Diferències finites per a equacions d'evolució

Víctor Ballester Ribó
NIU: 1570866

Integració numèrica d'equacions en derivades parcials
Grau en Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona
Juny de 2023

L'objectiu d'aquesta pràctica és resoldre el problema mixt següent per a l'equació de la calor en una placa rectangular:

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = f & \text{a } [0,T] \times \Omega \\ u = g & \text{a } [0,T] \times \partial\Omega \\ u = h & \text{a } \{0\} \times \Omega \end{cases} \tag{1}$$

on Ω és la regió rectangular de la placa, que en el nostre cas serà $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, i T és el temps final de la simulació.
Donades funcions $f(t,x,y)$, $g(t,x,y)$ i $h(x,y)$ resoldrem aquest problema usant diferències finites. Discretitzem primer l'espai i el temps. Considerem dues particions de l'interval $[0,1]$ en n_x+1 i n_y+1 subintervals equidistants amb separacions $\delta_x = 1/n_x$ i $\delta_y = 1/n_y$ respectivament. A més discretitzem l'interval temporal $[0,T]$ en n_t+1 subintervals equidistants amb separació $\delta_t = T/n_t$. D'ara endavant, denotarem la solució $u(k\delta_t, i\delta_x, j\delta_y)$ per $u_{k,i,j}$ i les seves respectives aproximacions per diferències finites per $v_{k,i,j}$.
Considerem primer el següent mètode explícit, que s'obté de prendre diferències centrades de segon ordre per l'espai i de primer ordre endavant per al temps:

$$v_{k+1,i,j} = (1 - 2\mu_x - 2\mu_y)v_{k,i,j} + \mu_x(v_{k,i+1,j} + v_{k,i-1,j}) + \mu_y(v_{k,i,j+1} + v_{k,i,j-1}) + \delta_t f_{k,i,j}$$

on $\mu_x = \delta_t/{\delta_x}^2$ i $\mu_y = \delta_t/{\delta_y}^2$ i $f_{k,i,j} = f(k\delta_t, i\delta_x, j\delta_y)$. Aquest mètode és consistent i estable si $1 - 2\mu_x - 2\mu_y \geq 0$. A més, l'error de convergència és $\mathrm{O}\left(\delta_t + \delta_x^2 + \delta_y^2\right)$.
Fixem-nos que aquest mètode és exacte per a polinomis de grau ≤ 1 en t i grau ≤ 3 en l'espai. Això es deu a l'expansió en sèrie de Taylor de u: d'una banda el coeficient que multiplica l'error $\mathrm{O}(\delta_t)$ de la diferència finita pel temps de primer ordre involucra $u_{tt} = 0$ i anàlogament amb les derivades centrades per l'espai. Això ho podem comprovar també numèricament. Considerem el polinomi

$$u(t,x,y) = 1 + t + x^2 + y^2 + x^3$$

Prenent $f(t,x,y) = -3 - 6x$, $g(t,x,y) = 1 + t + x^2 + y^2 + x^3$ i $h(x,y) = 1 + x^2 + y^2 + x^3$ tenim que la solució del problema (1) és precisament $u(t,x,y)$. Així doncs, si prenem per exemple $\delta_x = 0.1$, $\delta_y = 0.1$ i $\delta_t = 0.001$, que compleixen la condició d'estabilitat, per a $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ i $T = 0.1$ obtenim un error en norma $\|\cdot\|_\infty$ entre la solució real i l'aproximada de $5.77316 \cdot 10^{-15}$, que es pot considerar com a error d'aritmètica en punt flotant.

