Universidad Nacional del Litoral

Mecánica Computacional

Docentes:
Norberto Marcelo Nigro (nnigro@intec.unl.edu.ar)
Gerardo Franck (gerardofranck@yahoo.com.ar)
Diego Sklar (diegosklar@gmail.com)
Carlos Gentile (csgentile@gmail.com)

GUIA DE TRABAJOS PRACTICOS Nº 1

INTRODUCCIÓN A MODELOS DE ECUACIONES
MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Transferencia de calor

El modelo de transferencia de calor se puede considerar un caso particular de la ecuación general de transporte para una sustancia de concentración $\emptyset$ dada por:

$$\rho c_p \frac{\partial \emptyset}{\partial t} + v.\nabla\emptyset = k\Delta\emptyset - c\emptyset + G$$

con condiciones de contorno:

$$\emptyset = \overline{\emptyset}, \qquad en\ \Gamma_\emptyset \ \text{(Dirichlet)}$$
$$-k\frac{\partial \emptyset}{\partial \eta} = q, \qquad en\ \Gamma_q \ \text{(Neumann)}$$
$$-k\frac{\partial \emptyset}{\partial \eta} = h(\emptyset - \emptyset_\infty), \qquad en\ \Gamma_h \ \text{(Robin)}$$

Los términos involucrados en la ecuación se denominan:

$$\rho c_p \frac{\partial \emptyset}{\partial t} = \text{término temporal}$$
$$v.\nabla\emptyset = \text{término convectivo o de transporte}$$
$$k\Delta\emptyset = \text{término difusivo}$$
$$c\emptyset = \text{término reactivo}$$
$$G = \text{término fuente o producción}$$

y sus respectivas constantes son:

$$v[m/s] = \text{velocidad}$$
$$k[m^2/s] = \text{difusividad}$$
$$c[1/s] = \text{reacción}$$

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS 1D

El método de diferencias finitas es un método numérico para calcular soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales, tal como se describe en el punto 2.2 del apunte de la cátedra. Podemos obtener una aproximación tan buena como lo deseamos, pero a costa de un mayor trabajo computacional. El método no obtiene una fórmula analítica de la solución del problema, sino que se obtienen aproximaciones en muchos puntos del dominio donde se quiere resolver el mismo. Por lo tanto, uno de los primeros pasos cuando utilizamos este método para resolver Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) es reemplazar el dominio del problema continuo por una malla o discretización en diferencias finitas. Como en toda ecuación diferencial es probable que tengamos derivadas de diversos órdenes. La precisión de un esquema de diferencias puede depender de la forma exacta de la ecuación y del problema que se resuelve. La selección del mejor esquema estará influenciada por el aspecto del procedimiento que estamos tratando de optimizar, es decir, precisión, economía o simplicidad de programación. La idea de una representación en diferencias finitas para una derivada se puede introducir recordando la definición de derivada de la función, tal como se vio en la primera parte del Tema 6 de Cálculo Numérico, en diferenciación numérica, la aproximación en diferencias se puede plantear sobre una base más formal mediante el uso de una expansión en serie de Taylor o la fórmula de Taylor para resolver las aproximaciones a las derivadas. Es por ello que esta primera parte de la guía tiene por objetivo estimar numéricamente derivadas de diferentes órdenes, utilizando diferentes fórmulas de diferenciación y desarrollando los scripts correspondientes tanto para la aproximación de la derivada como comprobar que se verifica la cota del error teórico para esta fórmula desarrollada.

EJERCICIOS RELACIONADOS CON DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA EXPANSION EN SERIES DE TAYLOR

Ejercicio 1

Demostrar que si $u \in C^3$, entonces

$$\left| u'(x) - \frac{u\left(x+\frac{h}{2}\right) - u\left(x-\frac{h}{2}\right)}{h} \right| \leq \frac{M_3}{24} h^2,$$

donde: $M_3 = máx_{|(x-h),(x+h)|} |u'''|$, siendo $u''' = \frac{d^3u}{dx^3}$

Ejercicio 2

a) ¿Qué orden de error posee el siguiente stencil para la derivada tercera?

