Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

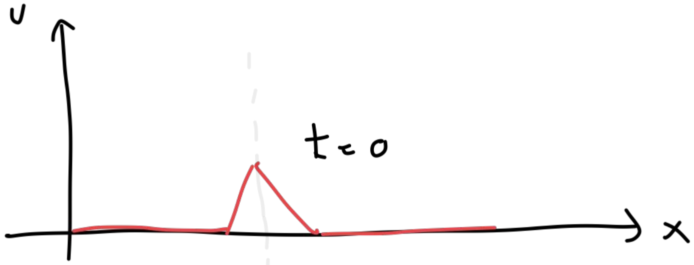
2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

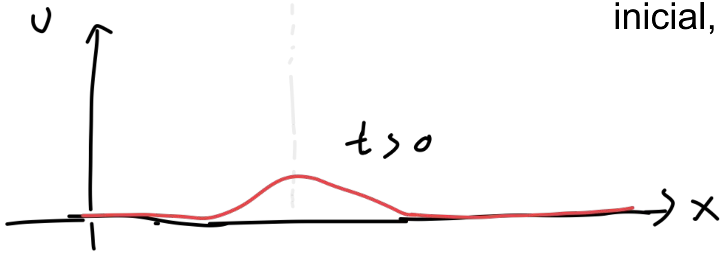
Ecuación de difusión → ecuación parabólica

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad , \quad \nu = cte$$

$$u = u(x,t) \qquad u(x,0) = a(x) = c.\,i.$$

$$0 \leq x \leq L \quad , \quad u(0,t) = c_1(t) \; , \; u(L,t) = c_2(t)$$ c.c.





La ecuación describe el amortiguamiento de una función inicial, como un proceso difusivo

Viene de alguna ley de balance: por ejemplo, supongamos un gas cuya energía escribimos cómo:

$$E = \int_V \epsilon \, d^3V \qquad\qquad \frac{\partial}{\partial t}\int_V \epsilon \, d^3V = -\int_S \mathbf{q}\cdot\mathbf{dS} = -\int_V \nabla\cdot\mathbf{q}\, d^3V$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} = -\nabla\cdot\mathbf{q} \qquad\qquad \epsilon \propto T \ , \ \ \mathbf{q} \propto -\nabla T$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$$

También aparece en la ecuación de Navier-Stokes en fluidos

$\rightarrow$ advección (no-lineal) + difusión

sup. un modo Fourier, $u(x,t) = Ae^{iwt}e^{ikx} \ \rightarrow \ iw\,u = -\nu k^2\,u \ \rightarrow \ u(x,t) = Ae^{-\nu k^2 t}e^{ikx}$

tiempo de difusión $\sim 1/(\nu k^2) = \lambda^2/\nu$

Esquema numérico: u_j^n

grilla espacial y temporal $t^n = n\Delta t \ , \ x_j = j\Delta x$

Aproximamos la derivada segunda con esquema centrado (2do orden) y hacemos Euler en tiempo,

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

Analizamos consistencia → $U(x,t)$ sol. exacta

Reempl $U(x_j, t^n)$ en el esquema numérico y calculamos el error de trunc E,

$$E = \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right) - \frac{\nu(\Delta x)^2}{12}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}\right)$$

$$E \to 0 \text{ cuando } \Delta t, \ \Delta x \ \to 0$$

Estabilidad → Von Neumann : $u_j^n = \lambda^n e^{ikx_j}$

$$\lambda^{n+1} e^{ikx_j} = \lambda^n e^{ikx_j} + \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}\left[\lambda^n e^{ikx_j} e^{ik\Delta x} + \lambda^n e^{ikx_j} e^{-ik\Delta x} - 2\lambda^n e^{ikx_j}\right]$$

$$\lambda = 1 + \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}\left[e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x} - 2\right]$$

