Práctica 6

Métodos Numéricos con Diferencias Finitas para EDPs de evolución

En esta práctica resolveremos algunas ecuaciones en derivadas parciales mediante métodos numéricos que discretizan tanto el espacio como el tiempo. Esto es, buscaremos soluciones aproximadas a la solución del problema, digamos $u(x,t)$ para ciertos valores de x y de t. La solución vendrá dada por una matriz de datos en el que en cada posición tendremos la aproximación numérica a $u(x_i, t_j)$, donde x_i, t_j son los puntos en los que se aproxima la solución. Estudiaremos dos tipos de EDPs: parabólicas e hiperbólicas.

6.1. Ecuación parabólica o del calor

Como ejemplo de problema de contorno parabólico consideraremos la ecuación del calor o ecuación de la difusión dependiente del tiempo que consideraremos tiene la forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad x \in [0, L], \tag{6.1}$$

donde la solución, $u(x,t)$, satisface las siguientes condiciones de frontera

$$u(0,t) = f_0(t), \qquad u(L,t) = f_L(t)$$

y condiciones iniciales

$$u(x,0) = g(x).$$

El primer paso para obtener una aproximación numérica para resolver esta ecuación es discretizar el tiempo y el espacio en intervalos igualmente espaciados, $t = n\Delta t$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, y $x = x_0 + i\Delta x$, $i = 0, 1, \ldots, N_x + 1$.

Se toma una aproximación para la derivada temporal de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u(x, t+\Delta t) - u(x,t)}{\Delta t} + O\left(\Delta t\right) \ .$$

Para la derivada espacial se toma

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u(x-\Delta x, t) - 2u(x,t) + u(x+\Delta x, t)}{\Delta x^2} + O\left(\Delta x^2\right) \ .$$

Se suele utilizar la notación u_i^n como la aproximación numérica a $u\left(n\Delta t, x_0 + i\Delta x\right)$, que se obtiane a partir de la ecuación (6.1) como

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\Delta x^2} \ ,$$

o sea,

$$u_i^{n+1} = u_i^n + r\left(u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n\right) \ , \qquad i = 1, 2, \ldots, N_x.$$

donde $r = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$. Esta relación se puede escribir en forma matricial de manera más compacta

$$u^{n+1} = (I + rA)u^n + rb^n \tag{6.2}$$

siendo I la matriz identidad de dimensión $N_x \times N_x$ y donde

$$u^n = \begin{bmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{N_x-1}^n \\ u_{N_x}^n \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & & \cdots & & \\ & & & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix}, \quad b^n = \begin{bmatrix} f_0^n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ f_L^n \end{bmatrix}.$$

El método obtenido es un método explícito, ya que los valores de u^{n+1} se pueden calcular directamente sabiendo los valores en el instante anterior u^n.

Para garantizar la estabilidad del esquema explícito, se puede demostrar que es necesario que se cumpla la condición

$$0 < \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} \ ,$$

que se conoce como *la condición de Courant*, y que limita la longitud del paso temporal que es necesario elegir una vez se ha elegido un paso espacial.

Para evitar problemas de estabilidad, se puede evaluar la derivada segunda espacial en el instante $(n+1)\Delta t$, en vez de hacerlo en el instante $n\Delta t$, obteniendo de este modo la aproximación

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \ ,$$

o sea,

$$-ru_{i-1}^{n+1} + (1+2r)u_i^{n+1} - ru_{i+1}^{n+1} = u_i^n \ ,$$

que es un método implícito, ya que si hacemos variar $i = 1, \dots, N_x$, para cada paso de tiempo, se ha de resolver un sistema de ecuaciones que matricialmente toma la forma

$$(I - rA)u^{n+1} = u^n + rb^{n+1} \tag{6.3}$$

donde A es la misma matriz que antes. Por tanto, el algoritmo recursivo que nos permite obtener u^{n+1}, con las condiciones de frontera conocidas, b^{n+1}, es

$$u^{n+1} = (I - rA)^{-1}\Big(u^n + rb^{n+1}\Big). \tag{6.4}$$

Otro método que tampoco tiene problemas de estabilidad y es más preciso que el anterior método implícito, es el método de Crank-Nicolson, que viene dado por la ecuación

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{\alpha}{2}\left(\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right) \ .$$

