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).

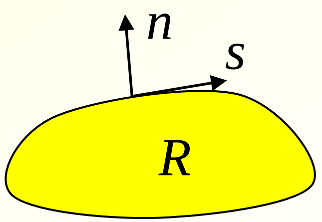
M2: Ecuación de Transporte.

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.

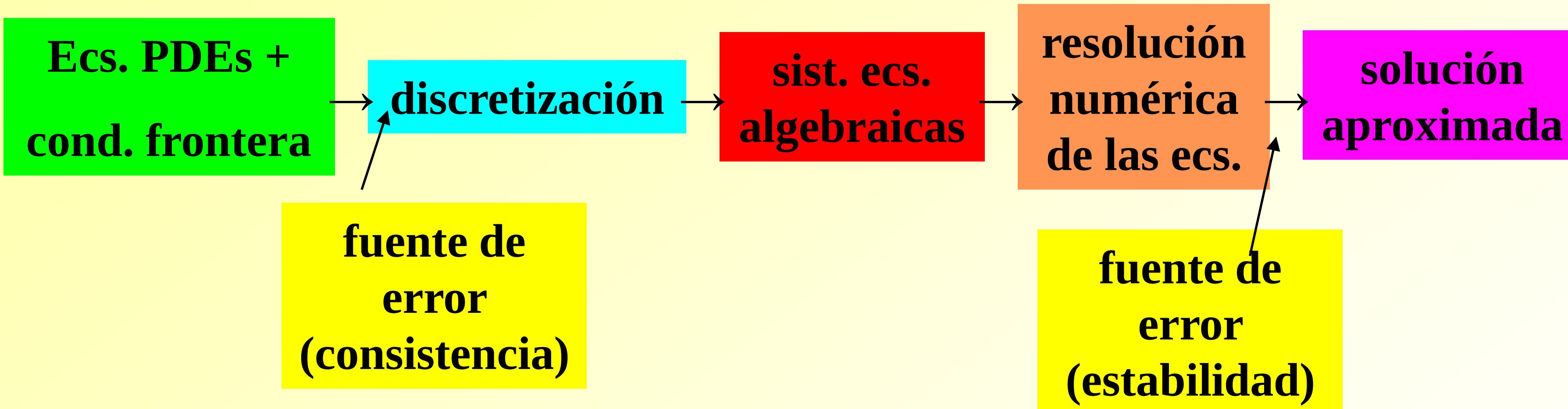
∂R=frontera

1. Condiciones de Direchlet: $T=f$ 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: $T(x=0, t)=b$

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

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

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

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{T(x+\Delta x, t) - T(x,t)}{\Delta x}\right) = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{\partial T(x+\Delta x, t)}{\partial x} - \frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\right) \approx$$

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

M2: Introducción a la Discretización.

Por lo tanto la ecuación de difusión nos queda:

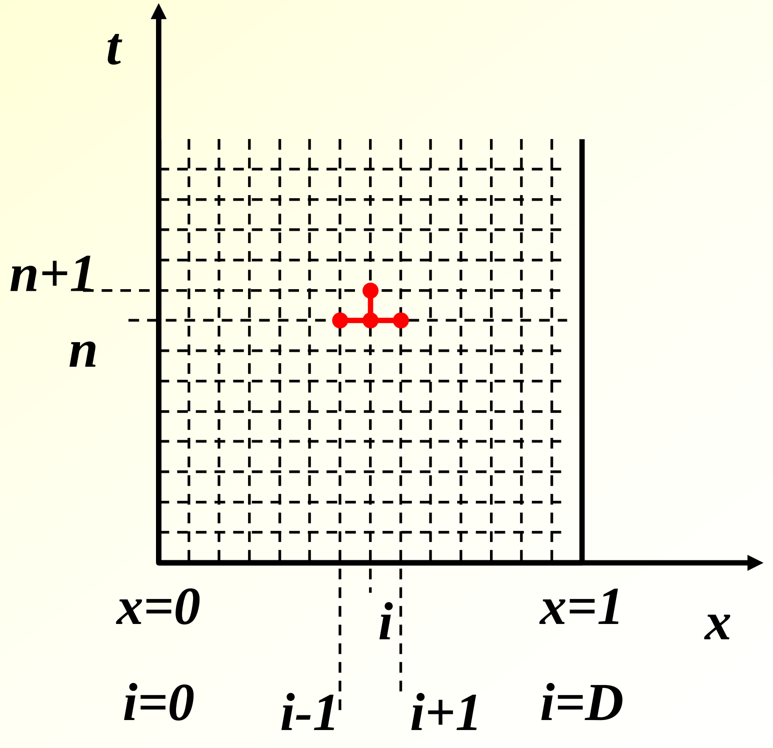
$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{\Delta x^2}$$

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

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

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

M2: Introducción a la Discretización.