Considerem ara una placa d'acer de densitat $\rho = 7.8\ \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$, conductivitat tèrmica $\kappa = 0.13\ \frac{\text{cal}}{\text{cm}\cdot\text{s}\cdot\text{K}}$ i calor específic $c = 0.11\ \frac{\text{cal}}{\text{g}\cdot\text{K}}$. Posem una font de calor a sota de la placa que genera $F(\tau,x,y)\ \frac{\text{cal}}{\text{s}\cdot\text{cm}^3}$ a l'instant τ i al punt (x,y), on F està definida per:

$$F(\tau,x,y) = \begin{cases} 100 & \text{si } \left\|(x,y) - (\frac{1}{2},\frac{1}{2})\right\|_2 < \frac{1}{5} \\ 0 & \text{altrament} \end{cases}$$

Suposem també que en l'instant $\tau = 0$, la placa està a temperatura 0 °C i per a tot temps τ la frontera de la placa es manté també a 0 °C. En aquestes condicions, l'evolució de la temperatura sobre la placa ve donada per la solució per la solució del següent problema mixt:

$$\begin{cases} c\rho v_\tau - \kappa\Delta v = F(\tau,x,y) & \text{a } [0,T] \times \Omega \\ v = 0 & \text{a } [0,T] \times \partial\Omega \\ v = 0 & \text{a } \{0\} \times \Omega \end{cases}$$

Usant el canvi de variables $t = \frac{\kappa}{c\rho}\tau$, tenim que $\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} = \frac{\kappa}{c\rho}$ i per tant si $u(t,x,y) = v(\tau,x,y)$, usant la regla de la cadena, $u_t = v_\tau \frac{\kappa}{c\rho}$ (i clarament $\Delta u = \Delta v$). Així doncs, el problema anterior es pot reescriure com:

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = \dfrac{1}{\kappa} F\left(\dfrac{c\rho}{\kappa}t, x, y\right) & \text{a } \left[0, \dfrac{\kappa}{c\rho}T\right] \times \Omega \\ u = 0 & \text{a } \left[0, \dfrac{\kappa}{c\rho}T\right] \times \partial\Omega \\ u = 0 & \text{a } \{0\} \times \Omega \end{cases}$$

La condició d'estabilitat en l'esquema explícit que hem descrit anteriorment és necessària. Fem un experiment numèric per veure què podem obtenir si no se satisfà aquesta condició. Per fer-ho prenem $\delta_x = \delta_y = \delta_t = 0.1$ i $T = 1$. Amb aquests paràmetres obtenim que en $\tau = 0.9$ i la temperatura en la regió de la placa amb $x = 0.3$ és: Observem valors molt grossos i negatius, que no tenen sentit físic, ja que estan fora de l'interval $[0, 100]$. El

x	y	$v(0.9, x, y)$
0.3	0.0	0
0.3	0.1	42286728.810146
0.3	0.2	−111988126.131011
0.3	0.3	199241046.679864
0.3	0.4	−259680534.657868
0.3	0.5	263234236.257432
0.3	0.6	−210322365.754957
0.3	0.7	126199592.465624
0.3	0.8	−54636211.331768
0.3	0.9	16318289.975168
0.3	1.0	0

problema d'aquest mètode explícit és que requereix d'un cost elevat computacionalment quan volem els resultats amb una precisió raonable. Per exemple, si volem que $\mathrm{O}\left(\delta_t + {\delta_x}^2 + {\delta_y}^2\right) = \mathrm{O}\left(10^{-4}\right)$ aleshores podem prendre $\delta_x = \delta_y = 0.01$ i $\delta_t = 10^{-5}$. D'aquesta manera, $1 - 2\mu_x - 2\mu_y = 0.6 > 0$ i per tant el mètode és estable. Ara bé, per arribar fins a $\tau = 1$ necessitem emprar molt de temps. A la taula següent mostrem el temps que triga el programa a calcular els valors de la temperatura en els punts de la placa fins a diferents temps finals: Aproximadament cada temps em multiplica per 10 respecte al temps anterior. Per tant, calculem que trigaríem

T	Temps emprat [s]
0.0001	0.047858
0.001	0.569544
0.01	5.613888
0.1	57.489433

Taula 1: Temps que triga l'esquema explícit en calcular i escriure a un fitxer tots els valors en cada graella (usant $\delta_x = \delta_y = 0.01$ i $\delta_t = 10^{-5}$) fins a diferents temps finals.

de l'ordre de 5 min per calcular els valors de la temperatura fins a $\tau = 1$.