Matricialmente se puede escribir en la forma

$$(I - \frac{1}{2}rA)u^{n+1} = (I + \frac{1}{2}rA)u^n + \frac{r}{2}(b^n + b^{n+1}) \tag{6.5}$$

luego

$$u^{n+1} = (I - \frac{1}{2}rA)^{-1}\Big((I + \frac{1}{2}rA)u^n + \frac{r}{2}(b^n + b^{n+1})\Big). \tag{6.6}$$

Todos estos métodos se pueden obtener fácilmente a partir de los métodos estudiados en el tema anterior para ecuaciones diferenciales ordinarias si primeramente discretizamos solamente en espacio y tomamos el vector de soluciones

$$u(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_{N_x-1}(t) \\ u_{N_x}(t) \end{bmatrix}$$

el cual debe satisfacer el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\frac{du}{dt} = sAu + sb(t)$$

donde $s = \frac{\alpha}{\Delta x^2}$. Vemos que se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma $y' = f(t, y)$ donde $y = u$ y $f(t, u) = sAu + sb(t)$. Si utilizamos el método de Euler explícito visto en el tema anterior obtenemos el método (6.2). En cambio, si utilizamos el método de Euler implícito ($y_{i+1} = y_i + hf(t_{i+1}, y_{i+1})$) se obtiene el esquema (6.3) o bien (6.4). Finalmente, si utilizamos el método implícito trapezoidal, o lo que es lo mismo, el método de Adams-Moulton de un paso ($y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(t_{i+1}, y_{i+1}) + f(t_i, y_i))$) obtenemos el método de Crank-Nicolson. Como vemos, en principio, podríamos utilizar cualquiera de los métodos vistos para EDOs con condiciones iniciales (observar que las condiciones de frontera se encuentran en el vector $b(t)$).

Ejemplo. Consideremos el problema

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(0, t) = u(1, t) = 0 \\ u(x, 0) = \sin(\pi x). \end{cases} \qquad x \in [0, 1] \tag{6.7}$$

cuya solución exacta es: $u(x, t) = e^{-\pi^2 t} \sin(\pi x)$. El siguiente programa nos genera las aproximaciones que se obtienen con los método de Euler explícito, el de Euler implícito y el de Crank-Nicholson (dependiendo de la elección que tomemos para la variable "imet"). La precisión que se obtiene depende de las elecciones de Δx y Δt.

```
% Problema parabolico: du/dt = al d^2u/dx^2
% Condiciones frontera: u(t,0)=alfa, u(t,L)=beta
% Condiciones iniciales: u(0,x)=g(x)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
 al=1;
% Intervalo espacial y temporal
 x0=0; xL=1; t0=0; tf=5.5;
% Discretizacion espacial y temporal
 Nx=50; Nxint=Nx+1; hx=(xL-x0)/Nxint; Nt=500; ht=(tf-t0)/Nt;
% imet = Metodo a utilizar:
% 1=Euler explicito, 2=Euler implicito, 3=Crank-Nicholson
 imet=3;
```

```
% Condiciones iniciales
 un=[]; uex=[]; MU = []; MUex = [];
 for i = 1:Nx;
  x(i)=x0 + i*hx; un(i) = sin(pi*x(i));
 end
% Valores en la frontera
 f0(1)=0;  fL(1)=0;
 for i = 1:Nt+1;
    t(i)=t0 + i*ht;
    f0(i+1)=0;     fL(i+1)=0;
 end
 MU = [ f0(1) un fL(1) ];  MUex = MU;
 A =zeros(Nx); b=zeros(Nx,1);
 for i = 1:Nx-1;
  A(i,i)= -2; A(i,i+1)= 1; A(i+1,i)=1;
 end
 A(Nx,Nx)=-2; r=al*ht/hx^2;
 for i=1:Nt
 if (imet == 1)
  b(1) = f0(i);   b(Nx) = fL(i);
  un = ((eye(Nx)+r*A)*un' + r*b)';
 elseif (imet == 2)
  b(1) = f0(i+1);  b(Nx) = fL(i+1);
  un = (inv(eye(Nx)-r*A)*(un' + r*b))';
 elseif (imet == 3)
  b(1) = (f0(i+1) + f0(i))/2;
  b(Nx) = (fL(i+1) + fL(i))/2;
  un = (inv(eye(Nx)-r*A/2)*((eye(Nx)+r*A/2)*un' + r*b))';
 end
% MU contiene las soluciones aproximada por filas
 MU = [MU ; f0(i+1) un fL(i+1) ];
% Solucion exacta
 for j=1:Nx
   uex(j)=exp(-pi^2*t(i))*sin(pi*x(j));
 end
 MUex = [MUex ;f0(i+1) uex fL(i+1) ];
 end
 figure(1)
 surf(MU)
 box
 figure(2)
```

```
 surf(MU-MUex) box
% Error maximo cometido
 max(max(abs(MU-MUex)))
```

