Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

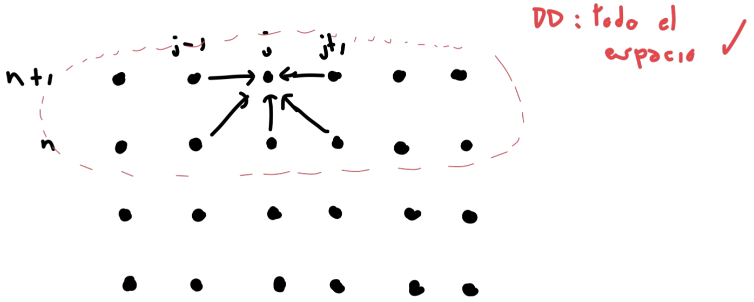
Ecuación de difusión

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

Esquema implícito: Crank-Nicolson (1947)

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

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



$$\lambda = \frac{1 - 2r\ \sin^2(k\Delta x)}{1 + 2r\ \sin^2(k\Delta x)} \qquad |\lambda| \leq 1\ \forall\ \Delta t$$

$\rightarrow$ es *incondicionalmente estable*

Se puede escribir en forma matricial,

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

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

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

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

→ hay que invertir una matriz tridiagonal

Una técnica para resolver este sistema: usando recurrencia → algoritmo TDMA (L. Thomas)

Tri Diagonal Matrix Algorithm

El sistema tridiagonal se puede escribir cómo:

$$\alpha_j \, u_{j+1}^{n+1} + \beta_j \, u_j^{n+1} + \gamma_j \, u_{j-1}^{n+1} = \omega_j \qquad (1) \qquad j = 1, \ldots, N-1$$

$$\alpha_j = -r/2 \quad , \quad \beta_j = 1 + r \quad , \quad \gamma_j = -r/2$$

$$w_j = (1-r) \, u_j^n + \frac{r}{2} \, u_{j-1}^n + \frac{r}{2} \, u_{j+1}^n$$

$$u_0 = c_1 \quad , \quad u_N = c_2$$

$$\beta_0 = 1 \, ; \; \alpha_0 = \gamma_0 = 0 \, ; \; \omega_0 = u_0$$

$$\beta_N = 1 \, ; \; \alpha_N = \gamma_N = 0 \, ; \; \omega_N = u_N$$

$$\alpha_j \; u_{j+1}^{n+1} + \beta_j \; u_j^{n+1} + \gamma_j \; u_{j-1}^{n+1} = \omega_j \qquad (1)$$

$$u_{j+1}^{n+1} = x_j \; u_j^{n+1} + y_j \qquad (2)$$

$$\rightarrow \quad \alpha_j \; (x_j \; u_j^{n+1} + y_j) + \beta_j \; u_j^{n+1} + \gamma_j \; u_{j-1}^{n+1} = \omega_j$$

$$\rightarrow \quad u_j^{n+1} = -\frac{\gamma_j \; u_{j-1}^{n+1}}{\alpha_j \; x_j + \beta_j} + \frac{\omega_j - \alpha_j \; y_j}{\alpha_j \; x_j + \beta_j} \qquad (3)$$

Si comparamos (2) y (3) vemos que:

$$u_j^{n+1} = x_{j-1} \; u_{j-1}^{n+1} + y_{j-1}$$

$$\text{con } \; x_{j-1} = -\frac{\gamma_j}{\alpha_j \; x_j + \beta_j} \quad , \quad y_{j-1} = \frac{\omega_j - \alpha_j \; y_j}{\alpha_j \; x_j + \beta_j} \qquad (4)$$

→ relación de recurrencia para los $x_j \; , \; y_j$

Empiezo con j=N-1

$$(2) \quad \rightarrow \quad u_N^{n+1} = c_2 = x_{N-1}\, u_{N-1}^{n+1} + y_{N-1}$$

$$\rightarrow \quad x_{N-1} = 0 \ , \quad y_{N-1} = c_2 = u_N$$

y después calculo los $x_j \ , \ y_j$ "bajando" de N-1 a 0 usando (4)

$$x_{N-2} = -\frac{\gamma_{N-1}}{\alpha_{N-1}\, x_{N-1} + \beta_{N-1}} = \frac{r/2}{1 + r - \frac{r}{2} x_{N-1}} \qquad y_{N-2} = \frac{\omega_{N-1} - \alpha_{N-1}\, y_{N-1}}{\alpha_{N-1}\, x_{N-1} + \beta_{N-1}} = \frac{\omega_{N-1} + r/2\, y_{N-1}}{1 + r - \frac{r}{2} x_{N-1}}$$

