Ecuaciones Diferenciales Parciales

Lección 23

Dr. Pablo Alvarado Moya

CE3102 Análisis Numérico para Ingeniería
Área de Ingeniería en Computadores
Tecnológico de Costa Rica

I Semestre 2018

Contenido

Introducción (1)

- Dada una función $u(x,y)$, sus derivadas parciales son

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{u(x+\Delta x, y) - u(x,y)}{\Delta x}$$
$$\frac{\partial u}{\partial y} = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{u(x, y+\Delta y) - u(x,y)}{\Delta y}$$

- Una ecuación diferencial parcial (EDP) se plantea en términos de derivadas parciales de una función desconocida

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2xy\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + u = 1 \qquad \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial y} + x\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 8u = 5y$$
$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)^3 + 6\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} = x \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + xu\frac{\partial u}{\partial y} = x$$

Introducción (2)

- El **orden** de una EDP es el de la derivada parcial de mayor orden en la ecuación.
- La EDP es **lineal** si los coeficientes de las derivadas solo dependen de las variables independientes.
- Aquí nos concentraremos en ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden:

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D = 0$$

- A, B, C son funciones de x e y
- D es una función de x, y, u, $\partial u/\partial x$ y $\partial u/\partial y$

Categorías de EDP de segundo orden (1)

- La ecuación anterior cae en una de tres categorías con técnicas de solución particulares, y cada una asociada a problemas de ingeniería particulares.

$B^2 - 4AC$	Categoría	Ejemplo
< 0	Elíptica	Ecuación de Laplace $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$
$= 0$	Parabólica	Ecuación de conducción de calor $\frac{\partial T}{\partial t} + k' \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$
> 0	Hiperbólica	Ecuación de onda $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

Categorías de EDP de segundo orden (2)

- En general, $B^2 - 4AC$ depende de x e y $\Rightarrow$ tipo de EDP cambia dependiendo de esos valores
- Aquí se revisarán EDP que pertenecen a una única categoría en todo el dominio de solución (x, y)

Categorías de EDP de segundo orden (3)

- Las ecuaciones **elípticas** se utilizan para caracterizar sistemas en estado estacionario (no hay derivadas respecto al tiempo).
- Las ecuaciones **parabólicas** determinan la variación temporal de una incógnita espacial, como por ejemplo en problemas de *propagación*.
- Las ecuaciones **hiperbólicas** se asocian a problemas de propagación, pero con una segunda derivada respecto al tiempo que implica oscilaciones.

Diferencias finitas: ecuaciones elípticas

Ecuación de Laplace (1)

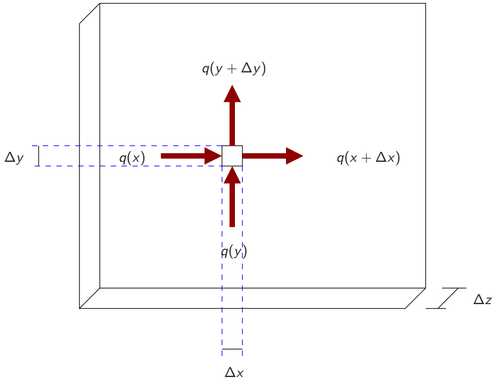
- Las ecuaciones elípticas se usan para caracterizar problemas en estado estacionario con valores en la frontera.
- La ecuación de Laplace (caso particular de ec. elíptica)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

  modela problemas relacionados con el "potencial" de una variable desconocida.
- Ejemplo: cómo se distribuye la temperatura en una placa caliente que tiene bordes en contacto con condiciones térmicas dadas.

Ecuación de Laplace (2)

- La figura muestra un elemento sobre la cara de una placa rectangular delgada de espesor Δz



Ecuación de Laplace (3)

- La placa está aislada excepto en sus extremos, donde la temperatura se ajusta a un nivel preestablecido.
- El aislamiento y espesor de la placa permiten que transferencia de calor se limite a las dimensiones x e y.
- En estado estacionario el flujo de calor hacia el elemento en una unidad de tiempo Δt debe ser igual al flujo de salida:

$$q(x)\Delta y \Delta z \Delta t + q(y)\Delta x \Delta z \Delta t = q(x+\Delta x)\Delta y \Delta z \Delta t + q(y+\Delta y)\Delta x \Delta z \Delta t$$

donde $q(x)$ y $q(y)$ son los flujos de calor en x e y respectivamente [cal/cm^{2}s]

