

Modelos de predicción en edificación

Bloque 1. Ecuaciones diferenciales y sistemas dinámicos

Sección 3. La ecuación del calor: resolución numérica

Toni Guillamon

Dept. Matemàtiques - UPC

13 de Octubre de 2020

Método de las diferencias finitas (FDM)

Diferencias finitas²

- Los **métodos de diferencias finitas (FDM)** son métodos numéricos para **aproximar las soluciones de ecuaciones diferenciales** usando expresiones en diferencias finitas para aproximar las derivadas.
- Las diferencias finitas se obtienen a partir de los desarrollos de Taylor:

$$f(a + h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}h^n + R_n(x),$$

suponiendo que estamos buscando soluciones al menos derivables hasta orden n .¹

¹Concepto teórico: que existen todas las derivadas hasta orden n y son continuas.

²Es conveniente un repaso de la primera sección sobre *Preliminares de cálculo* para empezar con los conceptos claros, especialmente las definiciones de cociente incremental, derivadas parciales y desarrollo de Taylor.

Método de las diferencias finitas (FDM)

Derivadas aproximadas

- En particular, las expresiones

$$f'(a) \sim \frac{f(a+h) - f(a)}{h}, \quad f'(a) \sim \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

son buenas aproximaciones de la primera derivada en el punto a , llamadas aproximaciones de la derivada **lateral posterior/avanzada** y **central**, resp.

- Las expresiones

$$f''(a) \sim \frac{f(a+2h) - 2f(a+h) + f(a)}{h^2},$$

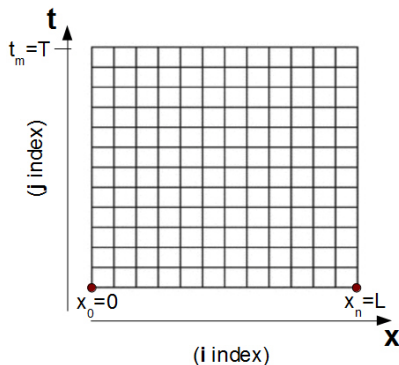
$$f''(a) \sim \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2}$$

son buenas aproximaciones de la segunda derivada en el punto a , llamadas aproximaciones de la derivada **lateral** y **central**, resp.

Método de las diferencias finitas (FDM)

Discretización en una malla

- Discretizamos el dominio de definición del problema, generalmente usando una **malla uniforme**.



Método de las diferencias finitas (FDM)

Ejemplo: transferencia de calor en una barra 1D



Debemos resolver la **ecuación del calor** para $u = u(x, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

donde $u(t, x)$ es la temperatura en un punto x en el instante t , y α es la *difusividad térmica*, restringida a las **condiciones de contorno**:

$$\begin{cases} u(x, 0) = f(x), & 0 \leq x \leq L, \\ \begin{cases} u(0, t) = g_1(t), \\ u(L, t) = g_2(t), \end{cases} & 0 \leq t \leq T. \end{cases}$$

Método de las diferencias finitas (FDM)

Ejemplo: transferencia de calor en una barra 1D, discretización

Fijamos n y m , números naturales, y definimos los **pasos de discretización** $h := L/n$, $k := T/m$.

$$x_0 = 0, x_n = L, t_0 = 0, t_m = T; \quad x_i = x_0 + i h, \quad t_j = j k.$$

Discretizamos las derivadas que aparecen en la ecuación del calor:

$$u_t(x_i, t_j) = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j)}{k} =: \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k};$$

$$u_{xx}(x_i, t_j) = \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2 u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j))}{h^2} =: \frac{u_{i+1,j} - 2 u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2},$$

donde $u_{i,j} := u(x_i, t_j)$.