Una solució alternativa és emprar un mètode implícit, com ara el de Crank-Nicolson:

$$\begin{aligned} \frac{v_{k+1,i,j} - v_{k,i,j}}{\delta_t} &- \frac{1}{2}\left(\frac{v_{k+1,i+1,j} - 2v_{k+1,i,j} + v_{k+1,i-1,j}}{{\delta_x}^2} + \frac{v_{k,i+1,j} - 2v_{k,i,j} + v_{k,i-1,j}}{{\delta_x}^2}\right) - \\ &- \frac{1}{2}\left(\frac{v_{k+1,i,j+1} - 2v_{k+1,i,j} + v_{k+1,i,j-1}}{{\delta_y}^2} + \frac{v_{k,i,j+1} - 2v_{k,i,j} + v_{k,i,j-1}}{{\delta_y}^2}\right) = \frac{1}{2}\left(f_{k+1,i,j} + f_{k,i,j}\right) \end{aligned}$$

on hem usat la notació de (1). Per resoldre aquest sistema, hem de resoldre un sistema lineal en les incògnites $\{v_{k+1,i,j}\}_{i,j}$, i usarem el mètode SOR per a fer-ho.
Ara, però, a diferència del que teníem amb el mètode explícit, l'esquema de diferències finites no serà exacte quan l'apliquem a polinomis. En efecte, prenent els mateixos valors que anteriorment ($\delta_x = \delta_y = 0.1$, $\delta_t = 0.001$ i $T = 1$), obtenim un error en norma $\|\cdot\|_\infty$ de 9.17816×10^{-5}, que està lluny de ser considerat com a errors de punt flotant.
Tot i això, aquest mètode ens permet obtenir una precisió molt més elevada en un temps raonable ja que no tenim cap condició d'estabilitat a satisfer-se i a més l'ordre de convergència és $\mathrm{O}\left({\delta_t}^2 + {\delta_x}^2 + {\delta_y}^2\right)$. A la taula següent mostrem el temps que triga el programa a calcular els valors de la temperatura en els punts de la placa fins a diferents temps finals: Finalment, donant aquest esquema com a bo, els resultats que obtenim en integrar l'equació de la calor sobre la placa d'acer es mostren a les següents imatges:

T	Temps emprat [s]
0.01	0.111025
0.1	1.057527
1	9.849696

Taula 2: Temps que triga l'esquema explícit en calcular i escriure a un fitxer tots els valors en cada graella (usant $\delta_x = \delta_y = 0.01$ i $\delta_t = 0.001$) fins a diferents temps finals.