Ecuación de Laplace (4)

- Dividiendo entre $\Delta z \Delta t$ y reagrupando se obtiene

$$[q(x) - q(x + \Delta x)]\Delta y + [q(y) - q(y + \Delta y)]\Delta x = 0$$

Multiplicando lo primero por $\Delta x/\Delta x$ y lo segundo por $\Delta y/\Delta y$

$$\frac{[q(x) - q(x + \Delta x)]}{\Delta x}\Delta x \Delta y + \frac{[q(y) - q(y + \Delta y)]}{\Delta y}\Delta y \Delta x = 0$$

Dividiendo por $\Delta x \Delta y$ y haciendo el límite

$$-\frac{\partial q}{\partial x} - \frac{\partial q}{\partial y} = 0$$

- Esta EDP expresa la conservación de la energía.

Ecuación de Laplace (5)

- Si las condiciones de frontera se dan con temperatura, debe reformularse la ecuación, usando la ley de Fourier de conducción de calor:

$$q_i = k\rho C \frac{\partial T}{\partial i} = k' \frac{\partial T}{\partial i}$$

con q_i el flujo de calor en la dirección de la dimensión i [cal/cm^{2}s], k el coeficiente de difusividad térmica [cm^{2}s], ρ la densidad del material [g/cm^3], C la capacidad calorífica del material [cal/g °C] y T la temperatura [°C] definida como

$$T = \frac{H}{\rho C V}$$

donde H es calor [cal] y V volumen [cm^3].

Ecuación de Laplace (6)

- El término $k' = k\rho C$ se denomina coeficiente de conductividad térmica [cal/s cm °C]
- La ecuación de Fourier especifica que el flujo de calor perpendicular al eje i es proporcional al gradiente de la temperatura en dirección i
- Sustituyendo esta ley de Fourier en la ecuación diferencia resulta en

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

que es la ecuación de Laplace

Ecuación de Laplace (7)

- Si hay pérdidas o fuentes de calor, la ecuación se replantea como

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = f(x, y)$$

y se denomina ecuación de Poisson

Solución de EDP elíptica (1)

- Se procede en dirección contraria a la deducción de la Ecuación de Laplace
- La solución numérica trata la placa como una malla de puntos discretos.
- Las diferencias centrales basadas en la malla usan la aproximación

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$
$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \approx \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2}$$

que tienen errores en el orden $\mathcal{O}\left((\Delta x)^2\right)$ y $\mathcal{O}\left((\Delta y)^2\right)$

Solución de EDP elíptica (2)

- Sustituyendo en la ecuación de Laplace resulta en

$$\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0$$

- Si la malla es cuadrada entonces $\Delta x = \Delta y$ y la ecuación se convierte en

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j} = 0$$

  conocida como **Ecuación laplaciana en diferencias**

- Utilizando todos los puntos en la malla bajo consideración de las condiciones iniciales se plantea un sistema de ecuaciones lineales simultáneas.

Ejemplo: Malla de 3×3

Plantee el sistema de ecuaciones lineales para una malla de 3×3 con condiciones iniciales constantes en cada borde (condición de frontera de Dirichlet)

Método de Liebmann (1)

- El sistema de ecuaciones planteado es **disperso**, esto es, tiene gran cantidad de ceros que ocupan espacio de memoria.
- Por eso, se emplean métodos aproximados para obtener soluciones de EDP elípticas.
- El método comúnmente empleado es el de Gauss-Seidel, que aplicado a las EDP se denomina método de Liebmann.
- La ecuación laplaciana de diferencias se reexpresa como

$$T_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}}{4}$$

que se resuelve de modo iterativo para $j = 1 \ldots n$ e $i = 1 \ldots m$.

Método de Liebmann (2)

- Puesto que las matrices obtenidas son diagonalmente dominantes, el procedimiento converge a una solución estable.
- Se puede emplear la sobrerelajación (luego de cada iteración) para acelerar la velocidad de convergencia:

$$T_{i,j}^{\text{nuevo}} \leftarrow \lambda T_{i,j}^{\text{nuevo}} + (1-\lambda) T_{i,j}^{\text{anterior}}$$

  con λ entre 1 y 2
- Como método de Gauss-Seidel, se itera hasta que el cambio en cada nodo sea inferior a un umbral.