$$\frac{\partial^3 \emptyset}{\partial x^3} \cong -\frac{3}{h^3}\emptyset_{i+1} - \frac{1}{h^3}\emptyset_{i-1} + \frac{1}{h^3}\emptyset_{i+2} + \frac{3}{h^3}\emptyset_i$$

b) Determine los valores de las constantes asociadas a los puntos para la siguiente aproximación, considerando una malla uniforme:

$$\frac{\partial^3 \emptyset}{\partial x^3} \cong a\emptyset_{i-2} + b\emptyset_{i-1} + c\emptyset_i + d\emptyset_{i+1} + e\emptyset_{i+2}$$

c) Probar que:

$$\text{si } u(x) \in C^6\mathbb{R} \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{-u(x+2h)+16u(x+h)-30u(x)+16u(x-h)-u(x-2h)}{12h^2} + O(h^4)$$

d) Probar que:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{-u(x+2h) + 8u(x+h) - 8u(x-h) - u(x-2h)}{12h} + O(h^n)$$

¿Cuál es el valor del coeficiente “n”?

EJERCICIOS DE PROGRAMACIÓN

Difusión Estacionaria:

a) ***Método de Diferencias Finitas lineal Estacionario con condiciones de contorno Dirichlet***

Programe e implemente una función de Octave que aproxima la solución de un problema de valores de contorno del siguiente tipo (con condiciones de contorno Dirichlet) mediante el método de Diferencias Finitas lineal 1-D:

Problema de Poisson unidimensional con condiciones de borde Dirichlet

$$-K_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = Q(x), \quad \mathrm{u = u(x)}, \quad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}$$
$$u(0) = a;$$
$$u(L) = b;$$

Siendo: K_0: coeficiente de conductividad, y $Q(x)$ fuente de calor.

Nota: deduzca en papel las ecuaciones y el sistema matricial correspondiente y luego implemente un script que lo resuelva.

b) ***Método de Diferencias Finitas lineal Estacionario con condiciones de contorno Neumann y Mixtas***

Programe e implemente una función de Octave que aproxima la solución de un problema de valores de contorno del siguiente tipo (con condiciones de contorno Mixtas) mediante el método de Diferencias Finitas lineal 1-D:

$$-K_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = Q(x), \quad \mathrm{u = u(x)}, \quad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}$$
$$u(0) = a;$$
$$K_0 \frac{\partial u}{\partial x}(L) + H_1 u(L) = H_2 u_E;$$

donde: u_E: valor de la solución externa dominio.

H_1 y H_2: coeficientes de convección forzada para transferencia de calor

K_0: coeficiente de conductividad, y $Q(x)$ fuente de calor.

En esta instancia, en el extremo derecho $\mathrm{x = L}$ consideramos una condición de borde diferente que contiene tanto a la de tipo Neumann como de tipo Robin o Mixta. Notar que la condición de borde que aparece aquí sirve para resolver problemas con *flujo prescripto* y también con la *ley de enfriamiento de Newton*.

La diferencia con el modelo propuesto en el ítem a) radica en la derivada $\frac{\partial u}{\partial x}(L)$, que aparece en la condición de borde. Para no perder precisión en el método, y mantener un error de orden $O(h^2)$, se recomienda usar una diferencia centrada para la derivada, como se vio en la teoría, tanto para la derivada segunda de la ecuación diferencial como para la primera derivada de la condición de contorno.

Nota: deduzca en papel las ecuaciones y el sistema matricial correspondiente y luego implemente un script que lo resuelva.

Difusión No Estacionaria:

a) ***Método de Diferencias Finitas lineal no estacionario con condiciones de contorno Mixtas***

Programe e implemente una función de Octave que aproxima la solución de un problema de valores de contorno del siguiente tipo (con condiciones de contorno Mixtas) mediante el método de Diferencias Finitas lineal 1-D:

Problema de Poisson unidimensional con condiciones de borde Robin (Mixtas) o bien Neumann.