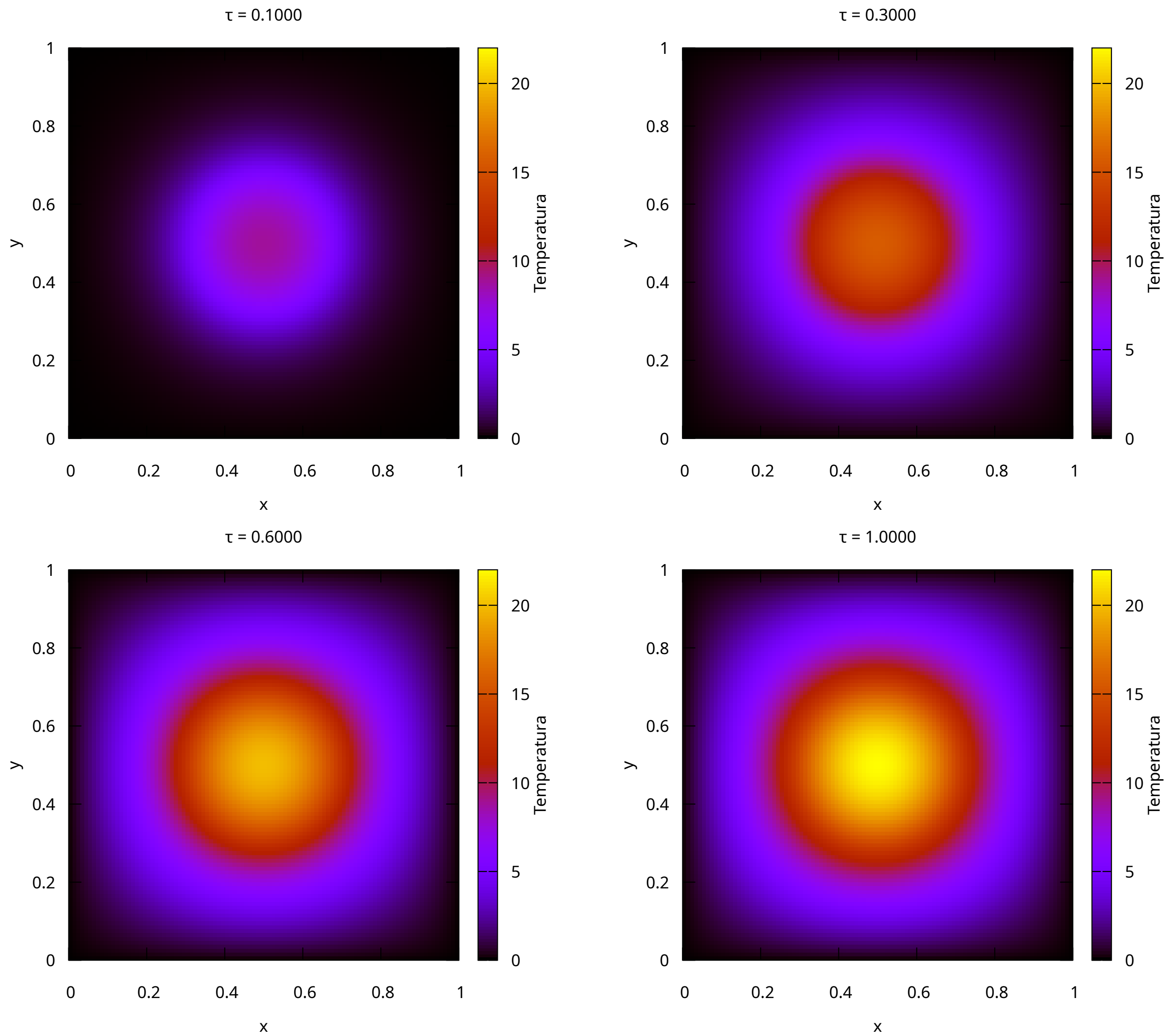

Figura 1: Temperatura a la placa d'acer en els temps $\tau = 0.1, 0.3, 0.6, 1$.

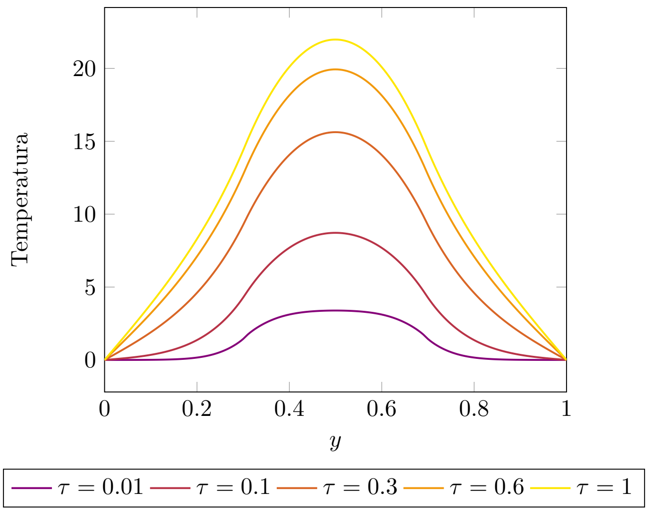

Figura 2: Evolució de la temperatura a la secció $x = 0.5$ de la placa.