

Física Computacional: Laboratorio 2

Briozzo Gaston, Escobares Cristhian Daniel

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación -
Universidad Nacional de Córdoba

28 de abril de 2021

Resumen

El objetivo de este trabajo es el estudio de la ecuación de calor y su resolución mediante la implementación de métodos numéricos. El problema a resolver consiste en una barra uniforme de aluminio de 1m de longitud aislada lateralmente, a una temperatura inicial $T_0 = 100^{\circ}\text{C}$ y con condiciones de contorno de Dirichlet nulas ($T(0, t) = T(1, t) = 0^{\circ}\text{C}$). Se emplearon los métodos forward Euler, implícito y Crank-Nicolson. Los resultados se compararon con la solución analítica para obtener los errores relativos, comparándose la eficiencia de cada método considerando también el tiempo de cpu requerido.

1. Introducción

La ecuación del calor (1) es una ecuación diferencial en derivadas parciales del tipo parabólica que describe la evolución temporal de la distribución del calor en una región del espacio ocupada por un dado cuerpo.

$$\frac{\partial T}{\partial t}(\vec{x}, t) = -\frac{K}{C\rho} \Delta T(\vec{x}, t) \quad (1)$$

Donde $T(\vec{x}, t)$ es la temperatura en la posición \vec{x} al tiempo t , K es la conductividad térmica, C el calor específico, y ρ la densidad del material.

Para el caso unidimensional se obtiene la Ecuación 2

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = -\frac{K}{C\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t) \quad (2)$$

Para resolver este tipo de ecuaciones, se propone dividir el espacio-tiempo en una grilla equiespaciada con pasos Δx y Δt respectivamente. La temperatura en cada nodo de la grilla se representa entonces como un elemento de matriz $T_{i,j}$, con $i = 0, 1, \dots, n_x$ y $j = 0, 1, \dots, n_t$, siendo n_x y n_t el número de divisiones de los intervalos espacial y temporal. De esta forma, discretizamos el problema, resultando:

$$T_{i,j} = T(x_0 + i\Delta x, t_0 + j\Delta t) \quad (3)$$

El método de forward Euler consiste en hacer un desarrollo de Fourier sobre la función temperatura y emplear la diferenciación hacia delante, obteniéndose una expresión para la evolución del sistema discretizado. Se dice que es un método explícito dado que, a partir de la solución en $T(x, t)$, este nos da la distribución de temperaturas $T(x, t + \Delta t)$ en el instante siguiente, según la Ecuación 4. Resulta sencillo de programar, pero tiene la desventaja que es estable sólo si $\eta < 0,5$, con $\eta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$.

$$T_{i,j+1} = T_{i,j} \cdot (1 - 2\eta) + \eta \cdot (T_{i+1,j} + T_{i-1,j}) \quad (4)$$

El método implícito también hace uso de las series de Fourier para resolver la evolución del sistema, solo que ahora empleamos la diferenciación hacia atrás, de modo que partiendo de la solución $T(x, t + \Delta t)$ obtenemos una expresión para $T(x, t)$. Por este motivo, se lo denomina implícito. Éste nos arroja un sistema de ecuaciones en el cual la solución en $T_{i,j-1}$ está relacionada con la solución en $T_{i,j}$, según la Ecuación 5:

$$T_{i,j-1} = T_{i,j} \cdot (1 + 2\eta) - \eta \cdot (T_{i+1,j} + T_{i-1,j}) \quad (5)$$

Como conocemos la condición inicial y queremos calcular la evolución del sistema, es necesario resolver el sistema de ecuaciones. Para ello se utiliza el algoritmo de Thomas, el cual sirve para resolver una matriz tridiagonal que se corresponde a un sistema de ecuaciones de la forma:

$$a_i x_{i-1} + d_i x_i + c_i x_{i+1} = b_i \quad (6)$$

La principal ventaja de éste método respecto al de forward Euler, es que es estable para cualquier valor de η .