Otra forma de discretización alternativa:

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

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{T(x + \Delta x, t) - T(x, t)}{\Delta x}\right) = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{\partial T(x + \Delta x, t)}{\partial x} - \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}\right) \approx$$

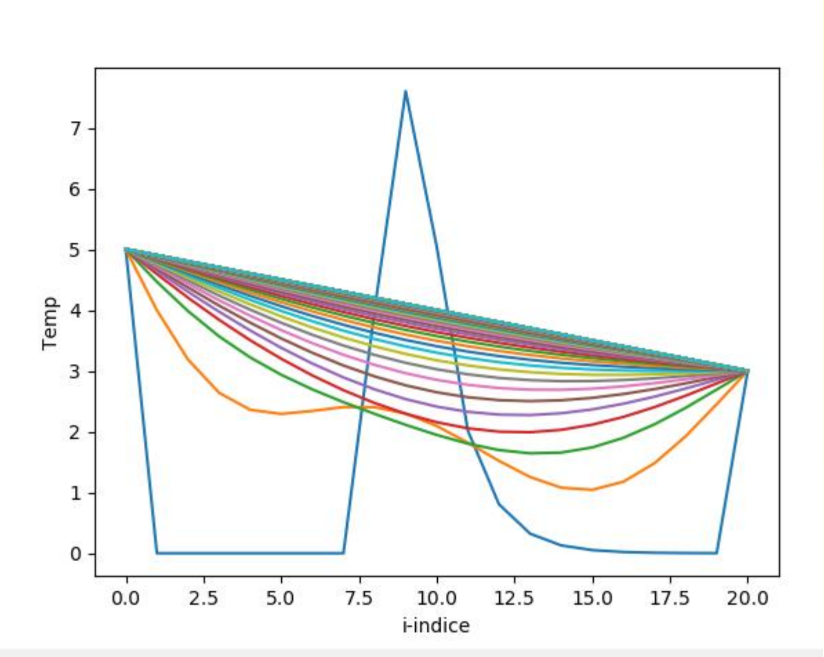
$$\approx \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{T(x + 2\Delta x, t) - T(x + \Delta x, t)}{\Delta x} - \frac{T(x + \Delta x, t) - T(x, t)}{\Delta x}\right)$$

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

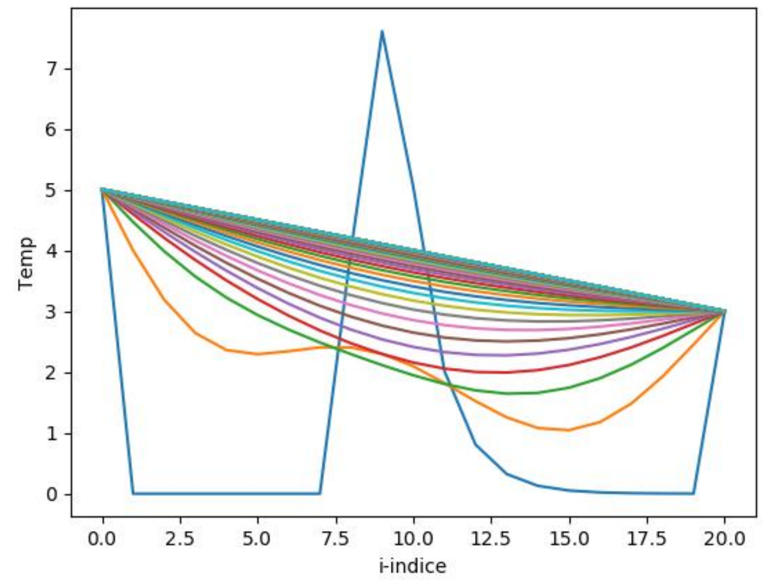
- Hay muchas formas de discretizar una derivada
- La discretización empleada debe, en la medida de lo posible, conservar la simetría de las ecuaciones originales.

M2: FTCS

```python
from numpy import *
from matplotlib.pyplot import *

N=20; dimt=1000
deltat=0.1; deltax=0.5; alfa=1

T=zeros(N+1)
T[9:11]=10

Tnew=zeros(N+1)
close('all')
figure(1); plot(T,'-r'); pause(0.1)

for n in range(dimt):
    for i in range(1,N):
        Tnew[i]=T[i]+alfa*deltat/deltax/deltax*(T[i+1]-2.*T[i]+T[i-1])
    Tnew[0]=5     # cond frontera
    Tnew[N]=3
    for i in range(0,N+1):  #actualizacion variables
        T[i]=Tnew[i]
    if n%10==0:              # dibujar
        figure(1);
        plot(T)
        pause(0.5)
        show

xlabel('i-indice')
ylabel('Temp')
```



```
import numpy as np
import matplotlib.pylab as plt

N=20; dimt=1000
deltat=0.1; deltax=0.5; alfa=1

T=np.zeros(N+1)
T[9:11]=10

Tnew=np.zeros(N+1)
plt.close('all')
plt.figure(1); plt.plot(T,'-r'); plt.pause(

for n in range(dimt):
    for i in range(1,N):
        Tnew[i]=T[i]+alfa*deltat/deltax/deltax*(T[i+1]-2.*T[i]+T[i-1])
    Tnew[0]=5     # cond frontera
    Tnew[N]=3
    for i in range(0,N+1):  #actualizacion variables
        T[i]=Tnew[i]
    if n%10==0:             # dibujar
        plt.figure(1);
        plt.plot(T)
        plt.pause(0.01)
        plt.show

plt.xlabel('i-indice')
plt.ylabel('Temp')

