

Ecuaciones diferenciales parciales - 2

Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

30 de mayo de 2017

Outline

- 1 EDP Parabólicas
 - Introducción EDP Parabólicas
 - Método explícito de diferencias finitas
- 2 Ecuación de calor
- 3 Problemas a resolver a cuenta de examen

Outline

- 1 EDP Parabólicas
- 2 Ecuación de calor
 - Solución numérica
 - Malla para los cálculos
 - Resolviendo el problema
 - Solución gráfica
- 3 Problemas a resolver a cuenta de examen

Outline

- 1 EDP Parabólicas
- 2 Ecuación de calor
- 3 Problemas a resolver a cuenta de examen
 - Problema 1
 - Problema 2
 - Problema 3

Contenido

- 1 EDP Parabólicas
 - Introducción EDP Parabólicas
 - Método explícito de diferencias finitas
- 2 Ecuación de calor
 - Solución numérica
 - Malla para los cálculos
 - Resolviendo el problema
 - Solución gráfica
- 3 Problemas a resolver a cuenta de examen
 - Problema 1
 - Problema 2
 - Problema 3

Como prototipo de una EDP de tipo parabólico, podemos utilizar la ecuación de difusión en 1D o la ecuación de calor.

Las técnicas de discretización aplicadas y el análisis de estabilidad correspondiente tienen validez general y son aplicables también a otras ecuaciones parabólicas.

A pesar del considerable número de soluciones analíticas disponibles para la ecuación de difusión, éstas se limitan a geometrías simples y coeficientes de difusión constante por piezas.

Las condiciones de frontera manejables analíticamente son igualmente simples, sin embargo, las soluciones se expresan a menudo como series infinitas, que no son triviales para evaluar.

Para obtener soluciones de la ecuación de difusión que modelen de manera realista las situaciones prácticas, generalmente se necesita recurrir a algoritmos numéricos.

Básicamente, éstos implican restringir la solución a un conjunto discreto de puntos de malla y aproximar las derivadas por esquemas de diferencias finitas con relación a éstos.

Posteriormente, el enfoque numérico se reduce a resolver el sistema lineal resultante, cuyas incógnitas son los valores de la solución en los puntos de malla.

Ecuaciones de difusión y calor 1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (1)$$

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

describen la evolución temporal y la distribución espacial de la concentración de un elemento difusor ($u(x, t) \equiv c(x, t)$) y, respectivamente, de la temperatura del sistema ($u(x, t) \equiv T(x, t)$).

El coeficiente de difusión D , relaciona el flujo difusivo J_{dif} , con el gradiente de concentración por la ley de Fick, mientras que la difusividad térmica K , relaciona el flujo de calor J_{calor} , con el gradiente de temperatura por la ley de Fourier:

$$J_{\text{dif}} = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad J_{\text{calor}} = -K \frac{\partial T}{\partial x}$$

La expresión anterior de la ecuación de calor también prevé una fuente de calor $f(x, t)$

A pesar de que ambas ecuaciones parecen estar espacialmente en 1D, de manera alternativa se puede asumir que modelan una geometría en un plano 3D, en una “losa”.

En la que existe una dependencia explícita sólo en la coordenada cartesiana perpendicular a la losa (x en las ecuaciones anteriores) y no hay dependencia de las otras dos coordenadas ($y - z$), a lo largo de las cuales la extensión del sistema se considera implícitamente infinita.

Modelar una situación física en particular requiere, además de la EDP real, que se proporcionen las condiciones iniciales y de frontera.

Las condiciones iniciales especifican la solución sobre todo el dominio espacial en un momento inicial t_0 :

$$U(x, t_0) = u^0(x), \quad x \in [0, L] \quad (3)$$

Las CDF definen el comportamiento de la solución en la frontera para $t > t_0$.

Por simplicidad, consideraremos para un tiempo dado, las CDF de tipo Dirichlet, que implican valores de solución en las fronteras

$$u(0, t) = u_0^0, \quad u(L, t) = u_L^0 \quad (4)$$

Hay varios métodos manuales para discretizar ecuaciones parabólicas.