Por último, el método de Crank-Nicolson emplea la diferenciación centrada en la variable temporal, de forma que arroja un sistema de ecuaciones en el cual tanto los $T_{i,j-1}$ como los $T_{i,j}$ están relacionados entre sí, mediante la Ecuación 7.

$$\begin{aligned} -T_{i-1,j+1} + \left(\frac{2}{\eta} + 2 \right) T_{i,j+1} - T_{i+1,j+1} = \\ = T_{i-1,j} + \left(\frac{2}{\eta} - 2 \right) T_{i,j} + T_{i+1,j} \end{aligned} \quad (7)$$

La cual se resuelve mediante el algoritmo de Thomas sólo que ahora el término b_i no es tan directo como lo era en el método implícito $b_i = T_{i,j-1}$, sino que ahora $b_i = T_{i-1,j} + \left(\frac{2}{\eta} - 2 \right) T_{i,j} + T_{i+1,j}$. Este método es más preciso que el implícito, y también es estable para cualquier valor de η .

2. Resultados y Discusión

2.1. Ecuación Adimensional

Siempre que se pueda, es recomendable adimensionalizar las ecuaciones con las que se esté trabajando. De esta forma, no dependemos de las condiciones particulares del caso que estemos estudiando, sino que construimos una solución general, reescalable luego a cualquier conjunto de parámetros.

Comencemos por eliminar el mayor número de constantes posible:

$$D = \frac{K}{C\rho} \quad (8)$$

2.2 Análisis del tamaño de los archivos

Ahora, adimensionalizamos las variables, redefiniéndolas como sigue:

$$\hat{t} = \frac{D}{L^2} t ; \quad \hat{x} = \frac{x}{L} \quad (9)$$

De aquí, resulta la ecuación de calor adimensional:

$$\frac{\partial T}{\partial \hat{t}}(\hat{x}, \hat{t}) = -\frac{\partial^2 T(\hat{x}, \hat{t})}{\partial \hat{x}^2} \quad (10)$$

2.2. Análisis del tamaño de los archivos

Al escribir los datos en un archivo txt, cada símbolo ocupa un byte, inclusive los espacios y puntos. Por lo que es recomendable guardarlos en notación científica. Así cada número tiene al menos 6 bytes ocupados, el signo del número, el signo del punto decimal, la letra E que indica el exponente, el signo del exponente, y dos cifras del exponente.

El resto de los bits corresponden a las cifras que le coloquemos al número. Por lo que, para un número con a cifras, este ocupará $a + 6$ bytes en el archivo, y si se le agrega un espacio entre cada número, cada número ocupará $a + 7$ bytes en memoria.

Si ahora se supone que el peso del archivo está mayormente dado por los bytes de los números, se puede estimar fácilmente el peso del archivo teniendo en cuenta el número total de datos a guardar. Por ejemplo, uno de los archivos que guardamos tenía 5152 columnas con 3 números por columna, lo que hace un total de 15456 números con 16 cifras.

Estos ocuparían $15456(16 + 7) = 355488$ bytes según la estimación, mientras que el archivo real ocupa 360607 bytes. Por lo que se concluye que es una buena estimación rápida, ya que no se tuvo en cuenta el byte que representa al salto de línea ni a la primera línea en la cual está comentado el título de cada columna.

2.3. Resultado Numérico

Tomando un paso espacial $d\hat{x} = 0,01$ y un paso temporal $d\hat{t} = 0,3s \frac{D}{L^2}$, se emplearon los tres métodos mencionados para obtener la evolución temporal de la distribución de temperaturas en la barra, hasta 4500s después del instante inicial. Además, se calculó para los mismos conjuntos de coordenadas espaciotemporales la solución analítica. Los resultados se graficaron cada 300 pasos temporales, obteniéndose las Figuras 1 a 4.

Podemos notar que las soluciones numéricas resultan prácticamente indistinguibles entre sí a simple vista, además de ajustarse en gran medida a la solución analítica. De igual forma, los tiempos de cpu requeridos son similares, resultando en $8,324 \cdot 10^{-3}s$ para el método forward Euler, $1,6062 \cdot 10^{-2}s$ para el método implícito y $2,0349 \cdot 10^{-2}s$ para el método de Crank-Nicolson.

Al mismo tiempo, puede observarse en la Figura 2 que, debido a la discontinuidad en la temperatura en el instante inicial, hace presencia en la solución analítica el fenómeno de Gibbs.

Respecto a la complejidad de los métodos, forward Euler es el mas simple de todos, requiriendo únicamente multiplicar el vector de temperatura por una matriz tri-diagonal al avanzar cada paso temporal. Lo sigue el método implícito, que requiere de

2.3 Resultado Numérico

invertir una matriz tridiagonal, para luego multiplicarla por el vector temperatura en cada paso temporal.

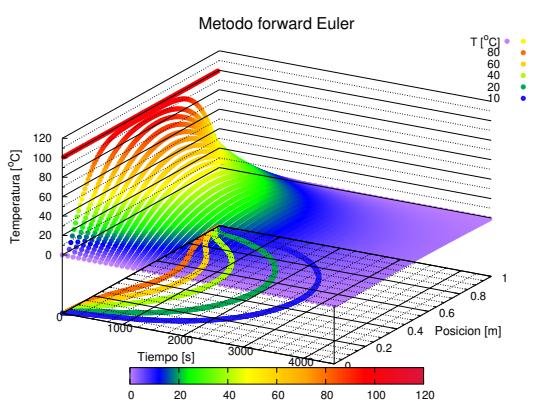


Figura 1: Forward Euler. Idéntico a los resultados presentados por los métodos implícito y Crank-Nicolson

los códigos adjuntos, la diferencia de complejidad resulta ínfima para este problema.

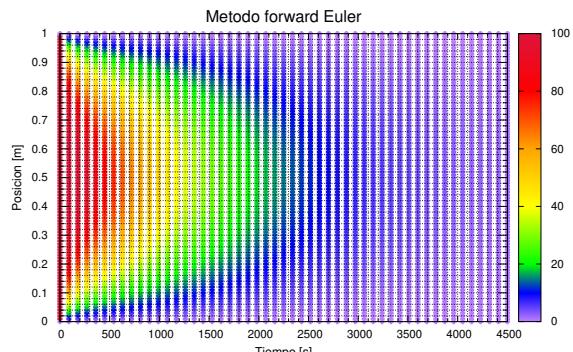


Figura 3: Forward Euler. Idéntico a los resultados presentados por los métodos implícito y Crank-Nicolson

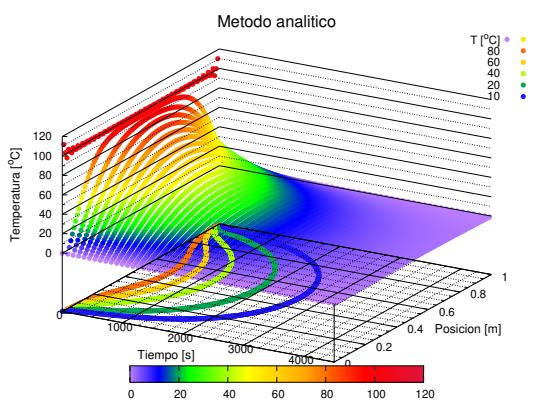


Figura 2: Analítico.

Finalmente, el método mas complicado es el de Crank-Nicolson, que requiere multiplicar el vector temperatura por una matriz tridiagonal para luego multiplicar el resultado por otra matriz tridiagonal invertida. Sin embargo, como puede comprobarse en

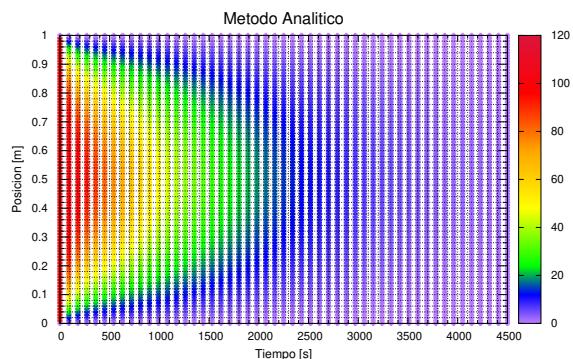


Figura 4: Analítico.

Para verificar la suavidad de las soluciones, se presentará el mapa de calor con 1000 pasos espaciales y graficado cada 30 pasos temporales, Figuras 5 y 6

Se ve que tienen un gradiente suave de color, lo que significa que la derivada en cualquier dirección espacio-temporal es suave, por lo que, tanto la derivada espacial a

2.4 Error General

tiempo fijo, como la derivada temporal a espacio fijo son suaves.