$$\lambda = 1 + 2r[\cos(k\Delta x) - 1] = 1 - 4r\sin^2(\frac{k\Delta x}{2}) \quad , \quad r = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$$

$$|\lambda| \leq 1 \iff -1 \leq 1 - 4r\sin^2(\frac{k\Delta x}{2}) \leq 1$$

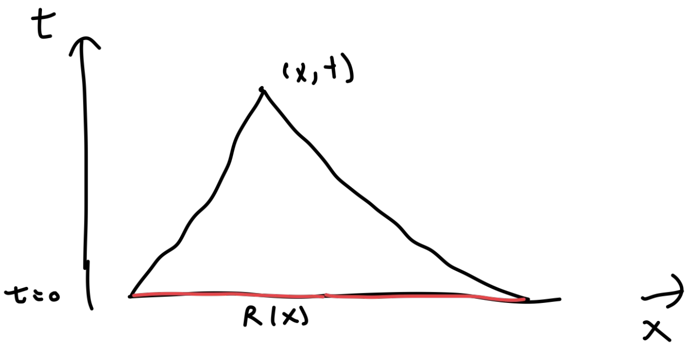
$$4r\sin^2(\frac{k\Delta x}{2}) \leq 2 \;\; \Rightarrow \;\; r \leq \frac{1}{2}$$

$$\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{2\nu}$$

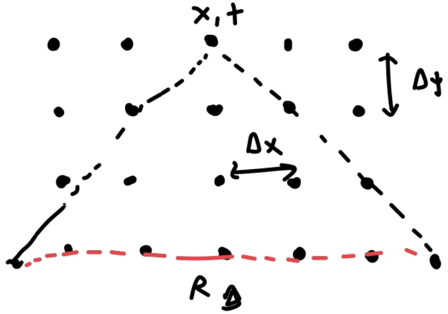
→ tiempo de difusión asociado a la escala de grilla

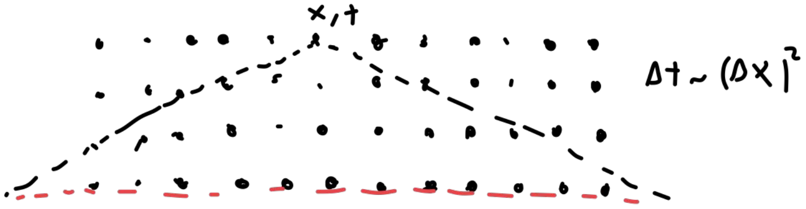
Como es consistente y estable, el esquema es convergente (Lax)

si se cumple que el espaciado temporal es menor al tiempo de difusión asociado a la grilla espacial



El rango de influencia (para la sol. exacta) es todo el dominio





Dominio de dependencia (numérico)

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r\left(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n\right) \qquad r = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$$

Ponemos los valores de la función en los puntos de grilla como un arreglo

$$(u_1, \ldots., u_{N-1})$$

$$u_0 \text{ y } u_N \;\; \text{c. c.}$$

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ . \\ . \\ . \\ u_{N-1} \end{pmatrix}^{n+1} = \begin{pmatrix} (1-2r) & r & 0 & 0 & 0 \\ r & (1-2r) & r & 0 & 0 \\ 0 & r & (1-2r) & r & 0 \\ 0 & 0 & r & (1-2r) & r \\ 0 & 0 & 0 & r & (1-2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ . \\ . \\ . \\ u_{N-1} \end{pmatrix}^{n} + \begin{pmatrix} r\,u_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ r\,u_N \end{pmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{A}\,\bar{\mathbf{u}}^n + \bar{\mathbf{c}}$$

