Métodos Numéricos

Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
Problemas de valor en la frontera evolutivos
Problemas parabólicos e hiperbólicos

Diego Passarella

Universidad Nacional de Quilmes

2^{do} Cuatrimestre de 2014

PVF Evolutivo

Se plantea estudiar la evolución de un problema de valor en la frontera. En este caso la función incógnita pasa a depender de por lo menos dos variables $y = y(x, t)$ (posición y tiempo). Si se consideran las tres coordenadas espaciales (x,y,z), la función incógnita va de $\mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}$.

Un PVF evolutivo plantea la necesidad de resolver una ecuación en derivadas parciales (EDP's), lo cual es un problema bastante más complejo que los vistos hasta ahora.

EDP Parabólica

Un caso típico de EDP parabólica es la ecuación del calor (1D).

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = Q, \quad a \leq x \leq b, \quad t \leq t_F$$

$T(x, 0) = T_0(x) \quad$ (CI)
$T(a, t) = T_a(t),\ T(b, t) = T_b(t), \quad$ (CC)

También se puede definir el problema a través de dos CC tipo Neumann, por ejemplo:

$-k\frac{\partial T}{\partial x} = h(T(a, t) - T_{ref}), \quad$ (flujo de calor)
$\frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad$ (aislación térmica)

Este tipo de ecuación también sirve para representar problemas de difusión de especies (entre otros problemas).

Discretización del dominio

Discretización del espacio en $N_x + 1$ puntos:

$$h_x = \frac{b-a}{N_x+1} \qquad \Rightarrow \qquad x_i = a + i.h_x \qquad i = 0, 1, \cdots, N_x$$

Discretización del tiempo en N_t momentos:

$$h_t = \frac{t_F}{N_t+1} \qquad \Rightarrow \qquad t_j = j.h_t \qquad j = 0, 1, \cdots, N_t$$

La solución discreta va a depender de dos índices: $T(x_i, t_j) = T_i^j$

A partir de este tipo de discretización se pueden plantear varios esquemas de resolución.

Repaso - Diferencias Finitas

Se pueden generar diversas aproximaciones de la derivada de una función partir de desarrollo en serie de Taylor alrededor de un punto.

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \sum_{k=1}^{\infty} y^{(k)}(x_i)\frac{(x_{i+1} - x_i)^k}{k!}$$

Si consideramos una discretización equiespaciada del dominio donde está definida $y(x)$ de la forma

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{N_x-1} < x_{N_x} = b$$

de tal manera que $x_{i+1} - x_i = h$, podemos generar combinaciones de desarrollos de Taylor centrados en un x_i para obtener la derivada en ese punto.

Diferencias Finitas - Esquemas

Utilizando diferencias finitas se pueden generar distintas aproximaciones de las derivadas temporales y espaciales de un PVF evolutivo.
Dependiendo del tipo de esquema utilizado para la derivada temporal, el método para resolver el problema puede ser explícito o implícito.

Las derivadas temporales también pueden resolverse por medio de métodos de alto orden o multipaso, tal como los anteriormente vistos. En este caso, el PVF evolutivo es equivalente a resolver $N_x - 1$ PVI acoplados a través del esquema numérico de la derivada espacial.

Progresivo en tiempo - Centrado en espacio (FTCS)

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} - \alpha \frac{\left(T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j\right)}{h_x^2} = Q_i^j$$

$\alpha = k/(\rho.c_p)$.
Las CI y CC's nos dan todos los valores de T_i^0, T_0^j y de $T_{N_x}^j$.

En el caso de tener CC del tipo flujo, se deben utilizar esquemas de mismo orden de error al aplicar las CC.

Este es un *esquema explícito condicionalmente estable*. El límite de estabilidad del esquema está dado por:

$$h_t < \frac{h_x^2}{2\alpha}$$

Progresivo en tiempo - Centrado en espacio (FTCS)

El esquema anterior permite dar una expresión explícita para T_i^{j+1}, obteniéndose de la forma: (se consideran CC tipo Dirichlet)

for j=1:N_t-1
  for i=2:N_x-1

$$T_i^{j+1} = T_i^j + h_t \left(\alpha \frac{\left(T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j \right)}{h_x^2} + Q_i^j \right)$$

  end
end

Nota: El "for" que recorre las posiciones de x puede ser eliminado si se escribe a $T_{2:N_x-1}^{j+1}$ a partir de la operación entre vectores.

Regresivo en tiempo - Centrado en espacio (BTCS)

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} - \alpha \frac{\left(T_{i-1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i+1}^{j+1}\right)}{h_x^2} = Q_i^{j+1}$$

Este es un *esquema implícito incondicionalmente estable*.

Para resolverlo es necesario plantear un sistema de ecuaciones lineales. *(Recordar orden de error de las CC para matener el orden del esquema)*.