Variables secundarias

- Hay aplicaciones donde variables secundarias interesan
- Por ejemplo, en ejemplo de placa caliente de temperatura se obtiene el flujo de calor como campo vectorial:

$$q_x = -k' \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta x} \qquad q_y = -k' \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j-1}}{2\Delta y}$$

que se pueden expresar en magnitud y ángulo

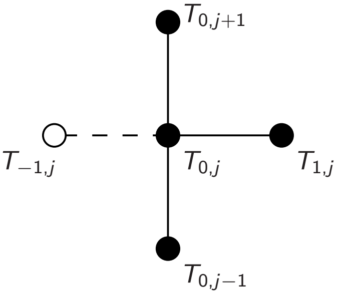
$$q_n = \sqrt{q_x^2 + q_y^2} \qquad \theta = \arctan\left(\frac{q_x}{q_y}\right)$$

Condiciones en la frontera (1)

- La condición de frontera de Dirichlet (fija) es un caso particular.
- Otra condición usual es la condición de frontera de Neumann, donde no se da el valor de la función, sino de la derivada en la frontera.
- En el problema de la placa, esto corresponde a especificar el flujo de calor y no la temperatura
- Ejemplo: si la placa está aislada, el flujo de calor (la derivada) es cero. A esto se le conoce como condición de frontera **natural**.
- Estas condiciones permiten además modelar pérdidas de calor en los bordes.

Condiciones en la frontera (2)

- La figura muestra un nodo frontera $(0, j)$.



Condiciones en la frontera (3)

- Aplicando la ecuación laplaciana de diferencias en ese punto

$$T_{1,j} + T_{-1,j} + T_{0,j+1} + T_{0,j-1} - 4T_{0,j} = 0$$

que utiliza un punto imaginario $(-1, j)$ fuera de la placa que permite incluir la derivada.

- Utilizando la primera derivada respecto a x en $(0, j)$ en diferencias divididas finitas

$$\frac{\partial T}{\partial x} \approx \frac{T_{1,j} - T_{-1,j}}{2\Delta x}$$

se despeja

$$T_{-1,j} = T_{1,j} - 2\Delta x \frac{\partial T}{\partial x}$$

Condiciones en la frontera (4)

- Sustityendo en la ecuación laplaciana de $(0, j)$

$$2T_{1,j} - 2\Delta x \frac{\partial T}{\partial x} + T_{0,j+1} + T_{0,j-1} - 4T_{0,j} = 0$$

- El procedimiento se puede repetir para las otras condiciones frontera.

Diferencias finitas: ecuaciones parabólicas

Ecuaciones parabólicas

- Las ecuaciones elípticas permitieron modelar el estado estacionario
- Las ecuaciones parabólicas permiten caracterizar problemas que varían en el tiempo.

Ecuación de conducción de calor (1)

- Asúmase una barra larga, delgada y aislada, sujeta en sus extremos por un material frío y otro caliente.
- A diferencia del estado estacionario, se considera la cantidad de calor que se almacena en un elemento en un periodo Δt.
- El resultado sigue la forma entradas $-$ salidas $=$ acumulación:

$$q(x)\Delta y\Delta z\Delta t - q(x+\Delta x)\Delta y\Delta z\Delta t = \Delta x\Delta y\Delta z\rho C\Delta T$$

- Dividiendo entre el volumen $\Delta x\Delta y\Delta z$ y entre Δt

$$\frac{q(x)-q(x+\Delta x)}{\Delta x} = \rho C\frac{\Delta T}{\Delta t}$$

Ecuación de conducción de calor (2)

- Tomando los límites $\Delta t \to 0$ y $\Delta x \to 0$

$$\frac{\partial q}{\partial x} = \rho C \frac{\partial T}{\partial t}$$

- Con la ley de Fourier para conducción de calor, sustituyendo se obtiene

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

  que es la ecuación de conducción del calor
- Esta también se resuelve sustituyendo las derivadas parciales por diferencias divididas finitas.

Ecuación de conducción de calor (3)

- La diferencia con las EDP elípticas es que aquellas están acotadas en todas las dimensiones, pero las EDP parabólicas están abiertas en el tiempo.
- Por la dependencia temporal las soluciones tienen problemas de estabilidad.
- Existen métodos **explícitos** e **implícitos** de solución

Método explícito (1)

- La ecuación de conducción del calor

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

requiere aproximaciones de la segunda derivada en el espacio, y la primera derivada en el tiempo.