6.2. Ecuación hiperbólica o de ondas

Como ejemplo de un problema de contorno hiperbólico consideraremos la ecuación de ondas, o sea, un problema de la forma

$$c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\ , \qquad 0 \le x \le L, \quad t \ge 0\ , \tag{6.8}$$

con las condiciones de contorno

$$u(0,t) = u(L,t) = 0\ ,$$

y las condiciones iniciales

$$u(x,0) = f(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(t,0) = g(x), \quad 0 \le x \le L\ .$$

Si el mallado espacial viene dado por los nodos $0 = x_0, x_1, \ldots x_{N_x+1} = L$, podemos utilizar las aproximaciones

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i,t_n) \approx \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\Delta x^2}\ ,$$

y

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i,t_n) \approx \frac{u_i^{n-1} - 2u_i^n + u_i^{n+1}}{\Delta t^2}\ .$$

Con esto, se llega a una aproximación de le ecuación (6.8) de la forma

$$c^2\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\Delta x^2} = \frac{u_i^{n-1} - 2u_i^n + u_i^{n+1}}{\Delta t^2}\ ,$$

que se puede reescribir como

$$u_i^{n+1} = 2u_i^n\left(1 - \frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) + \left(u_{i-1}^n + u_{i+1}^n\right)\left(\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}\right) - u_i^{n-1}\ .$$

para $i = 1, \ldots N_x$.

Los valores para $n = 0$ se obtienen de la condición inicial, pero también son necesarios los valores para $n = 1$. Una posibilidad consiste en usar la condición

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = g(x), \qquad 0 \le x \le l\ ,$$

sustituyendo

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, 0) \approx \frac{u_i^1 - u_i^0}{\Delta t} = g\left(x_i\right) \ ,$$

o sea,

$$u_i^1 = u_i^0 + \Delta t g\left(x_i\right) \ , \quad i = 1, \ldots N \ .$$

De nuevo, al igual que en el problema parabólico, si discretizamos solamente respecto a la coordenada espacial nos queda el sistema de ecuaciones diferenciales, utilizando la misma notación que anteriormente

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = sAu$$

donde $s = \frac{c^2}{\Delta x^2}$ y la matriz A es la misma que en el problema parabólico (proviene de la discretización del mismo operador, $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$). Obsérvese que ahora $b(t) = 0$ debido a que las condiciones de frontera son nulas, si no habría que añadir este vector. Las condiciones iniciales son

$$u(0) = \left[\begin{array}{c} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N_x - 1}) \\ f(x_{N_x}) \end{array} \right] , \qquad u'(0) = \left[\begin{array}{c} g(x_1) \\ g(x_2) \\ \vdots \\ g(x_{N_x - 1}) \\ g(x_{N_x}) \end{array} \right] .$$

Esto es un sistema de ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden con condiciones iniciales en la función y su derivada.

Podemos convertir este sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden en uno de primer orden como se vió el curso pasado

$$\frac{d}{dt} \left[\begin{array}{c} u \\ v \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} v \\ sAu \end{array} \right]$$

y condiciones iniciales: $u(0)$ y $v(0) = u'(0)$. De nuevo es de la forma $y' = f(t, y)$ donde $y = (u, v)^T$ y $f(t, y) = (v, sAu)^T$.

El esquema propuesto de segundo orden tanto en la discretización espacial como en la temporal se corresponde con el siguiente algoritmo

$$\begin{array}{c} U = u^n + \frac{\Delta t}{2} v^n \\ v^{n+1} = v^n + \Delta t s A U \\ u^{n+1} = U + \frac{\Delta t}{2} v^{n+1} \end{array}$$

el cual se inicia con: $u^0 = u(0), \quad v^0 = u'(0)$. Este esquema recibe el nombre de *leap-frog* por la forma especial en que se evalua.

