_j^n \rightarrow 0$$

No podemos manipular el error para hacerlo menor. Es del mismo orden que el esquema FTCS explícito.

M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$-sT_{j-1}^{n+1} + (1 + 2s)T_j^{n+1} - sT_{j+1}^{n+1} = T_j^n$$

Esquema Completamente Implícito. Estabilidad

Consideramos un modo genérico (longitud de onda) con la forma: $\zeta_j^n = G^n e^{i\theta j}$

Sustituyendo en las ecuaciones, llegamos a un factor de amplificación:

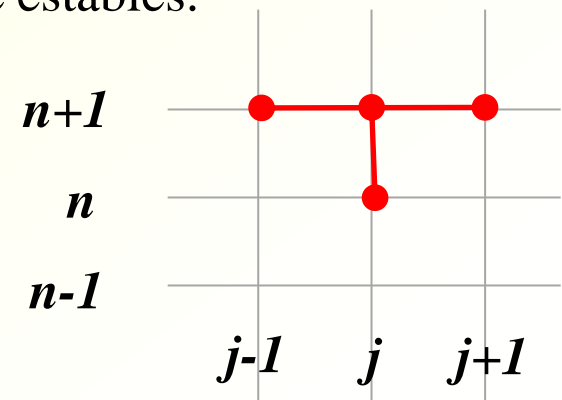
$$\Rightarrow G = [1 + 2s(1 - \cos \theta)]^{-1}$$

$$\text{Condición de estabilidad: } |G| \leq 1 \quad \forall \theta \Rightarrow \quad -1 \leq \frac{1}{1 + 2s(1 - \cos \theta)} \leq 1$$

Que siempre es menor que 1. Por tanto es **incondicionalmente estable**.

Los métodos implícitos siempre son incondicionalmente estables.

Son más complicados de programar pero muy robustos.



M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

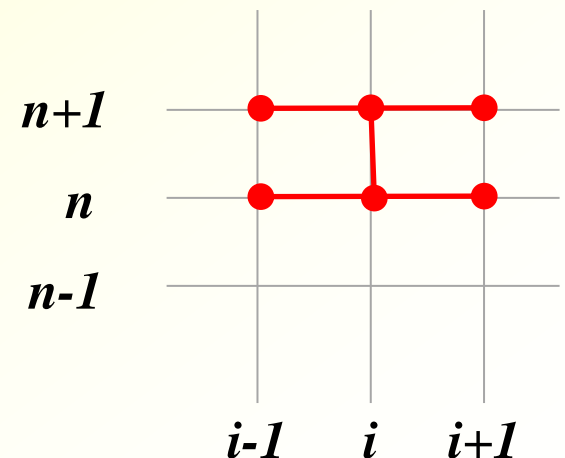
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Esquema Semi-implícito: Crank-Nicolson

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{1}{2} \left(\frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right)$$
$$-\frac{s}{2}T_{i-1}^{n+1} + (1+s)T_i^{n+1} - \frac{s}{2}T_{i+1}^{n+1} = \frac{s}{2}T_{i-1}^n + (1-s)T_i^n + \frac{s}{2}T_{i+1}^n, i = 1, \dots, N-1$$
$$\text{con } s = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

Se resuelve invirtiendo matrices

$$A T^{n+1} = B$$



M2: Ec. 1D difusión. Crank-Nicolson

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Comprobando la consistencia, llegamos al error de truncamiento para este método:

$$E_j^n = -\alpha \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \right)_j^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

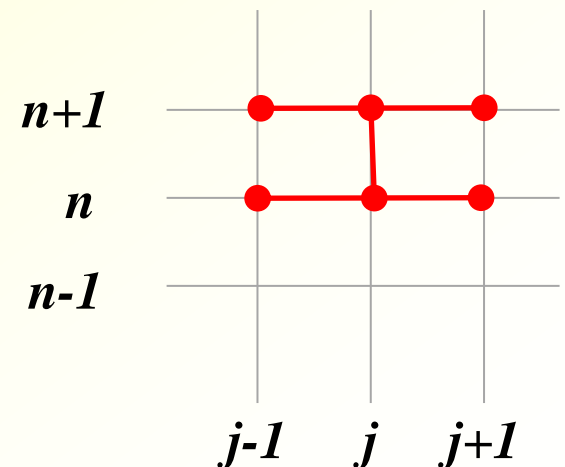
El análisis de la estabilidad nos da el factor de amplificación:

$$G = \frac{1 - 2s \sin^2(\theta/2)}{1 + 2s \sin^2(\theta/2)}$$

$$\Rightarrow |G| \leq 1 \text{ siempre}$$

El esquema es incondicionalmente estable.






Suele emplearse como estándar para resolver este tipo de ecuaciones



M2: Ecuación 1D difusión.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Table 7.1. Algebraic (discretised) schemes for the diffusion equation $\partial \bar{T} / \partial t - \alpha \partial^2 \bar{T} / \partial x^2 = 0$

Scheme	Algebraic form	Truncation error* (E) (leading term)	Amplification factor $G(\theta = m\pi\Delta x)$	Stability restrictions	Remarks
FTCS 	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} T_j^n = 0$	$\alpha(\Delta x^2/2) \left(s - \frac{1}{6} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$ <i>Handwritten: $\propto \Delta x^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right)^2 = \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$</i>	$1 - 4s \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)$ <i>Handwritten: $\frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}$ with an arrow pointing to the stability restriction.</i>	$s \leq 0.5$	$s = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ $L_{xx} = \frac{1}{\Delta x^2} [1, -2, 1]$
DuFort-Frankel 	$\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\alpha}{\Delta x^2} [T_j^{n-1} - (T_j^{n-1} + T_j^{n+1}) + T_{j+1}^n] = 0$	$\alpha \Delta x^2 \left(s^2 - \frac{1}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{2s \cos \theta + (1 - 4s^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}{(1 + 2s)}$	None	$\Delta T_j^{n+1} = T_j^{n+1} - T_j^n$
Crank-Nicolson 	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} \left(\frac{T_j^n + T_j^{n+1}}{2} \right) = 0$	$-\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{1 - 2s \sin^2(\theta/2)}{1 + 2s \sin^2(\theta/2)}$	None	
Three-level fully implicit 	$\frac{3}{2} \frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\Delta T_j^n}{\Delta t} - \alpha L_{xx} T_j^{n+1} = 0$	$-\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{1 \pm \frac{1}{2} i \left[\frac{3}{16} + s(1 - \cos \theta) \right]^{1/2}}{2 \left[1 + \frac{1}{2} s(1 - \cos \theta) \right]}$	None	$\Delta T_j^n = T_j^n - T_j^{n-1}$
Linear F.E.M. /Crank-Nicolson 	$M_x \frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} \left(\frac{T_j^n + T_j^{n+1}}{2} \right) = 0$	$\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{(2 - 3s) + \cos \theta (1 + 3s)}{(2 + 3s) + \cos \theta (1 - 3s)}$	None	$M_x = \{ \frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6} \}$

*The truncation error has been expressed solely in terms of Δx and x -derivatives as in the modified equation method (Section 9.2.2). Thus the algebraic scheme is equivalent to $\partial T / \partial t - \alpha \partial^2 T / \partial x^2 + E(T) = 0$

M2: Ecuación 1D difusión.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Esquemas de nodos activos para los principales esquemas de integración considerados:

