Método de Diferencias Finitas

(S)cientific (C)omputing (T)eam II-2014 ILI-286 DI-UTFSM Chile

26 de octubre de 2014

## Contenido

### **EDP** Parabólica

Llamaremos a una EDP parabólica cuando tiene la forma

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + F(u_x, u_y, u, x, y) = 0$$

y se cumple  $B^2 - 4AC = 0$ .

O bien, teniendo una forma más general, es posible reducirla a una caso equivalente al anterior.

### Ejemplos de EDP parabólicas:

Ecuación de Difusión

$$Au_{xx}(x,y)-u_y(x,y)=0$$

Ecuación de Advección-Difusión

$$Au_{xx}(x,y)-u_{y}(x,y)+bu_{x}(x,y)=0$$

Claramente  $0^2 - 4 \cdot 1 \cdot 0 = 0$ , las EDP son parabólicas.

### Características de EDP parabólicas:

- Se asocian con una evolución en el tiempo, además de cambios en el espacio.
- En general las soluciones son disipativas, es decir, los valores máximos disminuyen en el tiempo.

Reescribiendo los ejemplos de EDP parabólicas en la notación tradicional:

Ecuación de Difusión

$$u_t(x,t) = Du_{xx}(x,t)$$

Ecuación de Advección-Difusión

$$u_t(x,y) = Du_{xx}(x,t) + bu_x(x,t)$$

D > 0 es llamado coeficiente de difusividad, y tiene unidades en  $[m^2/s]$ .

#### Formulación General de Ecuación de Calor

Sea  $t \in [0, T_{max}]$  y  $x \in [a, b]$ . ¿Qué función u(x, t) es solución de la siguiente EDP?

$$u_t(x,t) = Du_{xx}(x,t)$$

$$u(x,0) = f(x)$$

$$u(a,t) = I(t)$$

$$u(b,t) = r(t)$$

### **Diferencias Finitas**

La idea central del método de Diferencias Finitas consiste en utilizar una grilla de valores discretos para las variables independientes (*x* y *t*). El problema continuo se reemplaza por un problema finito consistente en un número finito de equaciones involucrando los valores de la incógnita *u*.

Ya hemos visto que es posible utilizar diversas aproximaciones para reeemplazar la evaluación de la derivada.

$$\frac{df}{dx}(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x^{1})$$

$$= \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x^{1})$$

$$= \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^{2})$$

$$\frac{d^{2}f}{dx^{2}}(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^{2}} + O(\Delta x^{2})$$

En el caso de la ecuación parabólica de calor  $u_t(x,t) = u_{xx}(x,t)$ , aplicaremos para la derivada espacial

$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+\Delta x,t)-2u(x,t)+u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + O\left(\Delta x^2\right)$$

Mientras que para la derivada temporal tenemos varias opciones:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + O(\Delta x^1)$$

$$= \frac{u(x,t) - u(x,t-\Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta x^1)$$

$$= \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t-\Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta x^2)$$

Las combinaciones de aproximaciones para  $u_t$  y  $u_{xx}$  dan lugar a esquemas numéricos de distintas propiedades.

### **Aplicación**

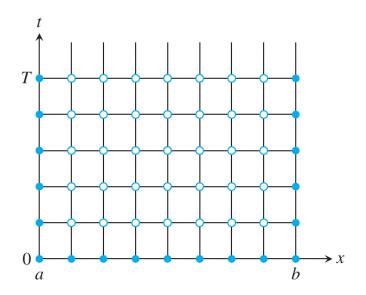
¿Como se aplica el método de diferencias finitas en nuestra EDP parabólica?

Discretizando [a,b] de manera regular en  $N_x+1$  puntos, de manera que  $\Delta x = \frac{b-a}{N_x}$  y se tiene

$$x_i = x_0 + i\Delta x = a + i\Delta x, i \in \{0, 1, 2, ..., N_x\}$$

También necesitamos definir una discretización para el intervalo  $[0, T_{max}]$  de la variable temporal,  $\Delta t = \frac{T_{max}}{N_t}$ , de modo que

$$t_j = j\Delta t, j \in \{0, 1, 2, ..., N_t\}$$



No buscaremos resolver la ecuación en todos los puntos, sino únicamente en los puntos de nuestra discretización. Esto es, sólo nos interesan los valores:

$$w_{i,n} = u(x_i, t_n) \ i \in \{0, 1, 2, ..., N_x\},\ n \in \{0, 1, 2, ..., N_t\}$$

Existen por tanto  $(N_x + 1) \times (N_t + 1)$  incógnitas que debemos encontrar.