No obstante, con ligeras modificaciones de los esquemas de discretización se tiene impacto considerable en la estabilidad y exactitud de la evolución temporal de la solución.

A continuación, abordamos tres enfoques de diferencias finitas tales:

- 1 El método explícito.

A continuación, abordamos tres enfoques de diferencias finitas tales:

- 1 El método explícito.
- 2 El método implícito.

A continuación, abordamos tres enfoques de diferencias finitas tales:

- 1 El método explícito.
- 2 El método implícito.
- 3 El método de Crank-Nicolson.

Método explícito de diferencias finitas

Comenzaremos la discretización para la ecuación de difusión (1) junto con las CDF (3) y (4), haciendo una malla espacio-temporal regular, caracterizada por los nodos:

$$x_i = (i - 1) h_x, \quad i = 1, 2, \dots, N_x \quad (5)$$

$$t_n = n h_t, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

donde h_t es el paso temporal y h_x representa el paso entre los N_x nodos espaciales.

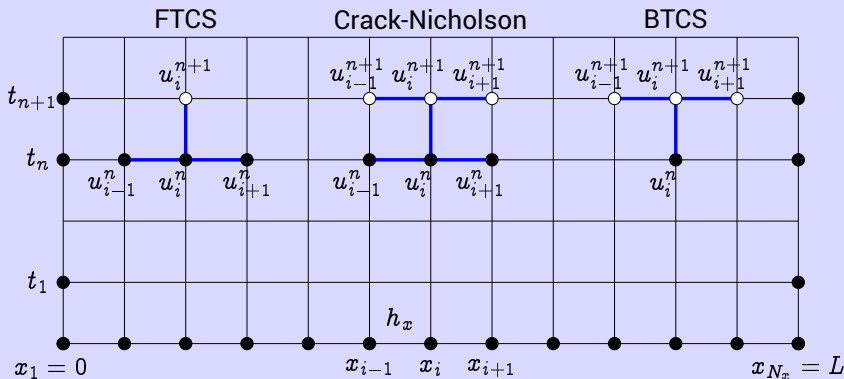


Figura (1): Configuración de nodos espaciales y temporales para tres métodos de discretización de EDP parabólicas.

El espaciamiento de los nodos está dado por

$$h_x = \frac{L}{N_x - 1} \quad (7)$$

La primera derivada con respecto al tiempo $\partial u / \partial t$ en el nodo espacio - temporal (x_i, t_n) puede obtenerse de una manera directa a partir de la aproximación lineal de la serie de Taylor con respecto a t para la constante $x = x_i$

$$u_i^{n+1} = u_i^n + h_t \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_{i,n} + O(h_t^2)$$

donde $u_i^n \equiv U(x_i, t_n)$

Separando la derivada temporal, se obtiene el esquema de diferencias hacia adelante:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i,n} = \frac{u_i^{n+1}}{h_t} + O(h_t) \quad (8)$$

El carácter “hacia adelante” se da por la presencia de la solución propagada de t^{n+1} en la expresión de la derivada en t^n , mientras que el hecho de que el esquema mantenga sólo el primer orden exacto en h_t se debe a la división implícita por h_t .

Para la segunda derivada espacial en el node espacio - temporal (x_i, t_n) , podemos usar el esquema de diferencias centrales:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,n} = \frac{u_{i+1}^n - 2 u_i^n + u_{i-1}^n}{h_x^2} + O(h_x^2) \quad (9)$$

Que involucra sólo la información desde t_n y desde puntos espaciales ubicados simétricamente alrededor del nodo donde se está calculando la derivada.