Con c.c. periódicas queda $(u_0,,\ldots.,u_{N-1})$, $u_0 = u_N$

$$\begin{pmatrix} u_0 \\ . \\ . \\ . \\ u_{N-1} \end{pmatrix}^{n+1} = \begin{pmatrix} (1-2r) & r & 0 & 0 & r \\ r & (1-2r) & r & 0 & 0 \\ 0 & r & (1-2r) & r & 0 \\ 0 & 0 & r & (1-2r) & r \\ r & 0 & 0 & r & (1-2r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ . \\ . \\ . \\ u_{N-1} \end{pmatrix}^{n}$$

$$\bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{A}\,\bar{\mathbf{u}}^{n}$$

(podemos mirar la estabilidad con los autovalores de la matriz)

Advances in Computational Mathematics 6 (1996) 207–226 207

Esquema implícito: Crank-Nicolson (1947)

A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type

J. Crank and P. Nicolson

This paper is reprinted from Proc. Camb. Phil. Soc. 43 (1947) 50–67 with kind permission of the publisher

Utiliza el esquema trapezoidal para la parte temporal

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\nu \Delta t}{2(\Delta x)^2}\left[(u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1}) + (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)\right]$$

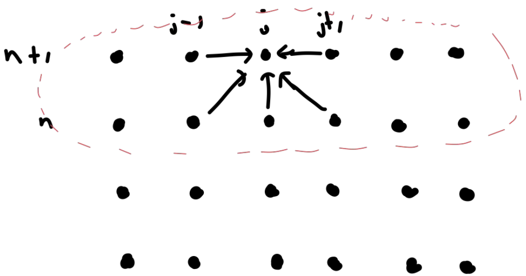
Se puede ver que es consistente (de 2do orden en tiempo y espacio) , veamos la estabilidad → $u_j^n = \lambda^n e^{ikx_j}$

$$r = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$$

$$\lambda^{n+1} e^{ikx_j} = \lambda^n e^{ikx_j} + \frac{r}{2}\left[\lambda^{n+1} e^{ikx_j} e^{ik\Delta x} + \lambda^{n+1} e^{ikx_j} e^{-ik\Delta x} - 2\lambda^{n+1} e^{ikx_j} + \lambda^n e^{ikx_j} e^{ik\Delta x} + \lambda^n e^{ikx_j} e^{-ik\Delta x} - 2\lambda^n e^{ikx_j}\right]$$

$$\lambda^{n+1}\left[1 - r\left(\cos k\Delta x - 1\right)\right] = \lambda^n\left[1 + r\left(\cos k\Delta x - 1\right)\right]$$

DD : todo el espacio ✓



$$\lambda = \frac{1 - 2r\ \sin^2(k\Delta x)}{1 + 2r\ \sin^2(k\Delta x)}$$

$$|\lambda| \le 1 \ \ \forall\ \Delta t$$

→ es *incondicionalmente estable*

Se puede escribir en forma matricial,

$$\mathbf{B}\,\bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{A}\,\bar{\mathbf{u}}^{n} + \bar{\mathbf{c}} \qquad \bar{\mathbf{u}} = (u_1, \ldots, u_{N-1}) \qquad u_0 \text{ y } u_N \ \text{c. c.}$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} (1+r) & -r/2 & 0 & 0 & 0 \\ -r/2 & (1+r) & -r/2 & 0 & 0 \\ 0 & -r/2 & (1+r) & -r/2 & 0 \\ 0 & 0 & -r/2 & (1+r) & -r/2 \\ 0 & 0 & 0 & -r/2 & (1+r) \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} (1-r) & r/2 & 0 & 0 & 0 \\ r/2 & (1-r) & r/2 & 0 & 0 \\ 0 & r/2 & (1-r) & r/2 & 0 \\ 0 & 0 & r/2 & (1-r) & r/2 \\ 0 & 0 & 0 & r/2 & (1-r) \end{pmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{c}} = (r\,u_0, 0, \ldots, 0, r\,u_N)$$

$$\Rightarrow \quad \bar{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\,\bar{\mathbf{u}}^{n} + \mathbf{B}^{-1}\bar{\mathbf{c}}$$

→ hay que invertir una matriz tridiagonal