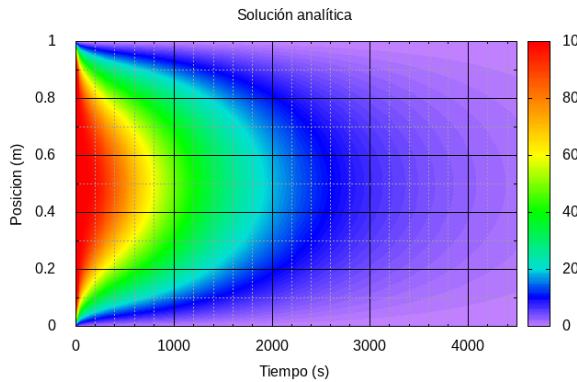


Figura 5: Analítico

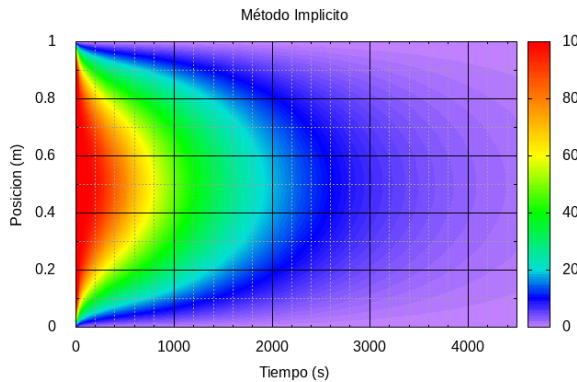


Figura 6: Método Implícito. Visualmente es idéntico al del resto de los métodos, por lo que sólo se coloca este como referencia

2.4. Error General

Se calculó el error absoluto y el error relativo cometido por cada método en función de la posición y el tiempo, tomando el resultado analítico a orden 129 como la solución

exacta. Esto se justifica dado que para el primer tiempo de interés, $t = 300dt$, el error relativo cometido por el método analítico ya es menor a 10^{-100} , mucho menor al error de la máquina. Dado que se realizan 65 pasos en la sumatoria analítica, el error de redondeo es del orden de $\epsilon_m \sqrt{65} \sim O(10^{-15})$. Como las diferencias absolutas entre los métodos y la solución analítica es mucho mayor que 10^{-15} , el error en el cálculo de la solución analítica es despreciable y puede tomarse como exacta. Los resultados obtenidos se muestran en las Figuras 7 y 12.

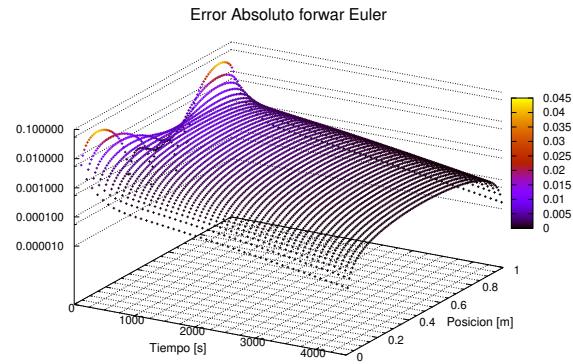


Figura 7: Error Absoluto forward Euler.

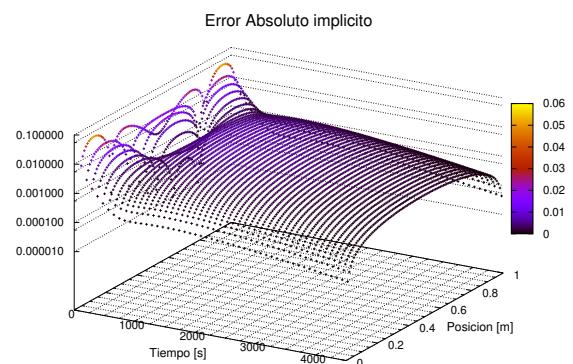


Figura 8: Error Absoluto implícito.

2.4 Error General

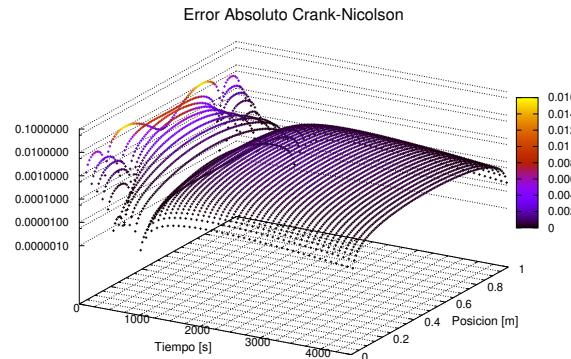


Figura 9: Error Absoluto Crank-Nicolson.

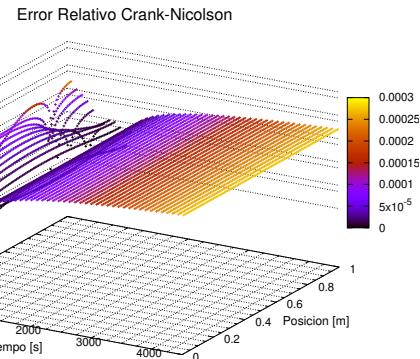


Figura 12: Error Relativo Crank-Nicolson.