Incorporando las expresiones de diferencias finitas (8) y (9) en la ecuación de difusión (1), se obtiene el *método espacio - temporal hacia adelante* (forward-time central-space FTCS)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{h_t} = D \frac{u_{i+1}^n - 2 u_i^n + u_{i-1}^n}{h_x^2} \quad (10)$$

Incorporando las expresiones de diferencias finitas (8) y (9) en la ecuación de difusión (1), se obtiene el *método espacio - temporal hacia adelante* (**forward-time central-space FTCS**)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{h_t} = D \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h_x^2} \quad (10)$$

que proporciona una aproximación del orden $O(h_x^2 + h_t)$ para la ecuación de difusión en el nodo espacio - temporal (x_i, t_n)

Por lo que podemos expresar la solución propagada en el siguiente paso temporal t_{n+1} para cada punto interior x_i de la malla espacial, sólo en términos de valores previos de tiempo anterior t_n :

$$u_i^{n+1} = \lambda u_{i-1}^n + (1-2\lambda)u_i^n + \lambda u_{i+1}^n \quad i = 2, 3, \dots, N_x-1 \quad (11)$$

donde

$$\lambda = \frac{D h_t}{h_x^2} \quad (12)$$

En cuanto a los valores de la solución en la frontera, se fijan por las condiciones de Dirichlet (4) a lo largo de la propagación y no requieren ningún tratamiento particular:

$$u_1^{n+1} = u_1^n = u_0^0, \quad u_{N_x}^{n+1} = u_{N_x}^n = u_L^0 \quad (13)$$

Puesto que en cada paso del tiempo, los componentes de la solución propagada pueden expresarse independientemente de la ec. (11), exclusivamente basada en los datos del paso de tiempo previo.

Se dice que el método FTCS es explícito si consideramos el proceso de propagación, al re-escribir la ec. (11) a la ec. (13) en notación matricial

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{u}^n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (14)$$

La matriz de propagación B es tridiagonal y el vector u^n recoge los valores de solución de todos los puntos de malla espacial en el paso de tiempo t_n :

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & & & 0 \\ \lambda & 1 - 2\lambda & \lambda & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda & 1 - 2\lambda & \lambda \\ 0 & & & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{N_x-1}^n \\ u_{N_x}^n \end{bmatrix} \quad (15)$$

Cada componente de la solución propagada \mathbf{u}^{n+1} de manera individual, se obtiene de la multiplicación de la matriz \mathbf{B} con la solución previa del vector \mathbf{u}^n .

Contenido

- 1 EDP Parabólicas
 - Introducción EDP Parabólicas
 - Método explícito de diferencias finitas
- 2 Ecuación de calor
 - Solución numérica
 - Malla para los cálculos
 - Resolviendo el problema
 - Solución gráfica
- 3 Problemas a resolver a cuenta de examen
 - Problema 1
 - Problema 2
 - Problema 3

Problema de inicio

Ecuación de calor

Tenemos una barra de longitud $L = 100$ cm y de diámetro w (vista desde el eje x). La barra está aislada en su perímetro, excepto en los extremos.

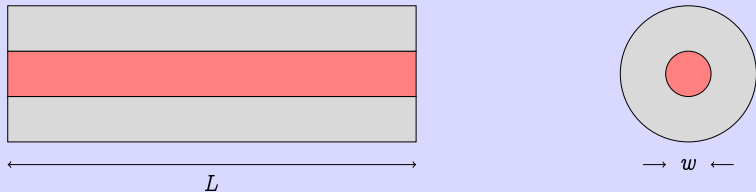


Figura (2): La barra está rodeada de un aislante.

Al inicio la barra tiene una temperatura uniforme de 100°C y los extremos de la misma están en contacto con agua helada a 0°C . El calor fluye hacia los extremos que no están dentro del aislante.

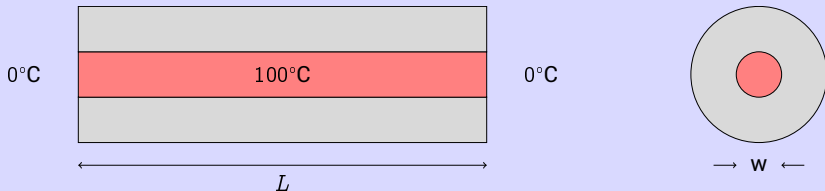


Figura (3): Condiciones de temperatura dentro y en los extremos de la barra.

¿Qué tenemos que hacer?

El problema a resolver es el siguiente:

Calcular cómo varía la temperatura a lo largo de la barra para un instante de tiempo dado, además de ver cómo cambia con respecto al tiempo.