A diferencia de las ecuaciones elípticas, no resolveremos para todas las incógnitas simultáneramente, sino que haremos "evolucionar" la solución.

$$w_{0,0}, w_{1,0}, w_{2,0}, ..., w_{N_x,0} \quad (t = t_0)$$
 $w_{0,1}, w_{1,1}, w_{2,1}, ..., w_{N_x,1} \quad (t = t_1 = t_0 + \Delta t)$ 
 $w_{0,2}, w_{1,2}, w_{2,2}, ..., w_{N_x,2} \quad (t = t_2 = t_1 + \Delta t)$ 
 $w_{0,3}, w_{1,3}, w_{2,3}, ..., w_{N_x,3} \quad (t = t_3 = t_2 + \Delta t)$ 
 $\vdots$ 
 $w_{0,N_t}, w_{1,N_t}, w_{2,N_t}, ..., w_{N_x,N_t} \quad (t = t_{N_t})$ 

Esquema Explícito

### Esquema Explícito

Tomando la aproximación "adelantada" de la derivada temporal:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + O\left(\Delta x^{1}\right)$$

$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+\Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^{2}} + O\left(\Delta x^{2}\right)$$

Keywords: Forward Difference Method, Explicit Euler Method, Forward Time and Centered Space, etc.

#### Esquema Explícito

Se obtiene la siguiente aproximación

$$\frac{u(x,t+\Delta t)-u(x,t)}{\Delta t}=D\frac{u(x+\Delta x,t)-2u(x,t)+u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2}$$

lo cual en nuestros puntos de discretización ( $i\Delta x$ ,  $n\Delta t$ ) es

$$\frac{w_{i,n+1}-w_{i,n}}{\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n}-2w_{i,n}+w_{i-1,n})$$

#### Esquema Explícito

El esquema numérico

$$\frac{w_{i,n+1}-w_{i,n}}{\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n}-2w_{i,n}+w_{i-1,n})$$

puede reescribirse,  $\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ , como

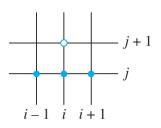
$$w_{i,n+1} = w_{i,n} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (w_{i+1,n} - 2w_{i,n} + w_{i-1,n})$$
  
=  $\sigma w_{i+1,n} + (1 - 2\sigma)w_{i,n} + \sigma w_{i-1,n}$ 

#### Esquema Explícito

El esquema explícit para la ecuación de calor es:

$$\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$\mathbf{w}_{i,n+1} = \sigma \mathbf{w}_{i+1,n} + (1 - 2\sigma) \mathbf{w}_{i,n} + \sigma \mathbf{w}_{i-1,n}$$



#### Esquema Explícito

El esquema numérico explícito es por tanto:

$$\begin{bmatrix} w_{0,0} \\ w_{1,0} \\ w_{2,0} \\ \vdots \\ w_{N_x,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N_x}) \end{bmatrix},$$

y para  $n \ge 0$ ,

$$\begin{bmatrix} w_{0,n+1} \\ w_{1,n+1} \\ w_{2,n+1} \\ \vdots \\ w_{N_{x},n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sigma & 1 - 2\sigma & \sigma & \dots & 0 \\ 0 & \sigma & 1 - 2\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n} \\ w_{1,n} \\ w_{2,n} \\ \vdots \\ w_{N_{x},n} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I(t_{n+1}) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ I(t_{n+1}) \end{bmatrix}$$

Esquema Explícito

### Ventajas

- Simple de programar.
- Bajo costo computacional.

### Desventajas

- Método explícito requiere que  $\frac{D\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$  para ser estable.
- Discretización temporal está condicionado a la discretización temporal.
- Error de aproximación:  $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$

Esquema Implícito

### Esquema Implícito

Tomando la aproximación "atrasada" de la derivada temporal:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t) - u(x,t - \Delta t)}{\Delta t} + O\left(\Delta x^{1}\right)$$

$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x + \Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x - \Delta x,t)}{\Delta x^{2}} + O\left(\Delta x^{2}\right)$$

Keywords: Backwards Difference Method, Implicit Euler Method, Backward Time and Centered Space, etc.