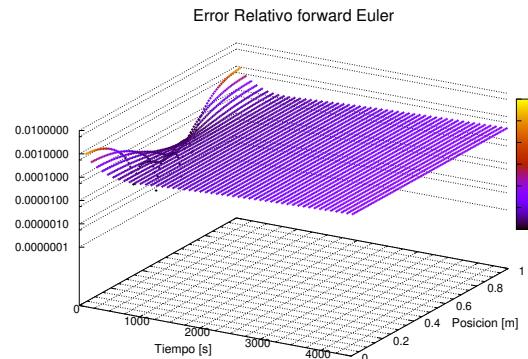


Figura 10: Error Relativo forward Euler.

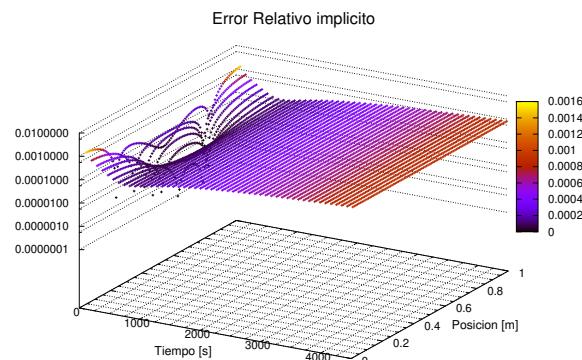


Figura 11: Error Relativo implícito.

Podemos notar que existe un tiempo, entre los 1000 y 2000 segundos, comparable al tiempo característico del sistema, donde el error de cada métodos se hace mínimo. Para tiempos inferiores, el error decae con un perfil que pone en evidencia las autofunciones armónicas del problema. Para tiempos superiores, el error relativo parece crecer exponencialmente, de la misma forma para los tres métodos. Esto no debería significar un problema, ya que como es la temperatura la que va a cero a tiempos grandes, cualquier mínimo error absoluto puede diverge. De hecho, si observamos el comportamiento del error absoluto, vemos que este continua decreciendo exponencialmente a tiempos grandes.

Puede verse que, en los extremos de la barra, el error absoluto es menor que el en resto de las posiciones para todo tiempo. Este es un efecto de las condiciones de contorno, ya que si observamos el gráfico del error relativo, vemos que no existe tal diferencia entre los errores en los extremos o en el medio de la barra. Finalmente, podemos suponer que la homogeneidad del error para tiempos grandes es un indicio de la estabi-

2.5 Error Particular

lidad numérica de los métodos empleados.

2.5. Error Particular

Se calcularon el error absoluto y relativo cometido por cada método en los instantes $t_1 = 180s$ y $t_2 = 1800s$. Para esto, se emplearon pasos espaciales $d\hat{x} = 0,01$ y pasos temporales $dt = 0,3s$, igual que en el inciso anterior. Los resultados obtenidos para t_1 se expresan en las Figuras 13 y 14, mientras que los correspondientes a t_2 se muestran en las Figuras 15 y 16.

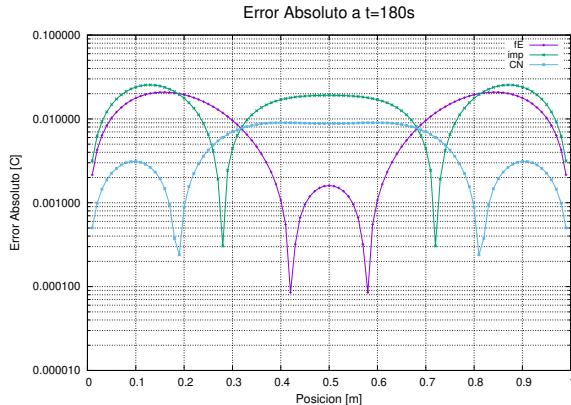


Figura 13: Error Absoluto a $t = 180s$.