Regresivo en tiempo - Centrado en espacio (BTCS)

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} - \alpha \frac{\left(T_{i-1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i+1}^{j+1}\right)}{h_x^2} = Q_i^{j+1}$$

Este es un *esquema implícito incondicionalmente estable*.

Para resolverlo es necesario plantear un sistema de ecuaciones lineales *(si Q es una constante o es lineal con T, si no el sistema pasa a ser de ecuaciones no lineales)*. Si se consideran CC de tipo flujo, el orden de error de las CC debe ser igual o mejor que el del esquema para matener su orden.

Regresivo en tiempo - Centrado en espacio (BTCS)

El sistema lineal de este esquema queda:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{h_t}+\frac{2\alpha}{h_x^2} & -\frac{\alpha}{h_x^2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{\alpha}{h_x^2} & \frac{1}{h_t}+\frac{2\alpha}{h_x^2} & -\frac{\alpha}{h_x^2} & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha}{h_x^2} & \frac{1}{h_t}+\frac{2\alpha}{h_x^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{\alpha}{h_x^2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{h_t}+\frac{2\alpha}{h_x^2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_1^{j+1} \\ T_2^{j+1} \\ T_3^{j+1} \\ \vdots \\ T_{N_x-2}^{j+1} \\ T_{N_x-1}^{j+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{h_t} \cdot \begin{pmatrix} T_1^{j} \\ T_2^{j} \\ T_3^{j} \\ \vdots \\ T_{N_x-2}^{j} \\ T_{N_x-1}^{j} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Q+\frac{\alpha T_0^{j+1}}{h_x^2} \\ Q \\ Q \\ \vdots \\ Q \\ Q+\frac{\alpha T_{N_x}^{j+1}}{h_x^2} \end{pmatrix}$$

En este caso se tomaron CC tipo Dirichlet y Q constante.
Si el problema posee CC's tipo Neumann, se debe agrega una ecuación al sistema por cada CC de este tipo. La ecuación que se agrega corresponde al tipo de discretización de la CC y no al esquema anterior.

θ-método

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} - \frac{\alpha}{h_x^2}\left[\theta\left(T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j\right) + (1-\theta)\left(T_{i-1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i+1}^{j+1}\right)\right] = \left(\theta Q_i^j + (1-\theta)\, Q_i^{j+1}\right)$$

$0 \leq \theta \leq 1$

El esquema es condicionalmente estable para $1/2 < \theta \leq 1$ e inconcionalmente estable para $0 \leq \theta \leq 1/2$.

Para $\theta = 1/2$, el método el llamado *Crank-Nicolson*.

Para $\theta \neq 1$, el método es implícito.

Centrado - Centrado (CTCS)

Se basa en utilizar una aproximación centrada de la derivada temporal. Es un método multipaso, dado que involucra a t^{j-1}, t^{j}, t^{j+1}.

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^{j-1}}{h_t} - \alpha \frac{\left(T_{i-1}^{j} - 2T_i^{j} + T_{i+1}^{j}\right)}{h_x^2} = Q_i^j$$

Para "arrancar" con este esquema también es necesario conocer a la solución en t^1. Su obtención debe realizarse por un método de un paso que posea mismo orden de error que el método CTCS *(por ejemplo, Crank-Nicolson)*.

Órdenes de error

El error cometido por los esquemas anteriores dependerá de la discretización espacial y temporal. El error en cada discretización dependerá del orden de aproximación de cada esquema ($O(h^p)$)

Los esquemas FTCS, BTCS y θ-método ($\theta \neq 1/2$) poseen orden de error $h_t + h_x^2$.

Los esquemas Crank-Nicolson y CTCS poseen orden de error $h_t^2 + h_x^2$.

Se debe mantener el mismo orden de error en la aplicación de las CC tipo flujo para no penalizar el método.

Ecuación de ondas

La ecuación de ondas es un típico problema de EDP de carácter hiperbólico.

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = f, \qquad c > 0$$

Con las siguientes CI's y CC's:

$y(x,0) = y_0(x)$, $\frac{\partial y}{\partial x}_0 = g(x)$ (CI)
$y(a,t) = y_a(t)$, $y(b,t) = y_b(t)$, ó condiciones de flujo (CC)

Este problema se puede resolver por un esquema centrado - centrado de derivadas 2das. La solución en t^1 se obtiene al utilizar la condición inicial extra necesaria para definir al problema de forma unívoca. Recordar el orden de los esquemas empleados.

Difusión del calor

Considere una barra 1D de Al de 0.3 m de largo, con el siguiente perfil de temperatura inicial:

$$T(x,0) = \begin{cases} 200 & x < 0{,}1 \text{ y } x > 0{,}2 \\ 500 & 0{,}1 \leq x \leq 0{,}2 \end{cases}$$

Resuelva el problema evolutivo para CC constantes e iguales a 200C y para CC de flujo nulo (aislación térmica).

$\alpha_{Al} \approx 10^{-4}$