```



```
% Programa que integra la ecuación de difusion 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 solucion 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 0ºC y 10ºC respectivamente (condiciones de frontera de Dirichlet).

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

b) Considerar diferentes condiciones iniciales.

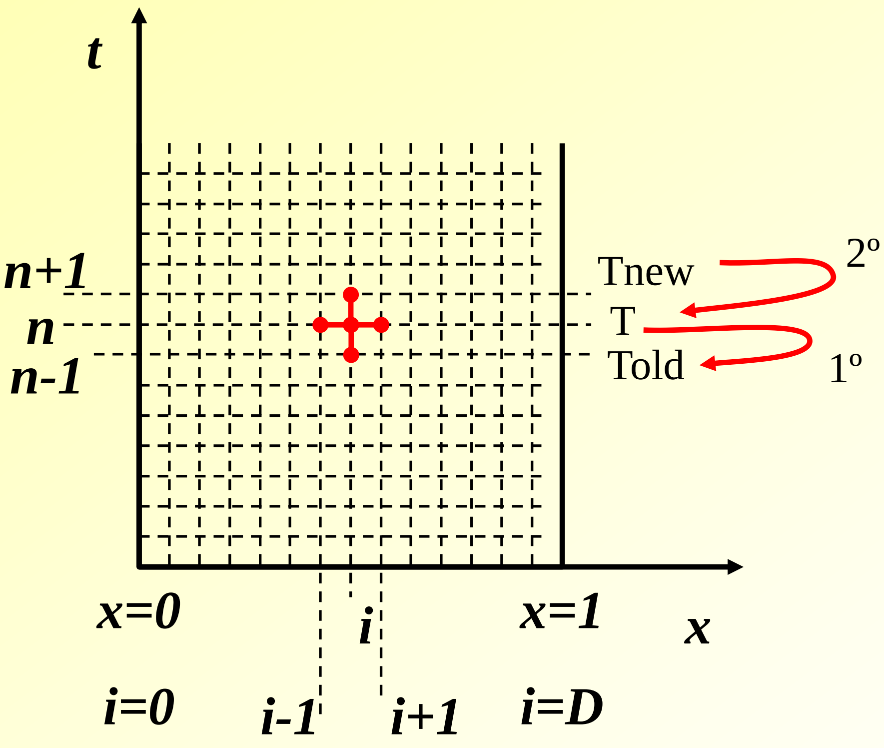
c) Considerar el caso en que uno de los focos térmicos varía su temperatura con el tiempo de forma *sin(0,5 t)*

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

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

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.

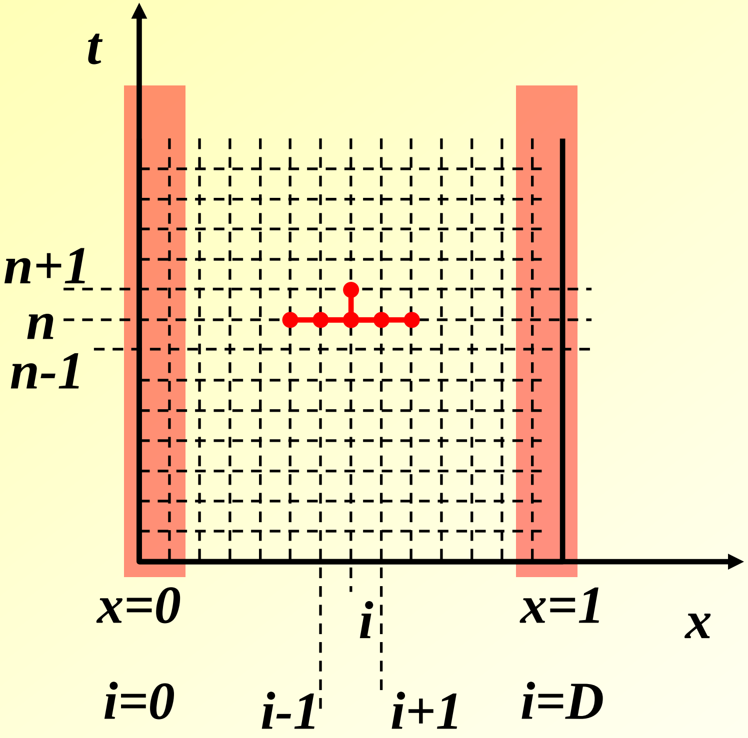
$$\frac{0.5\,T_j^{n-1} - 2\,T_j^{n} + 1.5\,T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha\left(\frac{T_{j+1}^{n} - 2\,T_j^{n} + T_{j-1}^{n}}{\Delta x^2}\right) = 0$$



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:

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

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

M2: Método General de Discretización.

Por tanto:

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

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:

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

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

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

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

Sustituyendo:

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

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:

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

Por tanto:

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

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:

Ecs. PDEs + cond. frontera → **discretización** → **sist. ecs. algebraicas** → **resolución numérica de las ecs.** → **solución aproximada**

fuente de error (consistencia)

fuente de error (estabilidad)

Consistencia + Estabilidad = Convergencia

M2: Ecuación 1D difusión. Consistencia

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

En el límite Δx, Δt → 0 estas ecuaciones algebraicas (esquema de discretización) deben devolver las PDE originales.

Hacemos expansión en serie de Taylor en torno a Δx=0 y Δt =0

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

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

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

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

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

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

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 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:

Ecs. PDEs + cond. frontera → **discretización** → **sist. ecs. algebraicas** → **resolución numérica de las ecs.** → **solución aproximada**

fuente de error (consistencia)

fuente de error (estabilidad)

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.

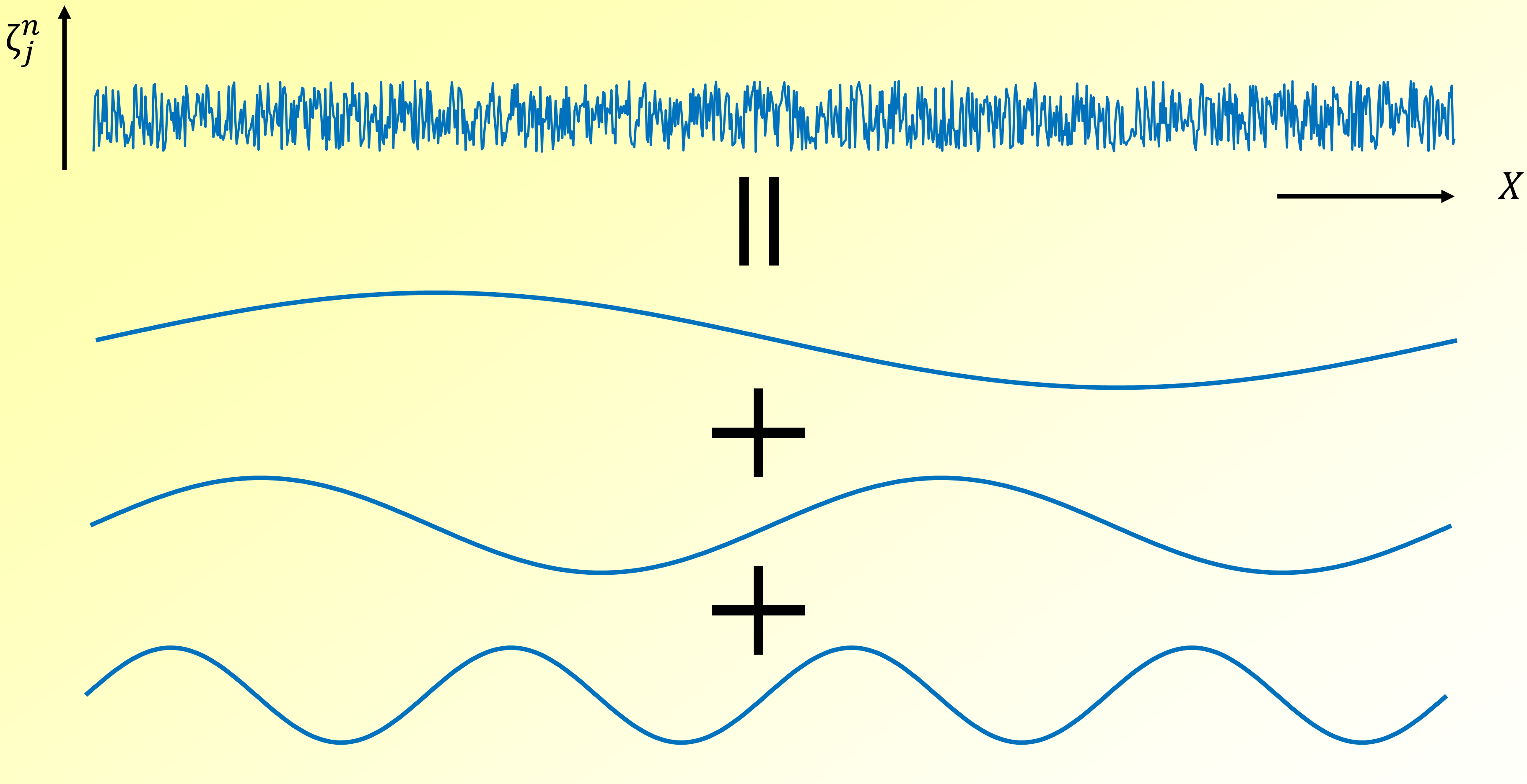
Ejemplo: Esquema FTCS para la ecuación de difusión 1D

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

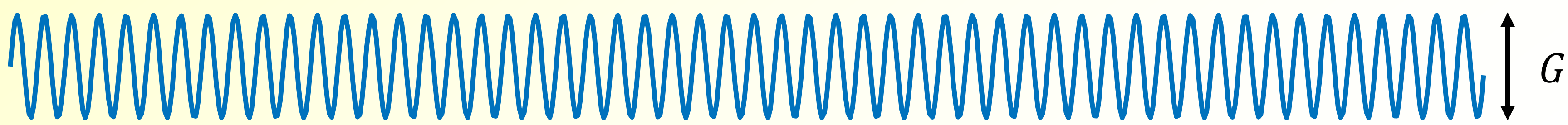
$$\Rightarrow \qquad \zeta_i^{n+1} = \zeta_i^n + s(\zeta_{i-1}^n - 2\zeta_i^n + \zeta_{i+1}^n)$$

M2: Ecuación 1D difusión. Estabilidad

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



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



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

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

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 $G \in C$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