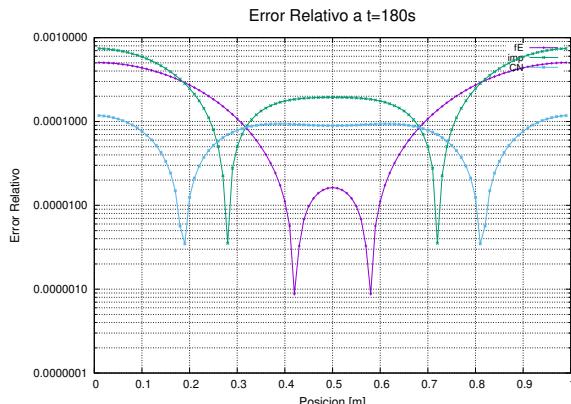


Figura 14: Error Relativo a $t = 180s$.

Vemos que a t_1 el sistema no ha evolucionado lo suficiente como para presentar un perfil de errores homogéneo, sino que depende tanto del método como de la posición. De hecho, estos perfiles sugieren cierta relación con las componentes de un desarrollo de Fourier. Esto podría deberse a que t_1 es demasiado chico en comparación al tiempo característico del sistema, por lo que pone en evidencia el desarrollo empleado para resolver el problema analíticamente.

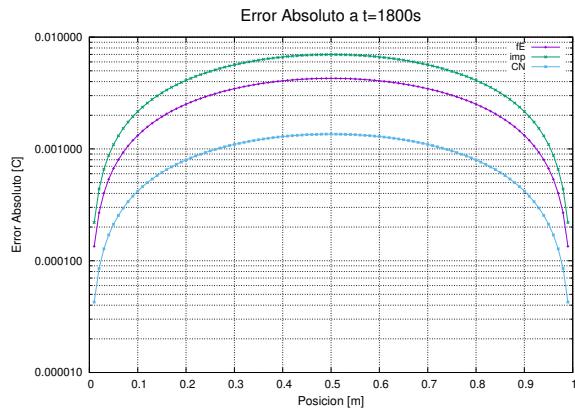


Figura 15: Error Absoluto a $t = 1800s$.

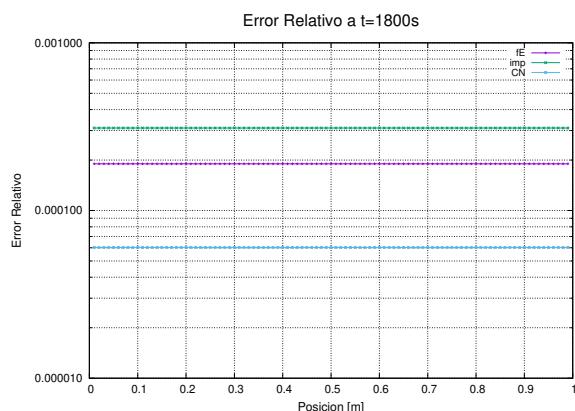


Figura 16: Error Relativo a $t = 1800s$.

Por su parte, a t_2 los perfiles de error

2.6 Error Global

son mucho mas homogéneos, sugiriendo que el sistema ya ha superado su tiempo característico. Nótese que el error relativo de los tres métodos es prácticamente una recta. Para este instante, como cabe esperarse, el método de Crank-Nicolson resulta ser el mas preciso. Sin embargo, el método forward Euler muestra también una gran precisión, superando al método implícito, mas complejo y estable. Esto puede ser una simple casualidad producto de los parámetros empleados en en problema, sin significar necesariamente la superioridad del método forward Euler sobre el implícito. Para llegar a alguna conclusión al respecto, debería estudiarse mas a fondo la relación entre el error de cada algoritmo y los parámetros empleados, considerando también el tiempo de cpu requerido.

2.6. Error Global

A un dado instante de tiempo, definiremos el error global como la suma de los errores relativos cometidos en cada nodo espacial, dividido por el número de estos nodos. Variando el número de divisiones de los intervalos temporal nt y espacial nx , se calculó el error global de cada método en el instante $t_2 = 1800s$, obteniéndose las Figuras 17 a 22.

Podemos comprobar que los errores globales de los tres métodos presentan comportamientos claramente diferentes. En primer lugar, el método forward Euler presenta una estructura de "quebrada" donde existe claramente una relación entre nx y nt para optimizar el error. Para los valores correspondientes a esta curva, el error decrece extremadamente rápido y parecería ir a cero. Al mismo tiempo, vemos que para valores

bajos de nt el error diverge, debido a que se viola la condición de estabilidad $\eta < 0,5$. Esto podría ser un indicio de la inestabilidad del método.

