Francisco R. Villatoro y Carmen M. García 13 de Octubre de 2000

Métodos en Diferencias Finitas para Ecuaciones de Difusión (Parabólicas).

1. Para estudiar el problema de la conducción de calor en un medio es necesario tener un modelo macroscópico de los fenómenos microscópicos que intervienen en dicho fenómeno. A este modelo se le denomina ley constitutiva del material y nosotros necesitamos una que relacione el flujo de calor con la temperatura teniendo en cuenta las propiedades térmicas del medio.

   La ley constitutiva más simple es una expresión lineal, la ley de Fourier para la conducción del calor
$$q_i = -k\rho C \frac{\partial T}{\partial x_i},$$
   donde q_i es el flujo de calor en la dirección x_i (cal/(cm$^2 \cdot$ s)), k es el coeficiente de difusividad térmica (cm^2/s), ρ es la densidad del material (g/cm^3), C es su capacidad calorífica (cal/(g$\cdot$°C) y T es la temperatura (°C), definida como
$$T = \frac{H}{\rho C V},$$
   donde H es el calor (cal), y V es el volumen (cm^3). Se denomina coeficiente de conductividad térmica al coeficiente global de la ley de Fourier, $\kappa = k\rho C$ (cal(s $\cdot$ cm $\cdot$ °C)).

   Consideremos una barra delgada aislada térmicamente en todos sus puntos excepto en los extremos colocada en la dirección del eje x. Escojamos un elemento diferencial Δx de dicha barra y consideremos el balance de calor en dicho elemento durante un intervalo de tiempo Δt, la diferencia entre el flujo de calor entrante y el saliente es igual al calor almacenado, es decir,
$$q(x)\Delta y \Delta z \Delta t - q(x+\Delta x)\Delta y \Delta z \Delta t = \Delta x \Delta y \Delta z \rho C \Delta T.$$
   Dividiendo por el elemento de hiper-volumen $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$ y aplicando límites, obtenemos
$$-\frac{\partial q}{\partial x} = \rho C \frac{\partial T}{\partial t},$$

que sustituyendo la ley de Fourier nos da la ecuación de conducción del calor unidimensional

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

Para que este problema esté bien definido es necesario añadir condiciones iniciales $T(x,0) = T_i(x)$, $\forall x \in (0,L)$, y de contorno que pueden ser de Dirichlet,

$$T(0,t) = T_0(t), \quad T(L,t) = T_L(t), \qquad \forall t > 0,$$

o de Neumann,

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0,t) = T_0(t), \quad \frac{\partial T}{\partial x}(L,t) = T_L(t), \qquad \forall t > 0.$$

Considere una barra de aluminio con $L = 10$cm, para la que $C = 0{,}2174$cal/(g · ºC), $\rho = 2{,}7$g/cm^3 y $\kappa = 0{,}49$cal/(s · cm · ºC).

a) Para resolver este problema aplicaremos un método numérico en diferencias finitas explícito de segundo orden en espacio y primer orden en tiempo (método de Euler hacia adelante). Demuestre que se obtiene

$$T_j^{n+1} = T_j^n + r(T_{j+1}^n - 2T_j^n + T_{j-1}^n), \qquad r = k\Delta t/(\Delta x)^2,$$

donde para la malla $t_n = n\Delta t$ y $x_j = j\Delta x$. Como condiciones iniciales y de contorno (Dirichlet) tome $T_i = 0$, $T_0 = 100$ºC y $T_L = 50$ºC. ¿Cómo trata númericamente dichas condiciones? Escriba un programa en Matlab que implemente dicho método numérico. ¿Bajo qué condiciones converge el método? Para $r \in (1/4, 1/2)$ los errores de la solución numérica oscilan, ¿por qué? Ilustre su respuesta con alguna simulación. Para $r = 1/6$ los errores de truncado son mínimos, ¿por qué? Dibuje la solución que obtiene para $r = 0{,}75$, $r = 0{,}3$ y $r = 0{,}2$ tras 1, 10 y 100 pasos de tiempo. ¿Qué malla ha escogido para x? ¿Por qué? ¿Cúal es la solución numérica cuando $t \to \infty$? ¿Cuál es la solución exacta en dicho caso?

b) Repita el problema anterior pero con condición inicial $T_i = 100^{\circ}$C y condiciones de Neumann en los extremos

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0,t) = 1, \quad \frac{\partial T}{\partial x}(L,t) = 0, \qquad \forall t > 0.$$

Trate estas condiciones de contorno a primer orden de consistencia en espacio. ¿Cuál es la condición de estabilidad del método numérico resultante? ¿Cuál es el orden global del método? Determine el orden de convergencia numérico del método, ¿coincide con el teórico? Trate las condiciones de Neumann con segundo orden en espacio mediante una fórmula asimétrica (sin puntos ficticios). Repita las cuestiones anteriores. Finalmente, trate las condiciones de contorno mediante la introducción de puntos ficticios y repita las cuestiones anteriores. Represente gráficamente la evolución de la solución con el tiempo e interprete físicamente el resultado que observa. NOTA: ¿cómo utilizaría el método matricial para estudiar la estabilidad de estos problemas? ¿Cómo lo aplicaría numéricamente en Matlab?