#### Esquema Implícito

Se obtiene la siguiente aproximación

$$\frac{u(x,t)-u(x,t-\Delta t)}{\Delta t}=D\frac{u(x+\Delta x,t)-2u(x,t)+u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2}$$

lo cual en nuestros puntos de discretización  $(i\Delta x, n\Delta t)$  requiere

$$\frac{w_{i,n}-w_{i,n-1}}{\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n}-2w_{i,n}+w_{i-1,n})$$

#### Esquema Implícito

El esquema numérico

$$\frac{w_{i,n}-w_{i,n-1}}{\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n}-2w_{i,n}+w_{i-1,n})$$

es

$$w_{i,n+1} - \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}(w_{i+1,n+1} - 2w_{i,n+1} + w_{i-1,n+1}) = w_{i,n}$$

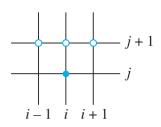
y puede reescribirse, usando  $\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ , como

$$-\sigma W_{i+1,n+1} + (1+2\sigma)W_{i,n+1} - \sigma W_{i-1,n+1} = W_{i,n}$$

#### Esquema Implícito

El esquema explícit para la ecuación de calor es:

$$\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$
$$-\sigma \mathbf{w}_{i+1,n+1} + (1+2\sigma)\mathbf{w}_{i,n+1} - \sigma \mathbf{w}_{i-1,n+1} = \mathbf{w}_{i,n}$$



#### Esquema Explícito

### El esquema numérico implícito es por tanto:

$$\begin{bmatrix} w_{0,0} \\ w_{1,0} \\ w_{2,0} \\ \vdots \\ w_{N_x,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N_x}) \end{bmatrix},$$

y para  $n \ge 0$ ,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\sigma & 1+2\sigma & -\sigma & \dots & 0 \\ 0 & -\sigma & 1+2\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n+1} \\ w_{1,n+1} \\ w_{2,n+1} \\ \vdots \\ w_{N_{N},n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n} \\ w_{1,n} \\ w_{2,n} \\ \vdots \\ w_{N_{N},n} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I(t_{n+1}) \\ 0 \\ \vdots \\ I(t_{n+1}) \end{bmatrix}$$

Esquema Implícito

### Ventajas

- Método implícito es incodicionalmente estable.
- Discretización temporal no está condicionado a la discretización temporal.

### Desventajas

- Requiere resolver un sistema lineal en cada paso temporal.
- Error de aproximación:  $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$ .

Esquema Leap Frog

### Esquema Leap Frog

Tomando la aproximación de segundo orden de la derivada temporal:

$$u_t(x,t) = \frac{u(x,t+\Delta t) - u(x,t-\Delta t)}{2\Delta t} + O(\Delta x^2)$$

$$u_{xx}(x,t) = \frac{u(x+\Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

Keywords: Leap Frog Method.

Se obtiene la siguiente aproximación

$$\frac{u(x,t+\Delta t)-u(x,t-\Delta t)}{2\Delta t}=D\frac{u(x+\Delta x,t)-2u(x,t)+u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2}$$

lo cual en nuestros puntos de discretización  $(i\Delta x, n\Delta t)$  requiere

$$\frac{w_{i,n+1}-w_{i,n-1}}{2\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n}-2w_{i,n}+w_{i-1,n})$$

El esquema numérico

$$\frac{w_{i,n+1}-w_{i,n-1}}{2\Delta t}=\frac{D}{\Delta x^2}(w_{i+1,n}-2w_{i,n}+w_{i-1,n})$$

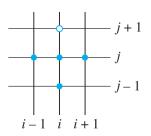
puede reescribirse como

$$w_{i,n+1} = \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2}(w_{i+1,n} - 2w_{i,n} + w_{i-1,n}) + w_{i,n-1}$$

El esquema Leap Frog para la ecuación de calor es:

$$\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$\mathbf{w}_{i,n+1} = 2\sigma \mathbf{w}_{i+1,n} - 4\sigma \mathbf{w}_{i,n} + 2\sigma \mathbf{w}_{i-1,n} + \mathbf{w}_{i,n-1}$$



Esquema Leap Frog

### Ventajas

• Error de aproximación:  $O\left(\Delta t^2\right) + O\left(\Delta x^2\right)$ 

### Desventajas

- Requiere resolver un sistema lineal en cada paso temporal.
- Requiere mantener 3 instantes tiempos en memoria.
- Es incondicionalmente inestable: en pocas palabras, muy rápidamente deja de funcionar correctamente.
- No utilicen este método.