Error Global en forward Euler

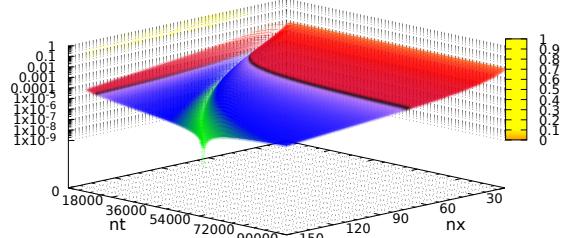


Figura 17: Error Global de forward Euler a $t = 1800s$. Errores entre 1 y 0,1 en amarillo, 0,1 y 0,01 en naranja, 0,01 y 0,001 en rojo, 0,001 y 0,00011 en carmesí, 0,00011 y 0,00009 en negro, 0,00009 y 10^{-5} en púrpura, 10^{-5} y 10^{-6} en azul y menores a 10^{-6} en verde.

Error Global en forward Euler

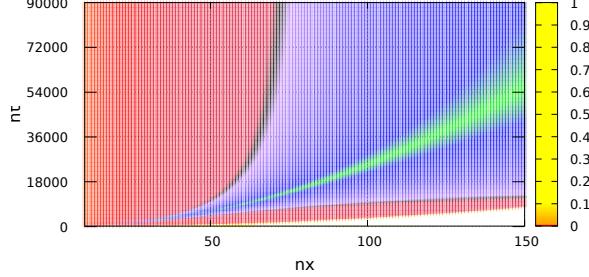


Figura 18: Error Global de forward Euler a $t = 1800s$. Errores entre 1 y 0,1 en amarillo, 0,1 y 0,01 en naranja, 0,01 y 0,001 en rojo, 0,001 y 0,00011 en carmesí, 0,00011 y 0,00009 en negro, 0,00009 y 10^{-5} en púrpura, 10^{-5} y 10^{-6} en azul y menores a 10^{-6} en verde.

2.7 Régimen Óptimo

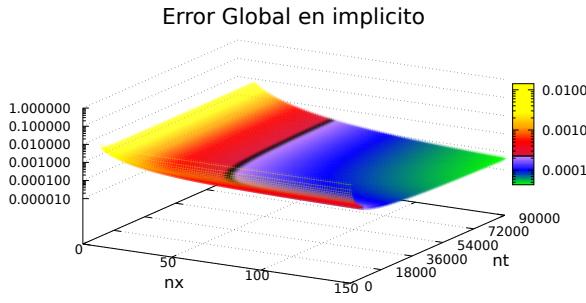


Figura 19: Error Global de implícito a $t = 1800s$.

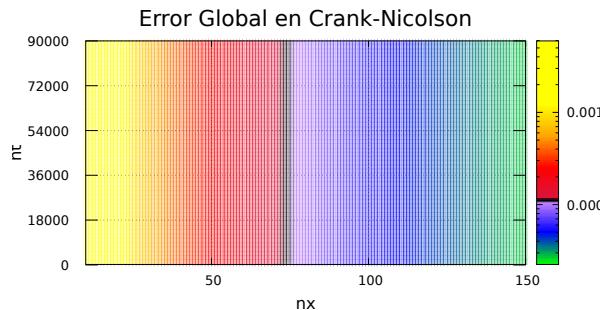


Figura 22: Error Global de Crank-Nicolson a $t = 1800s$.

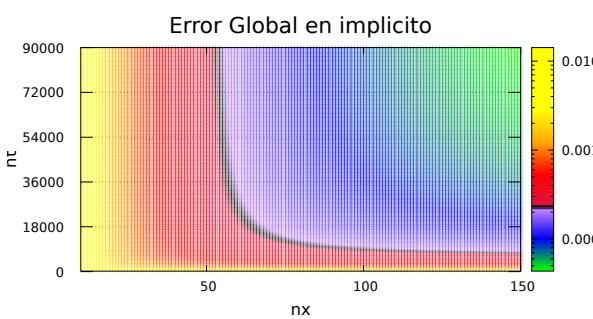


Figura 20: Error Global de implícito a $t = 1800s$.

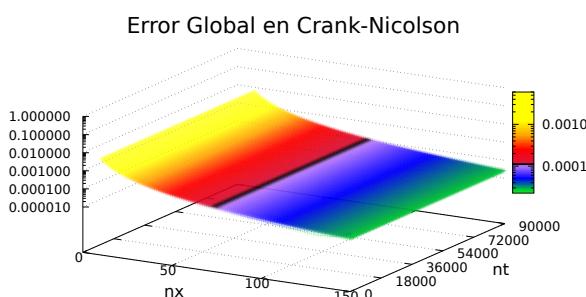


Figura 21: Error Global de Crank-Nicolson a $t = 1800s$.