$$c\rho \frac{\partial u}{\partial t} - K_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = Q(x,t), \quad \mathrm{u = u(x,t)}, \quad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}, 0 \le \mathrm{t} \le \mathrm{T}$$
$$u(0,t) = a(t); \qquad 0 \le \mathrm{t} \le \mathrm{T}$$
$$K_0 \frac{\partial u}{\partial x}(L,t) + H_1 u(L,t) = H_2 u_E(t); \qquad 0 \le \mathrm{t} \le \mathrm{T}$$
$$u(x,0) = u_0(x); \qquad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}$$

Siendo: c el coeficiente de capacidad calorífica, ρ : la densidad de masa del material de dominio, K_0: coeficiente de conductividad, y $Q(x,t)$ fuente de calor, u_E: valor de la solución externa dominio.
Definimos: $k = \frac{K_0}{c\rho}$: difusividad y llamaremos $q(x,t) = \frac{Q(x,t)}{c\rho}$,
IMPLEMENTE LOS TRES ESQUEMAS TEMPORALES VISTOS: EXPLICITO, IMPLICITO Y CRANK-NICHOLSON
Nota: deduzca en papel las ecuaciones y el sistema matricial correspondiente y luego implemente un script que lo resuelva. Para resolver el problema planteamos una discretización de puntos en el espacio y en el tiempo. (x_i, t_j) *con* $x_i = (i-1)h$; $t_j = j\Delta t$, *que es el parámetro de discretización temporal.*

EJERCICIOS DE APLICACIÓN: Diferencias Finitas 1D

Ejercicio 1

Consideremos la siguiente ecuación del calor:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 100(1-x), \qquad 0 \leq x \leq 1;\ t \geq 0$$
$$u(0,t) = 0; \qquad t \geq 0$$
$$\frac{\partial u}{\partial x}(1,t) = 0; \qquad t \geq 0$$
$$u(x,0) = 5x(2-x); \qquad 0 \leq x \leq 1$$

- Determine el estado estacionario, al que denominamos $u_\infty(x)$.
- Utilizando un método numérico implícito, con N= 40 y $\lambda = 4; 20$, determine el valor de t a partir del cual se cumple que:
$$máx_{0\leq x\leq 1}|u(x,t) - u_\infty(x)| \leq 0.01,$$
- Calcule el valor de la solución estacionaria en $u(\frac{1}{2},t)$.

Nota: utilice los programas desarrollados anteriormente, tanto en forma estacionaria como no estacionaria.
EL PARAMETRO λ : Surge del planteo de ecuaciones y de la discretización del problema. Es útil para determinar el paso de tiempo.

$$\lambda = k\Delta t/h^2$$

Con: : $k = \frac{K_0}{c\rho}$

Ejercicio 2

Dada la siguiente ecuación diferencial en una dimensión que modela la transferencia de calor en una barra:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = K_0 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - cRT + G, \qquad \forall x \in [L_1, L_2]$$

Resuelva los problemas propuestos en la siguiente tabla, donde se describen los valores de las constantes del modelo y las condiciones de borde. Consideraciones a tener en cuenta:

- Compare siempre la solución obtenida con la solución analítica brindada.
- Analice los órdenes de aproximación al utilizar aproximaciones de 1^er y 2^do orden para las condiciones de borde.
- Analice los órdenes de aproximación al utilizar mallas uniformes y no uniformes.
- Implemente los tres esquemas temporales: Forward Euler, Backward Euler y Crank-Nicholson. Considerar siempre la condición inicial nula (T(x,0) =0).

	Extremos		Condiciones de borde		Constantes del modelo				
Ítem	L1	L2	L1	L2	ρc_p	K_0	cR	G	Solución analítica
a	0	1	T=10	T=50	0	2	0	100	$T(x) = -25x^2 + 65x + 10$
b	0	2	T=100	q=0	0	1	1	0	$T(x) = \frac{100e^{-x}(e^{2x} + e^4)}{1 + e^4}$
c	1	5	q=2	T=0	0	1	0	$100(x-3)^2$	$T(x) = \frac{-25x^4 + 300x^3 + ax^2 + bx + c}{3}$ a = -1350, b = 1906, c = 2345
d	0	1	T=10	h=0.2 φ_{inf}=50	0	1	1	50	$T(x) = -36.6897e^{-x} - 3.3103e^{x} + 50$
e	5	10	h=2 φ_{inf}=100	T=50	1	2	0	x^3	$T(x) = -\frac{x^5}{40} + \frac{1225x}{3} - \frac{4600}{3}$

f	0	1	T=0	h=2 φ_{inf}=10	2	2	2	75	$T(x) = -\frac{5}{4}e^{-(x+1)}(e^x - 1)(11e^x + a)$ $a = 11 - 30e$
g	0	1	T=50	q=5	1	2	-2	0	$T(x) = 73.2433\sin(x) + 50\cos(x)$