siempre

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

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

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

$$\Rightarrow \quad s \leq {}^1\!/_2$$

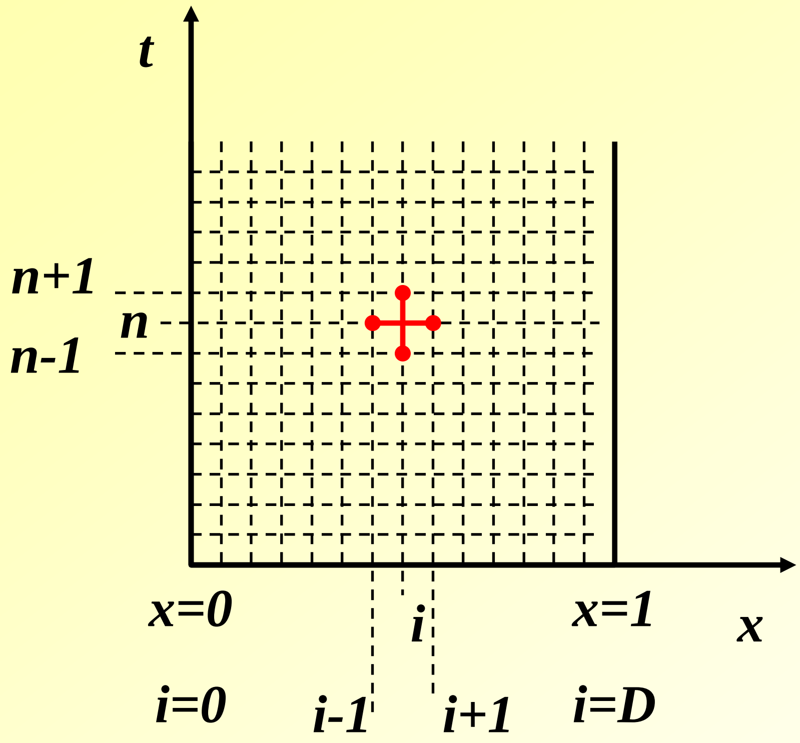
$$\Rightarrow \quad \boxed{\frac{\alpha\,\Delta t}{\Delta x^2} \leq {}^1\!/_2}$$

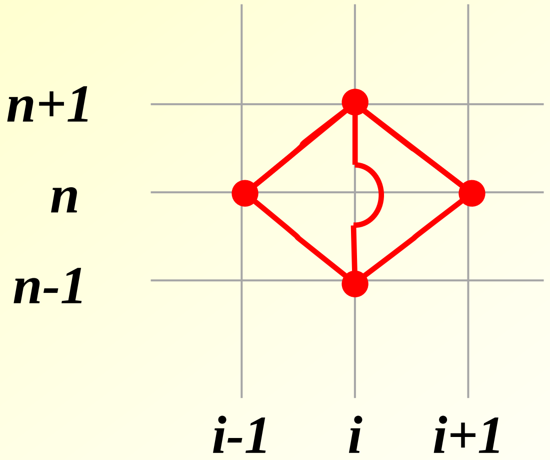
Condición de Estabilidad (se tiene que cumplir para que el ordenador nos dé una solución y no diverja). Es independiente de la consistencia del método.

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:





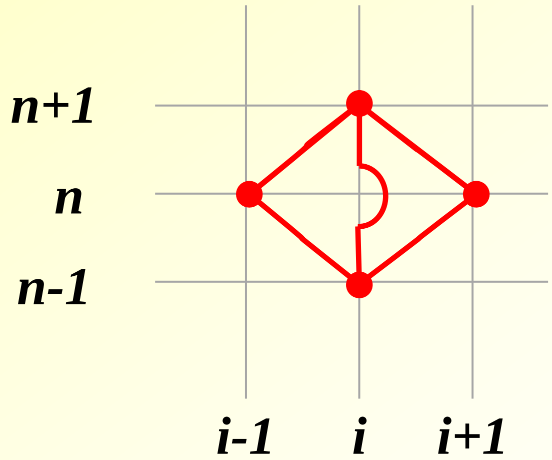
$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^{n-1}}{2\,\Delta t} = \alpha \frac{T_{i-1}^{n} - 2\,\dfrac{T_i^{n+1} + T_i^{n-1}}{2} + T_{i+1}^{n}}{\Delta x^2}$$

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

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

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

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



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.

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

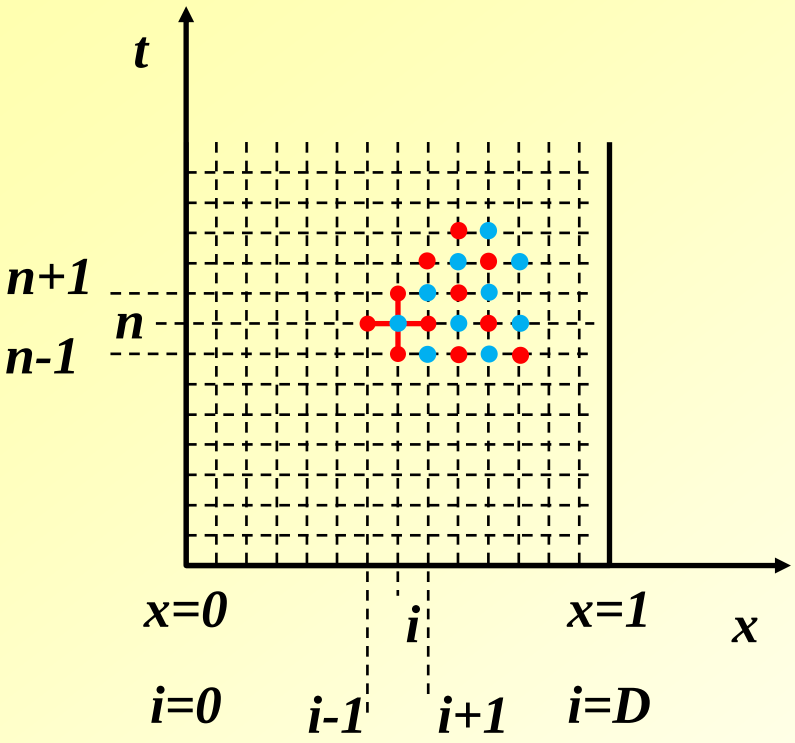
Las restricciones vienen de la consistencia, no de la estabilidad (Δt << Δx).

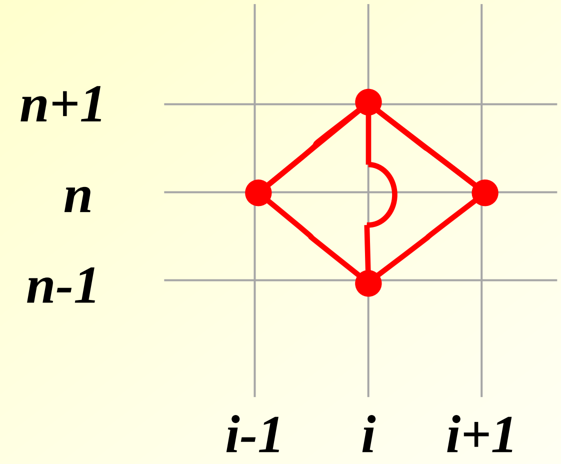
OJO: necesidad de intercambiar información entre dos intervalos de tiempo consecutivos.

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:

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

M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

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

Esquema Completamente Implícito

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

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