Esquema de Crank Nicholson

### Esquema de Crank-Nicolson

Es posible combinar los métodos explítos e implícitos, si consideramos:

$$u_{t}(x,t) = \frac{u(x,t + \Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + O(\Delta x^{1})$$

$$u_{xx}(x,t) = \frac{1}{2} \frac{u(x + \Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x - \Delta x,t)}{\Delta x^{2}} + \frac{1}{2} \frac{u(x + \Delta x,t + \Delta t) - 2u(x,t + \Delta t) + u(x - \Delta x,t + \Delta t)}{\Delta x^{2}}$$

Keywords: Crank-Nicolson Method.

Esquema de Crank Nicholson

Se obtiene la siguiente aproximación

$$\frac{u(x,t+\Delta t)-u(x,t)}{\Delta t} = \frac{D}{2} \frac{u(x+\Delta x,t)-2u(x,t)+u(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + \frac{D}{2} \frac{u(x+\Delta x,t+\Delta t)-2u(x,t+\Delta t)+u(x-\Delta x,t+\Delta t)}{\Delta x^2}$$

lo cual en nuestros puntos de discretización  $(i\Delta x, j\Delta t)$  requiere

$$\frac{w_{i,n+1} - w_{i,n}}{\Delta t} = \frac{D}{2\Delta x^2} \Big( w_{i+1,n+1} - 2w_{i,n+1} + w_{i-1,n+1} + w_{i+1,n} - 2w_{i,n} + w_{i-1,n} \Big)$$

#### Esquema de Crank Nicholson

### El esquema numérico

$$\frac{w_{i,n+1} - w_{i,n}}{\Delta t} = \frac{D}{2\Delta x^2} \Big( w_{i+1,n+1} - 2w_{i,n+1} + w_{i-1,n+1} + w_{i+1,n} - 2w_{i,n} + w_{i-1,n} \Big)$$

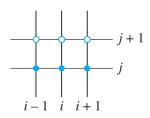
Puede reescribirse, utilizando  $\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$  como

$$-\sigma \textit{W}_{i+1,n+1} + (2+2\sigma) \textit{W}_{i,n+1} - \sigma \textit{W}_{i-1,n+1} = \sigma \textit{W}_{i+1,n} + (2-2\sigma) \textit{W}_{i,n} + \sigma \textit{W}_{i-1,n}$$

#### Esquema de Crank Nicholson

El esquema de Crank-Nicolson para la ecuación de calor es:

$$\sigma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} - \sigma w_{i+1,n+1} + (2+2\sigma)w_{i,n+1} - \sigma w_{i-1,n+1} = \sigma w_{i+1,n} + (2-2\sigma)w_{i,n} + \sigma w_{i-1,n}$$



#### Esquema de Crank Nicholson

El esquema numérico Crank-Nicolson para la ecuación de calor es:

$$\begin{bmatrix} w_{0,0} \\ w_{1,0} \\ w_{2,0} \\ \vdots \\ w_{N_x,0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N_x}) \end{bmatrix},$$

y para  $n \ge 0$ ,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\sigma & 2+2\sigma & -\sigma & \dots & 0 \\ 0 & -\sigma & 2+2\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n+1} \\ w_{1,n+1} \\ w_{2,n+1} \\ \vdots \\ w_{N_X,n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sigma & 2-2\sigma & \sigma & \dots & 0 \\ 0 & \sigma & 2-2\sigma & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{0,n} \\ w_{1,n} \\ w_{2,n} \\ \vdots \\ w_{N_X,n} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} I(t_{n+1}) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ I(t_{n+1}) \end{bmatrix}$$

Esquema Crank-Nicolson

### Ventajas

- Método implícito es incodicionalmente estable.
- Error de aproximación:  $O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2)$ .
- Discretización temporal no está condicionado a la discretización temporal.

### Desventajas

• Requiere resolver un sistema lineal en cada paso temporal.

### **Preguntas**

- ¿Qué tan bien funcionan los métodos? ¿Se puede tomar cualquier combinación de  $\Delta t$  y  $\Delta x$ ?
- ¿Cómo se pueden implemetar de manera eficiente los métodos descritos?
- ¿Cómo se extienden los métodos para la ecuación de calor en 2 dimensiones,  $u_t = D(u_{xx} + u_{yy})$ ?
- ¿Cómo se podrían implementar otras condiciones de frontera (Neumann, Robin)?
- ¿Qué cambios son necesarios para resolver otras EDP parabólicas, como la ecuación de difusión advección?
- ¿Qué pasaría si se trabajara en coordenadas cilíndricas o esféricas?