Ecuación de calor

¿Cómo es el flujo de calor de una región caliente a una región fría?

Ecuación de calor

¿Cómo es el flujo de calor de una región caliente a una región fría?

Expresando el fenómeno en términos matemáticos: decimos que la razón de cambio de flujo de calor H a través de un material, es proporcional al gradiente de temperatura T en el material.

$$H = -K \nabla T(x, t)$$

donde K es la conductividad térmica del material.

La cantidad total de calor $Q(t)$ en cualquier momento, es proporcional a la integral de la temperatura sobre del volumen del material:

$$Q(t) = \int C \rho(x) T(x, t) dx$$

Donde C es el calor específico del material y ρ es la densidad del material.

Dado que la energía se conserva, la razón de decremento de Q con el tiempo debe de ser igual a la cantidad de calor fluyendo fuera del material.

Después de que tenemos este balance de energía y aplicamos el teorema de la divergencia, la ecuación de calor, resulta:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{K}{C\rho} \nabla^2 T(x, t)$$

Suponemos que la densidad del material es constante.

Tenemos una EDP de tipo parabólico con variables de posición y tiempo independientes.

Al especificar este tipo de problema, implica que no hay variación de la temperatura en las direcciones perpendiculares de la barra (y, z), por lo que sólo tenemos una coordenada espacial:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{K}{C\rho} \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}$$

La temperatura inicial de la barra y las condiciones de frontera son:

$$T(x, t = 0) = 100^{\circ}\text{C}$$

$$T(x = 0, t) = T(x = L, t) = 0^{\circ}\text{C}$$

Solución numérica

Como se revisó con la ecuación de Laplace, la solución numérica se basa en convertir una ecuación diferencial en una aproximación por diferencias finitas.

El algoritmo se desarrolla a partir de expandir $T(x, t + \Delta t)$ y $T(x + \Delta x, t)$ en series de Taylor, dejándo los términos de menor orden en Δ :

Series de Taylor

$$T(x, t + \Delta t) \simeq T(x, t) + \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \Delta t,$$

$$T(x + \Delta x, t) \simeq T(x, t) + \frac{\partial T}{\partial x} \Delta x,$$

$$\longrightarrow \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \simeq \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t},$$

$$\frac{\partial^2 T(x, y)}{\partial x^2} \simeq \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2 T(x, t)}{(\Delta x)^2}$$

La EDP se transforma en una ecuación de diferencias finitas:

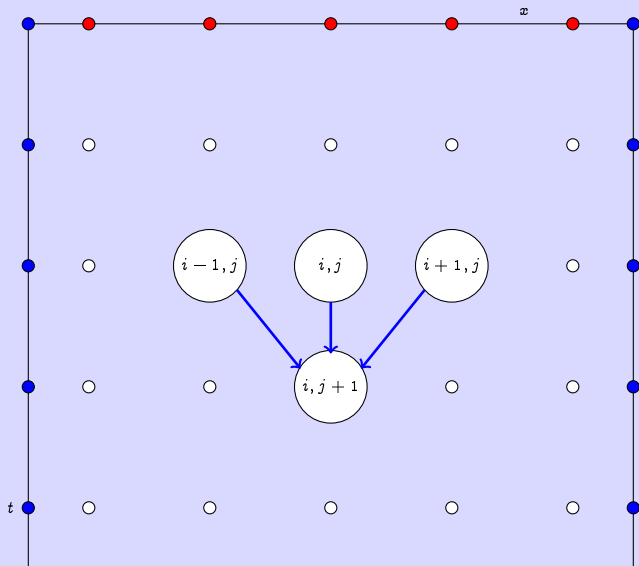
$$\begin{aligned} \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} &\simeq \\ &\simeq \frac{K}{C\rho} \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2 T(x, t)}{(\Delta x)^2} \\ \longrightarrow T(x, t + \Delta t) &\simeq T(x, t) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \frac{K}{C \rho} \\ &\times [T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2 T(x, t)] \end{aligned}$$

Que en forma discreta, se expresa como:

$$T_{i,j+1} = T_{i,j} + \eta [T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j}], \quad \eta = \frac{K \Delta t}{C \rho (\Delta x)^2}$$

donde $x = i \Delta x$ y $t = j \Delta t$

Malla para los cálculos



Descripción de la malla

Del esquema anterior, vemos que los puntos de color rojo, representan la barra a una temperatura inicial de 100°C , mientras que los extremos en donde aparecen puntos de color azul, representa la temperatura también constante de 0°C .