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

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

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

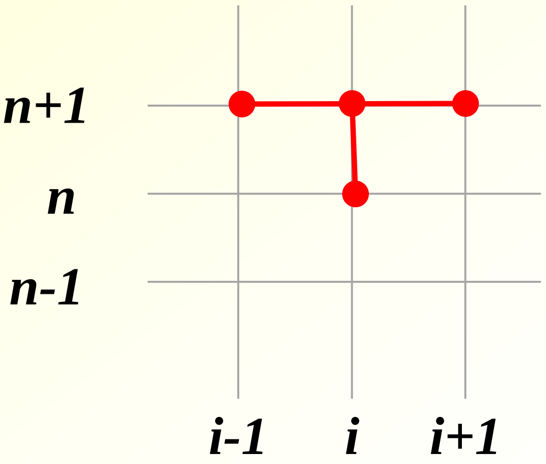
$\dots$

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

$\dots$

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

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



M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

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

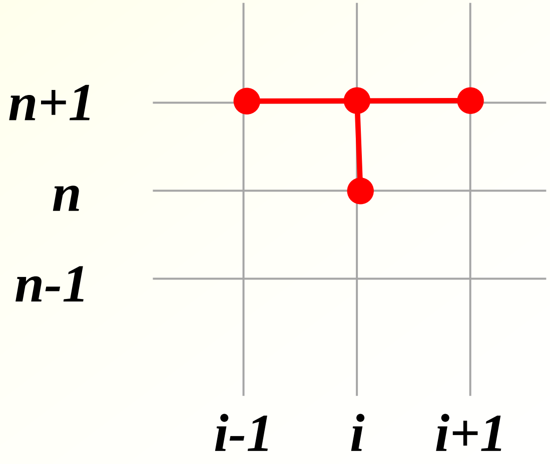
En forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & & & & \\ -s & 1+2s & -s & 0 & \dots & & & \\ & & \dots & & & & & \\ & \dots & 0 & -s & 1+2s & -s & 0 & \dots \\ & & & & & & \dots & \\ & & & \dots & 0 & -s & 1+2s & -s \\ & & & & & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0^{n+1} \\ T_1^{n+1} \\ \dots \\ T_i^{n+1} \\ \dots \\ T_{N-1}^{n+1} \\ T_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ T_2^n \\ \dots \\ T_i^n \\ \dots \\ T_{N-1}^n \\ b \end{pmatrix}$$

$$AT^{n+1} = B$$ N x N matriz

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

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

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

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

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

$$= \left(T_j + \Delta x Tx_j + \frac{\Delta x^2}{2} Txx_j + \frac{\Delta x^3}{6}\,\mathrm{Txxx}_j + \ldots\right)^{n+1}$$

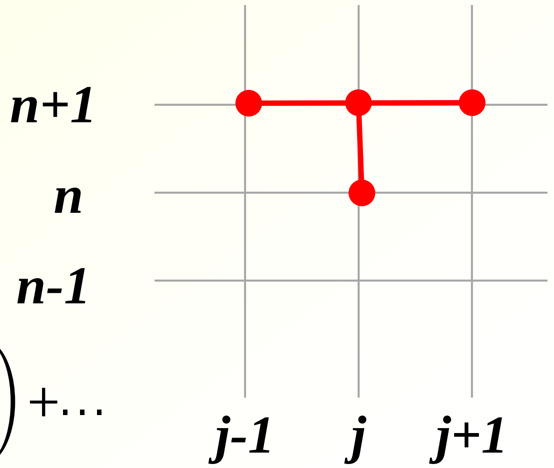
$$= \left(T_j^n + \Delta t\, T\mathrm{t}_j^n + \frac{\Delta t^2}{2}\, T\mathrm{tt}_j^n + \frac{\Delta t^3}{6}\, T\mathrm{ttt}_j^n + \ldots\right) +$$

$$+\Delta x\left(Tx_j^n + \Delta t Txt_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} Txtt_j^n + \frac{\Delta t^3}{6} Tx\mathrm{ttt}_j^n + \ldots\right) +$$