- La segunda derivada se aproxima con la diferencia dividida finita centrada

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^{l} - 2T_i^{l} + T_{i-1}^{l}}{\Delta x^2}$$

con error $\mathcal{O}\left(\Delta x^2\right)$.

- El superíndice l denota tiempo y los subíndices el espacio.

Método explícito (2)

- La aproximación hacia adelante sustituye a la derivada temporal

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

con error $\mathcal{O}(\Delta t)$.

- Con ambas aproximaciónes, la ecuación de conducción del calor es

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

de donde resulta

$$T_i^{l+1} = T_i^l + \lambda(T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l)$$

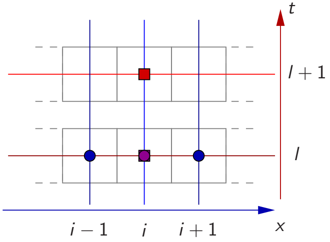
donde $\lambda = k\Delta t/(\Delta x)^2$.

Método explícito (3)

- El sistema de ecuaciones que se plantea para el próximo instante $l+1$ contiene la ecuación anterior

$$T_i^{l+1} = T_i^l + \lambda(T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l)$$

para todos los nodos interiores de la barra (en el espacio) basándose en los valores presentes l del nodo y sus vecinos.



Convergencia y estabilidad (1)

- **Convergencia** significa que conforme Δx y Δt tiendan a cero, los resultados de la técnica por diferencias finitas se aproximan a la solución verdadera.
- **Estabilidad** significa que los errores en cualquier etapa del cálculo se atenúna conforme este avanza.
- Carnahan et al. demostraron que el método explícito es convergente y estable si $\lambda \leq 1/2$ o

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{k}$$

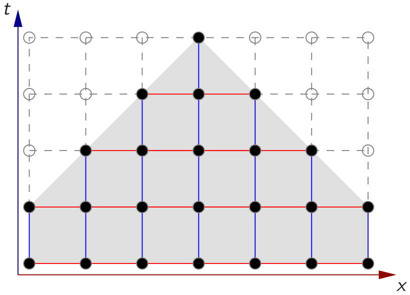
- Si bien con $\lambda \leq 1/2$ asegura que los errores no crecen, estos pueden oscilar.
- Con $\lambda \leq 1/4$ se asegura que la solución no oscila.

Convergencia y estabilidad (2)

- Con $\lambda = 1/6$ se minimizan los errores de truncamiento.
- Nótese que si el tamaño de paso espacial se reduce en 2, entonces el tamaño de paso temporal debe reducirse en 4 para mantener la estabilidad, lo que implica que el total de cálculos requeridos se multiplica por 8.
- Técnicas para introducir la derivada en condiciones frontera se deducen de igual forma que con las EDP elípticas.

Método implícito (1)

- Las formulaciones explícitas por diferencias finitas tienen problemas asociados a la estabilidad, e ignoran información que afecta la solución.



Método implícito (2)

- En la forma **explícita** se aproxima la derivada espacial para el tiempo l, de modo que en la aproximación de la EDP se tiene una sola incógnita T_i^{l+1}, lo que permite despejarla explícitamente.
- En los métodos **implícitos**, la derivada se aproxima en un nivel de tiempo posterior $l+1$. Por ejemplo, la segunda derivada se aproxima con

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{(\Delta x)^2}$$

que tiene exactitud de segundo orden.

Método implícito (3)

- Lo anterior evita que las ecuaciones se puedan resolver explícitamente y requiere el planteamiento y solución de un sistema completo de ecuaciones, solucionable cuando se consideran las condiciones de frontera.
- Utilizando la ecuación de conducción

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

junto a la segunda derivada anterior y la derivada temporal

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

se obtiene

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

Método implícito (4)

- Con $\lambda = k\Delta t/(\Delta x)^2$ se expresa como

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1+2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = T_i^l$$

- Esta ecuación se aplica a todos los nodos excepto al primero y último de los nodos interiores que se deben modificar para incluir las condiciones frontera.
- En el extremo izquierdo ($i = 0$), por ejemplo

$$T_0^{i+1} = f_0(t^{l+1})$$

con $f_0(t^{l+1})$ una función que describe cómo cambia con el tiempo la temperatura en la frontera.