Ejercicio 3

Implementar una función [T] = difFinitas(xnode, model, cb, et) que resuelva el modelo completo de transferencia de calor donde:

- xnode es el vector de coordenadas nodales.
- model es un struct que contiene todas las constantes del modelo (**k**, **c**, **ρ**, $\boldsymbol{c_p}$ y **G**).
- cb es una matriz de dos filas y tres columnas que contiene los datos de las condiciones de borde. La primera fila indica la condición de borde del lado izquierdo y la segunda fila, la del derecho. La primera columna indica el tipo de condición de borde: 1-Dirichlet, 2-Neumann, 3-Robin. La segunda columna contiene el valor de temperatura, flujo, o coeficiente de convección h dependiendo el dato de la primera columna. La tercera columna será de valor -1 para la condición 1 y 2, y tendrá el valor de temperatura externa en caso de la condición 3.
- et es un escalar que indica el esquema temporal a utilizar (o resolver en estado estacionario).

<u>Ejercicio 4 (entregable)</u>

a) Implemente un código similar a los anteriores, pero para un problema **estacionario** de Difusión-Reacción, como el siguiente:

$$-K_0\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c_R u = Q(x), \quad \mathrm{u} = \mathrm{u(x)}, \quad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}$$
$$u(0) = a;$$
$$K_0\frac{\partial u}{\partial x}(L) + H_1 u(L) = H_2 u_E;$$

donde: u_E: valor de la solución externa dominio.

H_1 y H_2: coeficientes de convección forzada para transferencia de calor
K_0: coeficiente de conductividad, y $Q(x)$ fuente de calor, c_R: coeficiente de reacción
K_0 y c_R son constantes positivas de los procesos de difusión y reacción, respectivamente.
Exprese en forma matricial, implemente en Octave y verifique su funcionamiento con una solución exacta.

b) Modificando el programa de difusión temporal (implícita, explicita o Crank-Nicholson), para un problema **no estacionario** de Difusión, agregue el término de Reacción al mismo.

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t} - K_0\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c_R u = Q(x,t), \quad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}, 0 \le \mathrm{t} \le \mathrm{T}$$
$$u(0,t) = a(t); \qquad 0 \le \mathrm{t} \le \mathrm{T}$$
$$K_0\frac{\partial u}{\partial x}(L,t) + H_1 u(L,t) = H_2 u_E(t); \qquad 0 \le \mathrm{t} \le \mathrm{T}$$
$$u(x,0) = u_0(x); \qquad 0 \le \mathrm{x} \le \mathrm{L}$$

c) Con lo implementado en los puntos anteriores resuelva:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = Q(x,t), \qquad 0 \le \mathrm{x} \le 1;\ t \ge 0$$
$$u(0,t) = 0; \qquad t \ge 0$$
$$\frac{\partial u}{\partial x}(1,t) = 0; \qquad t \ge 0$$
$$u(x,0) = -10x^2 + 20x; \qquad 0 \le \mathrm{x} \le 1$$

Con: $Q(x,t) = \begin{cases} 100, & si\ t < 2 \\ 0, & si\ t \ge 2 \end{cases}$

Resuelva con N=40 y $\lambda = 4$

Visualice la solución entre $t = 0$ y $t = 4$. Explique con sus palabras lo que observa, interpretando a u como una temperatura.
Determine el instante de tiempo en que la temperatura en el punto medio es menor a 7.

Bibliografía consultada: Apuntes Calculo Numérico, Matemáticas Aplicadas (FIQ) y Matemáticas (UBA).
[Larsson-Thomee 2009] Larsson, S., Thomee, V., Partial Differential Equations with Numerical Methods, Springer, 2009.