$$+\frac{\Delta x^2}{2}\left(Txx_j^n + \Delta t Txxt_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} Txxtt_j^n + \frac{\Delta t^3}{6} Txx\mathrm{ttt}_j^n + \ldots\right) +$$

$$\frac{\Delta x^3}{6}\left(Txxx_j^n + \Delta t Txxxt_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} Txxxtt_j^n + \frac{\Delta t^3}{6} Txxx\mathrm{ttt}_j^n + \ldots\right) + \ldots$$

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

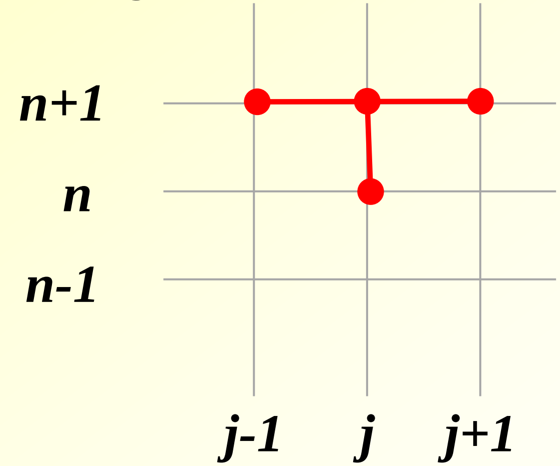


M2: Ec. 1D difusión. Métodos Implícitos

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

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

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:

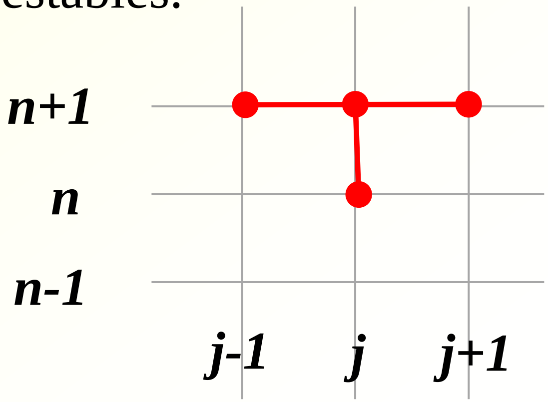
$$\Rightarrow \qquad G = [1 + 2s(1 - \cos\theta)]^{-1}$$

Condición de estabilidad: $|G| \le 1 \ \forall\theta \Rightarrow \qquad -1 \le \dfrac{1}{1+2s(1-\cos\theta)} \le 1$

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

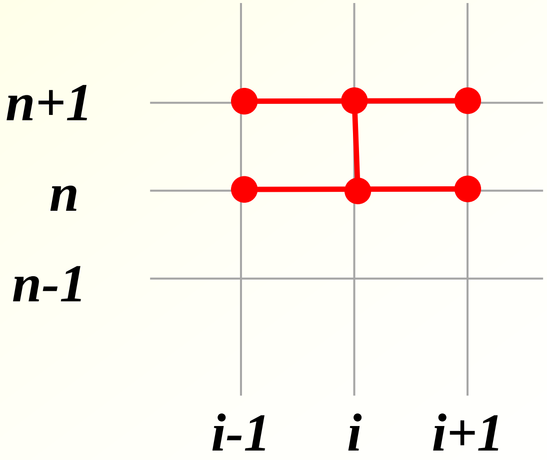
$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{1}{2}\left(\frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right)$$

$$-\frac{s}{2} T_{i-1}^{n+1} + (1+s) T_i^{n+1} - \frac{s}{2} T_{i+1}^{n+1} = \frac{s}{2} T_{i-1}^n + (1-s) T_i^n + \frac{s}{2} T_{i+1}^n \;\; , i = 1, \ldots, N$$

$$\text{con} \quad s = \frac{\alpha\, \Delta t}{\Delta x^2}$$

Se resuelve invirtiendo matrices

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



M2: Ec. 1D difusión. Crank-Nicolson

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

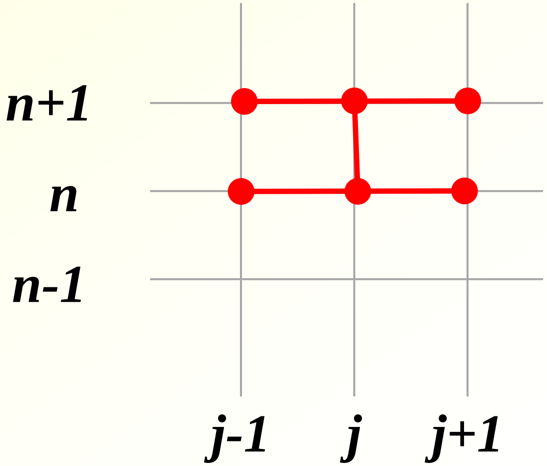
Comprobando la consistencia, llegamos al error de truncamiento para este método:

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

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