c) También podemos resolver este problema mediante un θ-método implícito, que consiste en evaluar la ecuación en el momento $t^{n+\theta}$, donde $0 < \theta \leq 1$. De esta forma se obtiene la ecuación en diferencias

$$\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} = k\delta_x^2(\theta T^{n+1} + (1-\theta)T^n),$$

donde el operador $\delta_x = E^{1/2} - E^{1/2}$. Como condiciones iniciales y de contorno (Dirichlet) tome $T_i = 0$, $T_0 = 100^{\circ}$C y $T_L = 50^{\circ}$C. ¿Cómo trata núméricamente dichas condiciones? Escriba un programa en Matlab que implemente dicho método numérico. ¿Bajo qué condiciones en r y en θ converge el método? Ilustre su respuesta con algunas simulaciones. Para qué valor de r en función de θ son los errores de truncado mínimos, ¿por qué? Dibuje la solución tras 10 pasos de tiempo para $r = 0{,}1$ y para $r = 0{,}9$ para θ igual a 1, 0.75, 0.5 y 0.25. ¿Qué malla ha escogido para x? ¿Por qué? Compare los resultados que ha obtenido entre sí. Dibuje la solución que obtiene para $r = 0{,}75$, $r = 0{,}3$ y $r = 0{,}2$ tras 1, 10 y 100 pasos de tiempo. ¿Cúal es la solución numérica cuando $t \to \infty$? ¿Cuál es la solución exacta en dicho caso?

d) Repita el problema anterior pero con condición inicial $T_i = 100^{\circ}\text{C}$ y condiciones de Neumann en los extremos

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0,t) = 1, \quad \frac{\partial T}{\partial x}(L,t) = 0, \qquad \forall t > 0.$$

Trate estas condiciones de contorno con primer orden espacio. ¿Cuál es la condición de estabilidad del método numérico resultante? ¿Cuál es el orden global del método? Determine el orden de convergencia numérico del método, ¿coincide con el teórico? Trate las condiciones de Neumann con segundo orden en espacio mediante una fórmula asimétrica (sin puntos ficticios). Repita las cuestiones anteriores. Finalmente, trate las condiciones de contorno mediante la introducción de puntos ficticios y repita las cuestiones anteriores. Represente gráficamente la evolución de la solución con el tiempo e interprete físicamente el resultado que observa. NOTA: ¿cómo utilizaría el método matricial para estudiar la estabilidad de estos problemas? ¿Cómo lo aplicaría numéricamente en Matlab?

e) Obtenga analíticamente la solución exacta de los problemas anteriores y compárela con los resultados numéricos que ha obtenido en los apartados anteriores.

2. Se puede estudiar el problema de la conducción de calor en una placa plana (medio bidimensional), para el que la ecuación de calor se escribe

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)$$

a) Deduzca físicamente la ecuación del calor bidimensional. Utilice el mismo razonamiento utilizado en el problema 1 pero para una placa plana.

Considere una placa cuadrada de 40×40cm del mismo material (aluminio) que en apartados anteriores. Considere una condición inicial nula y condiciones de contorno de Dirichlet

$$T(x,0,t) = 0^{\circ}\text{C}, \qquad T(x,40,t) = 100^{\circ}\text{C}, \qquad 0 < x < 40, \quad t > 0,$$

$$T(0,y,t) = 75^{\circ}\text{C}, \qquad T(0,y,t) = 50^{\circ}\text{C}, \qquad 0 < y < 40, \quad t > 0.$$

b) Determine la solución de este problema. Dibuje la solución en $t = 1$ y $t = 2$. Si la solución es una serie, ¿cómo ha sumado dicha serie? Está bien condicionado el algoritmo que ha utilizado. ¿Cómo aceleraría la velocidad de convergencia de dicha serie?

c) Escriba un método numérico en diferencias finitas explícito de segundo orden en espacio y primer orden en tiempo (método de Euler hacia adelante). Escriba un programa en Matlab que implemente dicho método numérico. Analice la estabilidad de este método numérico mediante el método de von Neumann y demuestre que la condición de estabilidad es

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2 + \Delta y^2}{8k}.$$

Sean $\Delta x = \Delta y$, y $r = k\Delta t/\Delta x^2$, ¿oscila el error numérico para $r = 1/8$?, ¿y, para $r = 1/16$? Ilustre su respuesta con alguna simulación. Dibuje la solución que obtiene para $r = 0{,}25$, $r = 0{,}2$ y $r = 0{,}1$ tras 1, 10 y 100 pasos de tiempo. ¿Qué malla ha escogido para x? ¿Por qué? ¿Cúal es la solución numérica cuando $t \to \infty$? ¿Cuál es la solución exacta en dicho caso?

d) Escriba el algoritmo Peaceman-Rachford del método implícito de la dirección-alternada (A.D.I.) para la ecuación parabólica anterior. ¿Cuál es la condición de estabilidad de este método? Cómo la determinarías utilizando sólo resultados numéricos.

e) Compara los dos métodos anteriores con la solución exacta y entre sí. ¿Cómo son los errores? (Dibuja una gráfica) ¿Cómo has calculado los errores? ¿En qué norma? ¿En qué instantes de tiempo has analizado los errores? ¿Por qué?; ¿En qué puntos hay más error? ¿Por qué?; ¿Cuál es el método más preciso? ¿Cuál es más costoso? Dibuja una gráfica del error en función del número de operaciones flotantes para los dos métodos. Debes utilizar al menos 3 pasos de tiempo diferentes y al menos 3 tamaños diferentes de malla espacial. Comenta y justifica tus resultados.