Método implícito (5)

- Para el primer nodo la ecuación cambia a

$$(1+2\lambda)T_1^{l+1} - \lambda T_2^{l+1} = T_1^l + \lambda f_0(t^{l+1})$$

- De modo similar, para el último nodo

$$-\lambda T_{m-1}^{l+1} + (1+2\lambda)T_m^{i+1} = T_m^l + \lambda f_{m+1}(t^{l+1})$$

  donde $f_{m+1}(t^{l+1})$ describe los cambios de temperatura en el extremo derecho ($l = m+1$)

- El sistema de ecuaciones resultante es tridiagonal, lo que permite emplear métodos más eficientes de solución (p.ej. algoritmo de Thomas).
- El método implícito es estable y convergente, pero tiene exactitud de primer orden para la componente temporal y de segundo orden para la espacial.

Método de Crank-Nicolson (1)

- El método de Crank-Nicolson ofrece un esquema implícito alternativo que tiene exactitud de segundo orden tanto en espacio como en tiempo.
- Se utilizan aproximaciones por diferencia en el punto medio del incremento del tiempo $t^{l+1/2}$:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

La segunda derivada espacial se determina en el punto medio promediando las aproximaciones por diferencias al principio (t^l) y al final (t^{l+1}) del incremento del tiempo:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{1}{2}\left[\frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{(\Delta x)^2} + \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{(\Delta x)^2}\right]$$

Método de Crank-Nicolson (2)

- Sustituyendo en la ecuación de conducción de calor y reagrupando

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1}+2(1+\lambda)T_i^{l+1}-\lambda T_{i+1}^{l+1}=\lambda T_{i-1}^{l}+2(1-\lambda)T_i^{l}+\lambda T_{i+1}^{l}$$

con $\lambda = k\Delta t/(\Delta x)^2$

- Las condiciones de frontera las determinan $T_0^{l+1}=f_0(t^{l+1})$ y $T_{m+1}^{l+1}=f_{m+1}(t^{l+1})$.
- El primer nodo interior tiene la ecuación

$$2(1+\lambda)T_1^{l+1}-\lambda T_2^{l+1}=\lambda f_0(t^l)+2(1-\lambda)T_1^l+\lambda T_2^l+\lambda f_0(t^{l+1})$$

- El último nodo interior

$$-\lambda T_{m+1}^{l+1}+2(1+\lambda)T_m^{l+1}=\lambda f_{m+1}(t^l)+2(1-\lambda)T_m^l+\lambda T_{m-1}^l+\lambda f_{m+1}(t^{l+1})$$

- El sistema resultante también es tridiagonal, y por tanto eficientemente solucionable.

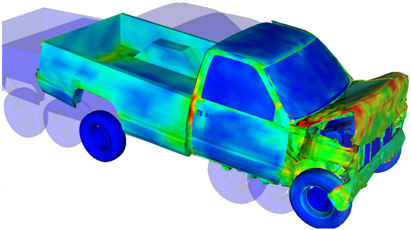
Hasta ahora...

Hasta ahora:

- Diferencias finitas para solucionar EDP
- Dominio de solución ha sido malla discreta
- Solución: derivadas parciales se reemplazan por diferencias divididas finitas
- Conceptualmente fáciles de entender
- No aplican a geometrías irregulares, con condiciones frontera complejas, o de composición heterogénea

Elementos finitos

- Elementos finitos son la alternativa usada para todas las condiciones anteriores



Elementos finitos

- Dominio de solución se divide en **elementos**
- Se desarrolla solución a EDP para cada elemento
- Solución total se genera uniendo soluciones individuales, y asegurando continuidad de solución en las fronteras entre elementos.

Enfoque general

1. Discretización
2. Ecuaciones de elementos
    - Elección de funciones de aproximación
    - Ajuste de funciones a solución
3. Ensamble
4. Condiciones de frontera
5. Solución
6. Postprocesamiento

Resumen

1. Introducción
   - Ecuaciones diferenciales parciales
   - EDP de segundo orden
2. Diferencias finitas: ecuaciones elípticas
   - Ecuación de Laplace
   - Método de Liebmann
   - Variables secundarias
   - Condiciones en la frontera
3. Diferencias finitas: ecuaciones parabólicas
   - Método explícito
   - Método implícito
4. Elementos finitos

Este documento ha sido elaborado con software libre incluyendo LaTeX, Beamer, GNUPlot, GNU/Octave, XFig, Inkscape, LTI-Lib-2, GNU-Make y Subversion en GNU/Linux