La evolución del cambio de temperatura con respecto al tiempo, lo podemos calcular a partir de temperaturas “anteriores” que pasan a ser “nuevas”.

Luego del ciclo, éstas ahora son temperaturas “anteriores” que servirán de base para un nuevo cálculo.

Resolviendo el problema

Considera una barra de aluminio de longitud $L = 1$ metro, con las condiciones de frontera y condiciones iniciales:

$$T(x = 0, t) = T(x = L, t) = 0$$

la conductividad, el calor específico y la densidad del aluminio son, respectivamente:

$$K = 237 \text{ W/(mK)}$$

$$C = 900 \text{ J/(kgK)}$$

$$\rho = 2700 \text{ kg/m}^3$$

Encabezado para librerías matemáticas y gráficas

```
1 from numpy import *
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
4 from matplotlib import cm
5
6 fig = plt.figure()
7 ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
```

Se declaran las constantes físicas del aluminio, así como dos arreglos: Nx para los puntos en la barra y Nt para la evolución temporal, así como el incremento espacial $\Delta x = 0.01414$ y el incremento temporal $\Delta t = 1$.

```
1 kappa = 210.  
2 sph = 900.  
3 rho = 2700.  
4  
5 Nx = 101  
6 Nt = 3000  
7  
8 Dx = 0.01414  
9 Dt = 1.
```

Se generan los espacios de trabajo para almacenar los valores nuevos de temperatura y de tiempo:

```
1 T = zeros((Nx,2), dtype=float)
2
3 Tpl = zeros ((Nx,31), dtype=float)
```

Se establecen las condiciones iniciales y de frontera, y una variable que involucra las constantes físicas y las de la ecuación de calor necesarias para resolver el problema:

```
1 for ix in range(1, Nx-1):  
2     T[ix, 0] = 100.0  
3  
4 T[0, 0] = 0.0  
5 T[0, 1] = 0.0  
6  
7 T[Nx-1, 0] = 0.0  
8 T[Nx-1, 1] = 0.0  
9  
10 cons = kappa/(sph*rho)*Dt/(Dx*Dx)
```

Ciclo de iteración

```
1 m = 1
2 for t in range(1, Nt):
3     for ix in range(1, Nx-1):
4         T[ix,1] = T[ix,0] + cons*(T[ix+1,0] + T[ix
5             -1,0]-2.*T[ix,0])
6     if t % 100 == 0 or t == 1:
7         for ix in range(1,Nx-1,2): Tpl[ix,m] = T[ix,1]
8         print (m)
9         m = m + 1
10    for ix in range(1,Nx-1): T[ix,0] = T[ix,1]
```

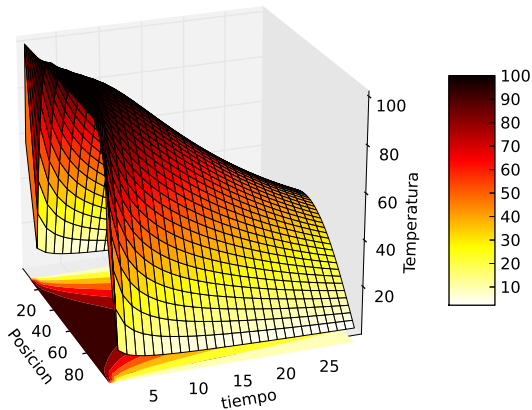
Tomamos los elementos de los arreglos para crear una malla y definimos una función que nos devuelve la temperatura

```
1 x = list(range(1,Nx-1,2))
2 y = list(range(1,30))
3
4 X, Y = meshgrid(x,y)
5
6 def functz(Tpl):
7     z = Tpl[X,Y]
8     return z
9
10 Z = functz(Tpl)
```