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

$$\Rightarrow \quad |G| \le 1 \text{ siempre}$$



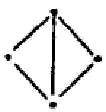
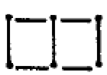
El esquema es incondicionalmente estable.

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[a] (E) (leading term)	Amplification factor $G(\theta = m\pi\Delta x)$	Stability restrictions	Remarks
FTCS 	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} T_j^n = 0$	$\alpha(\Delta x^2/2)\left(s - \frac{1}{6}\right)\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$1 - 4s\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$	$s \leq 0.5$	$s = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ $L_{xx} = \frac{1}{\Delta x^2}[1, -2, 1]$
DuFort-Frankel 	$\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\alpha}{\Delta x^2}[T_{j-1}^n - (T_j^{n-1} + T_j^{n+1}) + T_{j+1}^n] = 0$	$\alpha \Delta x^2 \left(s^2 - \frac{1}{12}\right)\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{2s\cos\theta + (1 - 4s^2\sin^2\theta)^{1/2}}{(1+2s)}$	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 	$\frac{3}{2}\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \frac{1}{2}\frac{\Delta T_j^n}{\Delta t} - \alpha L_{xx} T_j^{n+1} = 0$	$-\alpha\left(\frac{\Delta x^2}{12}\right)\frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{1 \pm \frac{4}{3} i\left[\frac{3}{16} + s(1 - \cos\theta)\right]^{1/2}}{2\left[1 + \frac{4}{3}s(1 - \cos\theta)\right]}$	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	$M_x = \{\frac{1}{6}, \frac{2}{3}, \frac{1}{6}\}$

[a] 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 $\partial T/\partial t - \alpha \partial^2 T/\partial x^2 + E(T) = 0$

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

M2: Ecuación 1D difusión.

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