$$x_{N-3} = \ldots \qquad y_{N-3} = \ldots$$

$$x_1 = -\frac{\gamma_2}{\alpha_2\, x_2 + \beta_2} \ , \quad y_1 = \frac{\omega_2 - \alpha_2\, y_2}{\alpha_2\, x_2 + \beta_2} \qquad x_0 = -\frac{\gamma_1}{\alpha_1\, x_1 + \beta_1} \ , \quad y_0 = \frac{\omega_1 - \alpha_1\, y_1}{\alpha_1\, x_1 + \beta_1}$$

y ahora calculo $u_1^{n+1}, \ldots, u_{N-1}^{n+1}$ con la recurrencia (2)

$$u_1^{n+1} = x_0\, u_0^{n+1} + y_0$$

$$u_2^{n+1} = x_1\, u_1^{n+1} + y_1$$

$$\ldots \qquad u_{N-1}^{n+1} = x_{N-2}\, u_{N-2}^{n+1} + y_{N-2}$$

Este método permite invertir la matriz en $O(N)$ operaciones en lugar de en $O(N^3)$ como sería con eliminación de Gauss

Ecuación de difusión en 2D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \qquad u = u(x, y, t) \quad , \quad u(x, y, t = 0) = a(x, y) \quad , \quad u(x, y \in \mathcal{C}, t) = \mathrm{dato}$$

$$x_i = i\Delta x \quad ; \quad i = 1, \ldots, N-1 \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \rightarrow \quad \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j}}{(\Delta x)^2}$$

$$y_j = j\Delta y \quad ; \quad j = 1, \ldots, M-1 \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad \rightarrow \quad \frac{u_{i,,j+1} + u_{i,j-1} - 2u_{i,j}}{(\Delta y)^2}$$

Utilizando Euler en tiempo,

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + r_x \left(u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n - 2u_{i,j} \right) + r_y \left(u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n - 2u_{i,j} \right)$$

$$r_x = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2} \quad , \quad r_y = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta y)^2}$$

Se puede ver que es condicionalmente estable, si $r_x, r_y \leq 1/4$

Crank-Nicolson: implícito → incondicionalmente estable

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^{n} + \frac{r_x}{2}[(u_{i+1,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1}) + (u_{i+1,j}^{n} + u_{i-1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n})]$$
$$+ \frac{r_y}{2}[(u_{i,j+1}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1}) + (u_{i,j+1}^{n} + u_{i,j-1}^{n} - 2u_{i,j}^{n})]$$

Se construye $\bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}} = \bar{\mathbf{u}}_{iM+j} = u_{i,j}$

→ vector largo con todas las incógnitas en los puntos de grilla i,j

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

matrices ralas pero con elementos muy fuera de la diagonal

Si por ejemplo tengo 100x100 puntos de grilla, quedan matrices de 10,000 x 10,000 elementos

Otros métodos para 2D → direcciones alternadas (ADI) : explícito en una dirección, implícito en la otra

$$\frac{u_{i,j}^{n+1/2} - u_{i,j}^{n}}{\Delta t/2} = \nu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}^{n+1/2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}^{n} \right]$$

→ son 100 sistemas de 100x100

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \nu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}^{n+1/2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}^{n+1} \right]$$

→ otros 100 sistemas de 100x100

→ de 2do orden e incondicionalmente estable

splitting (desdoblamiento) → resuelvo cómo dos problemas 1D

$$\frac{\tilde{u}_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^{n}}{\Delta t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}^{n+1}$$

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - \tilde{u}_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}^{n+1}$$

Ecuación de advección-difusión $\rightarrow$ juntamos los dos problemas

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c\frac{\partial u}{\partial x} + \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

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

$\rightarrow$ esquema FTCS (Forward in Time Centered in Space)

Si bien la parte advectiva da incondicionalmente inestable, la parte difusiva estabiliza el esquema si se cumple:

Peclet

$$\frac{c\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{c\Delta x}{\nu} < 1$$

$$\frac{\nu\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$$

también se puede usar un esquema mixto, explícito-implícito

Para probar esquemas, o combinación de esquemas, se puede comparar con alguna solución exacta, como:

$$u(x,0) = A\sin(\omega x)$$ c.i.

$$u(x,t) = A\sin[\omega(x-ct)]e^{-\nu\omega^2 t}$$

→ da una onda sinusoidal que se propaga y se amortigua