Hacemos la rutina ya conocida para presentar los datos en una gráfica 3D con matplotlib

```
1 surf = ax.plot_surface(X,Y,Z,rstride=1, cstride=1,  
    linewidth=0.5, cmap=cm.hot_r)  
2 fig.colorbar(surf, shrink=0.5, aspect=5)  
3 ax.set_zlim(-10, 100)  
4 cset = ax.contourf(X,Y,Z, zdir='z',offset=-5, cmap=cm  
    .hot_r)  
5 ax.set_xlabel('Posicion')  
6 ax.set_ylabel('tiempo')  
7 ax.set_zlabel('Temperatura')  
8 plt.show()
```


Solución gráfica



Contenido

- 1 EDP Parabólicas
 - Introducción EDP Parabólicas
 - Método explícito de diferencias finitas
- 2 Ecuación de calor
 - Solución numérica
 - Malla para los cálculos
 - Resolviendo el problema
 - Solución gráfica
- 3 Problemas a resolver a cuenta de examen
 - Problema 1
 - Problema 2
 - Problema 3

Problemas a resolver

Se hacen algunos cambios en el planteamiento del problema, pero el algoritmo que hay que usar es el mismo, hay que resolver los siguientes casos:

- 1 Distribución inicial de temperatura de forma senoidal: $\sin(\pi x / L)$

Problemas a resolver

Se hacen algunos cambios en el planteamiento del problema, pero el algoritmo que hay que usar es el mismo, hay que resolver los siguientes casos:

- 1 Distribución inicial de temperatura de forma senoidal: $\sin(\pi x / L)$
- 2 Dos barras en contacto cada una con diferente temperatura.

Problemas a resolver

Se hacen algunos cambios en el planteamiento del problema, pero el algoritmo que hay que usar es el mismo, hay que resolver los siguientes casos:

- 1 Distribución inicial de temperatura de forma senoidal: $\sin(\pi x / L)$
- 2 Dos barras en contacto cada una con diferente temperatura.
- 3 Modificación de la ecuación de calor para incluir un término y obtener la ley de enfriamiento de Newton.

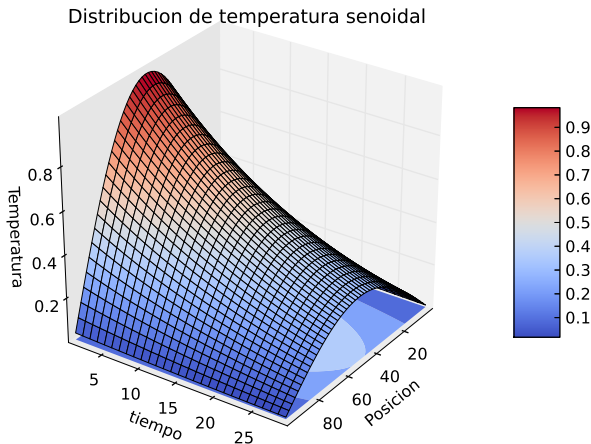
Problema 1

Distribución inicial de temperatura de forma senoidal: $\sin(\pi x / L)$

Utiliza las mismas constantes que en el primer ejemplo. Puedes comparar los resultados con la solución analítica:

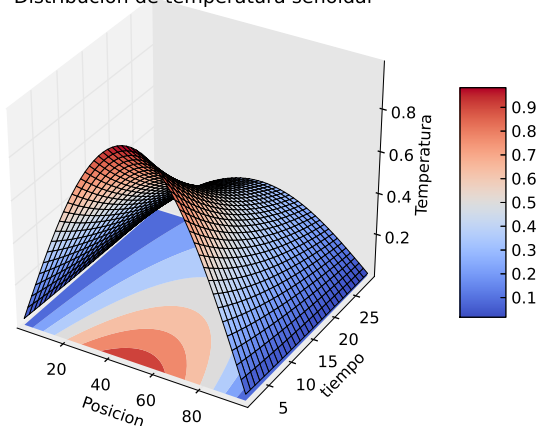
$$T(x, t) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\frac{\pi^2 R T}{L^2}\right), \quad R = \frac{K}{C \rho}$$