Ejemplo. Considerar la siguiente ecuación hiperbólica con condiciones iniciales y de frontera

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(0,t) = u(1,t) = 0 & x \in [0,1] \\ u(x,0) = \sin(\pi x) + \frac{1}{2}\sin(3\pi x) \\ u'(x,0) = 0 \end{cases} \tag{6.9}$$

cuya solución exacta es:

$$u(x,t) = 2\cos(\pi t)\sin(\pi x) + \frac{1}{2}\cos(3\pi t)\sin(3\pi x).$$

El siguiente algoritmo implementa el método de *leap-frog* para aproximar la solución del problema. Al conocer la solución exacta podemos comparar con los resultados numéricos obtenidos y ver cómo se comportan éstos para diferentes valores de Δx y Δt.

```
%  Problema hiperbolico: d^2u/dt^2 = al^2 d^2u/dx^2
%  Condiciones frontera: u(t,0)=0,  u(t,L)=0
%  Condiciones iniciales: u(0,x)=f(x), u'(0,x)=g(x)
 al=1;
% Intervalo espacial y temporalde
 x0=0;  xL=1;  t0=0; tf=1;
% Discretizacion espacial y temporal
 Nx=100;   Nxint=Nx+1;   hx=(xL-x0)/Nxint;
 Nt=100;   ht=(tf-t0)/Nt;
% Valores en la frontera
 alfa=0;  beta=0;
% Condiciones iniciales
 un=[];  vn=[]; uex=[]; MU = []; MUex = [];
 for i = 1:Nx;
   x(i)=x0 + i*hx;
   un(i) = sin(pi*x(i)) + 0.5*sin(3*pi*x(i));
   vn(i) = 0;
 end
 MU = [ alfa un beta ];  MUex = MU;
 A = zeros(Nx); b=zeros(Nx,1);
 for i = 1:Nx-1;
   A(i,i)= -2;  A(i,i+1)= 1;  A(i+1,i)= 1;
 end
 A(Nx,Nx)=-2;  r=al^2/hx^2;
```

```
 for i=1:Nt
    t(i)=t0 + i*ht;
     un = un + vn*ht/2;
     vn = vn + ht*r*(A*un')';
     un = un + vn*ht/2;
% MU contiene las soluciones aproximada por filas
    MU = [MU ; alfa un beta ];
% Solucion exacta
   for j=1:Nx
    uex(j)=cos(pi*t(i))*sin(pi*x(j))+cos(3*pi*t(i))*sin(3*pi*x(j))/2;
   end
   MUex = [MUex ; alfa uex beta ];
 end
 figure(1)
 surf(MU)
 box
 figure(2)
 surf(MU-MUex)
 box
% Error maximo cometido
 max(max(abs(MU-MUex)))
```

Ejercicios. Práctica 5

1. Considerar la siguiente ecuación parabólica con condiciones iniciales y de frontera

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{1}{4}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(0,t) = 0 \\ u(1,t) = 0 \\ u(x,0) = \sin(\pi x). \end{array}\right. \qquad x \in [0,1], \quad t \in [0,2] \tag{6.10}$$

   Compara los resultados obtenidos utilizando en método de Euler explícito, el de Euler implícito y el de Crank-Nicholson para $\Delta x = \frac{1}{10}$ y $\Delta t = \frac{1}{10}$. Compara con la solución exacta, $u(x,t) = \exp\left(-\frac{\pi^2}{4}t\right)\sin(\pi x)$, y comenta los resultados.

2. Considerar la siguiente ecuación hiperbólica con condiciones iniciales y de frontera

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 4\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(0,t) = u(1,t) = 0 \\ u(x,0) = 2\sin(3\pi x) \\ u'(x,0) = -12\sin(2\pi x) \end{array}\right. \qquad x \in [0,1], \quad t \in [0,10] \tag{6.11}$$

   Utiliza el método de *leap-frog* tomando: (i) $\Delta x = \frac{1}{25}, \Delta t = \frac{1}{50}$ y (ii) $\Delta x = \frac{1}{50}, \Delta t = \frac{1}{100}$. Compara con la solución exacta,

$$u(x,t) = 2\cos(6\pi t)\sin(3\pi x) - \frac{3}{\pi}\sin(4\pi t)\sin(2\pi x),$$

   y comenta los resultados.