Por otro lado, las curvas de nivel en el método implícito adoptan formas hiperbólicas, de modo que la precisión aumenta como el producto $nx \cdot nt$. De esta forma, no existe una relación entre nx y nt que optimice el error, sino que este irá disminuyendo conforme se aumente el número de divisiones de los intervalos. Esto podría estar relacionado con la estabilidad del método.

A su vez, el error global del método Crank-Nicolson presenta una estructura de plano inclinado, pareciendo no depender del número de divisiones del intervalo temporal nt , si bien en el límite en que nt tiende a cero ($nt < 10$) el error global presenta una dependencia con este. De esta forma, parecería existir alguna ley de potencias que relacione el error global con dx para valores grandes de nx . Nuevamente, la suavidad de la superficie resultante parece estar vinculada con la estabilidad del método.

Finalmente, señalamos que en los tres casos el error es claramente determinista.

2.7. Régimen Óptimo

A partir de los datos obtenidos en la realización de los gráficos de la sección ante-

rior, se buscaron los regímenes óptimos de funcionamiento de cada método; esto es, los valores nx y nt para los cuales, obteniendo un error global relativo menor a 10^{-4} en $t_2 = 1800s$, se minimice el tiempo de cpu requerido para cada método. Los resultados se expresan en el cuadro 1.

	Explícito	Implícito	C-N
nx	15	129	73
nt	360	23580	180
EG	$3,84 \cdot 10^{-6}$	$9,99 \cdot 10^{-5}$	$9,97 \cdot 10^{-5}$
$t [s]$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$3,27 \cdot 10^{-2}$	$1,87 \cdot 10^{-4}$

Cuadro 1: Régimen óptimo.

A partir de estos, notamos que el método forward Euler resulta ser el mas eficiente para este problema en particular, alcanzando la mayor precisión en el menor tiempo requerido. Sin embargo, dada su inestabilidad, sospechamos que esto no se repetirá para otros problemas, y desaconsejamos la implementación de dicho método. Por su parte, el método implícito presenta los errores mas altos y requiere de mayor tiempo de cpu, por lo que, a pesar de su estabilidad, tampoco es recomendable emplearlo. Finalmente, el método Crank-Nicolson no obtiene un error global tan impresionante como el forward Euler, pero su tiempo de cpu es considerable, y dada la estabilidad del método, se recomienda emplearlo para tratar con este tipo de problemas.

3. Conclusiones

Comprobamos que adimensionalizar el problema estudiado facilita la implementación de métodos numéricos para su resolu-

ción al dejar de lado todas las constantes y parámetros que particularizan la solución, permitiéndonos obtener una solución que es fácilmente re-escalable a otro conjunto de parámetros y constantes, sin tener que realizar nuevamente el cálculo.

Los tres métodos estudiados presentaron distribuciones de temperatura que varían suavemente a lo largo del espacio y el tiempo, respetando las condiciones de contorno y alcanzando el equilibrio térmico de manera asintótica para tiempos grandes. Para el problema estudiado, ninguno de los métodos presenta grandes diferencias en cuanto a complejidad, resultados o tiempo computacional requerido, llegando a ser sus resultados prácticamente indistinguibles a simple vista. Sin embargo, el método de Crank-Nicolson resultó tener un error relativo al exacto levemente menor al resto, pero esta diferencia no llega a un orden de magnitud.

El análisis de la solución analítica reveló que, para los tiempos de interés, resulta prácticamente indistinguible de la solución exacta a simple vista. La única excepción se da en el instante inicial, donde debido a la discontinuidad en la distribución de la temperatura, la solución analítica se ve afectada por el fenómeno de Gibbs. Esto nos permitió emplearla para estudiar los errores cometidos por cada método en función de los parámetros iniciales.

A partir de estos, se logró encontrar el régimen óptimo de funcionamiento de cada método. Para este problema en particular, el problema mas eficiente resultó ser el forward Euler. Sin embargo, dada su inestabilidad, no se recomienda emplearlo. Considerando esto, el mejor método resulta ser el Crank-Nicolson, que posee tanto estabilidad, precisión y bajo tiempo de cpu.