Solución del problema con la distribución de temperatura senoidal



Problema con la distribución senoidal -rotada-

Distribucion de temperatura senoidal



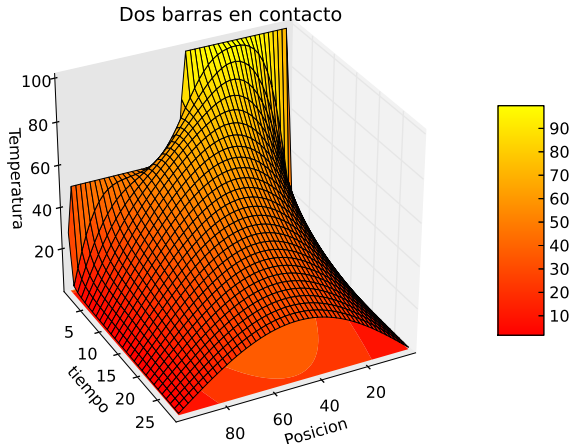
Problema 2

Dos barras en contacto cada una con diferente temperatura.

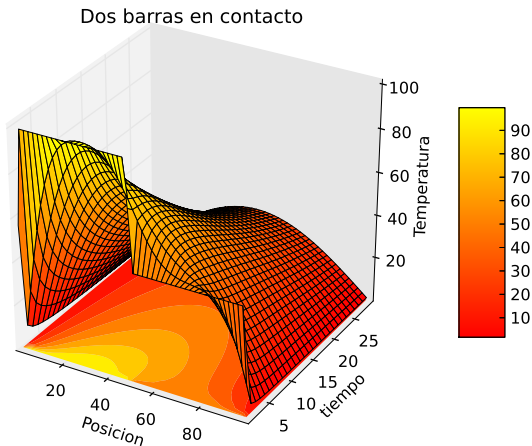
Supongamos que tenemos dos barras idénticas, de 50 cm de longitud. Una de ellas se mantiene a 100°C y la otra a 50°C , se ponen en contacto a lo largo de su eje y los otros extremos se dejan a 0°C .

Determina cómo varía la temperatura con respecto a la posición y al tiempo.

Dos barras con diferente temperatura en contacto



Dos barras en contacto -rotada-



Problema 3

Modificación de la ecuación de calor para incluir un término y obtener la ley de enfriamiento de Newton.

Imagina ahora que la barra que estaba aislada (el problema con el que comenzamos la clase), se deja en contacto con el ambiente que se encuentra a una temperatura T_e , tal que es diferente a la temperatura inicial de la barra.

La ley de enfriamiento de Newton nos dice que la razón de cambio de la temperatura debido a la radiación es:

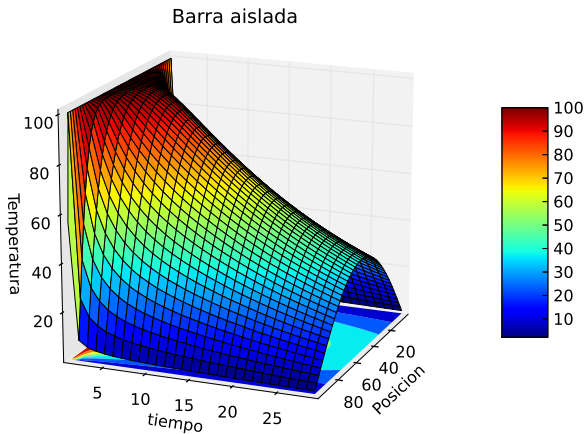
$$\frac{\partial T}{\partial t} = -h(T - T_e)$$

La ecuación de calor se modifica, quedando:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{K}{C\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - hT(x, t)$$

Ajusta el algoritmo y el programa para introducir el término de enfriamiento de Newton a lo largo de la barra. Compara el enfriamiento de esta barra con el ejemplo de la barra aislada.

Barra aislada



Ley de enfriamiento de Newton, con

$$T_e = 25^{\circ}\text{C}$$