Método de Euler explícito

Un cálculo directo, usando la **diferencia lateral** para el tiempo, y la **diferencia centrada** para el espacio, nos da:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \alpha \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2},$$

that is,

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = \frac{\alpha k}{h^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}).$$

Entonces,

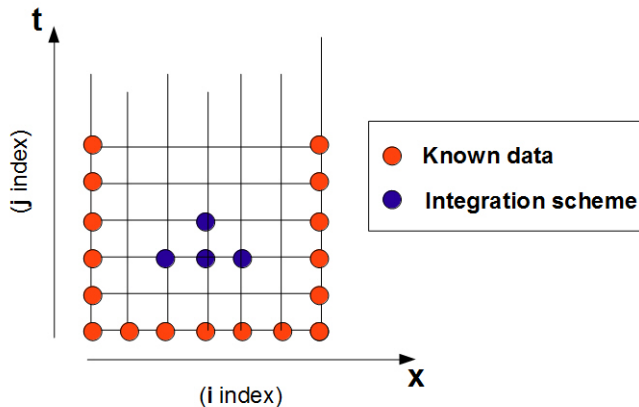
$$u_{i,j+1} = r u_{i+1,j} + (1 - 2r) u_{i,j} + r u_{i-1,j},$$

donde $r = \frac{\alpha k}{h^2} = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2}.$

Ver un **ejemplo** en el fichero HeatEquation.mlx de Matlab.

Método de Euler explícito

Malla, esquema computacional



Método de Euler explícito: resumen

Ecuación principal:

$$u_{i,j+1} = r u_{i+1,j} + (1 - 2r) u_{i,j} + r u_{i-1,j}, \quad r = \frac{\alpha k}{h^2} = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2}.$$

Condiciones de contorno:

$$u_{i,0} = u(x_i, 0), \quad i = 0, \dots, n;$$

$$u_{0,j} = u(0, t_j), \quad j = 0, \dots, m;$$

$$u_{n,j} = u(L, t_j), \quad j = 0, \dots, m.$$

Fuentes de error en FDM y estabilidad

- Las dos principales fuentes de error FDM son el **error de redondeo** y el **error de discretización**, es decir, la diferencia entre la solución exacta de la ecuación y la solución del esquema de discretización.
- Por otro lado, el método de Euler explícito resulta ser **inestable** si

$$r = \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} \geq 0.5.$$

- Los errores numéricos son proporcionales al paso de discretización temporal y al cuadrado del paso de discretización espacial:

$$\Delta u = O(k) + O(h^2).$$

Método de Euler implícito

Motivación

Para resolver el importante problema de la **inestabilidad**, se sustituye la **diferencia posterior** para el tiempo por la **diferencia anterior/atrasada** y se mantiene la **diferencia centrada** para el espacio:

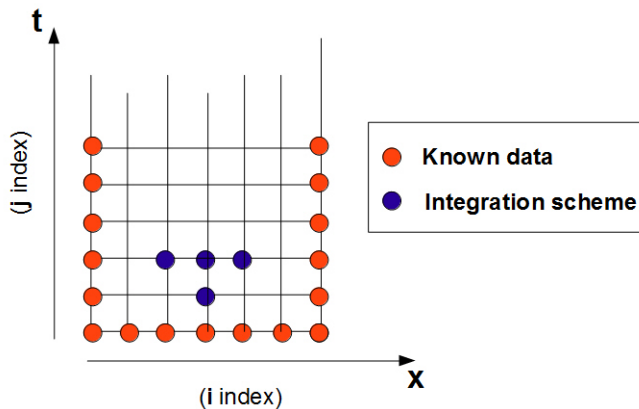
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_0, t_0) \sim \frac{f(x_0, t_0) - f(x_0, t_0 - h)}{h};$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_0, t_0) \sim \frac{u(x_0 + h, t_0) - 2u(x_0, t_0) + u(x_0 - h, t_0)}{h^2}.$$

Con esta modificación, el método se convierte en (**incondicionalmente**) estable.

Método de Euler implícito

Grid, computación scheme



Método de Euler implícito

Discretización

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \alpha \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2},$$

es decir,

$$u_{i,j+1} - u_{i,j} = r(u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}).$$

Entonces,

$$-r u_{i-1,j+1} + (1 + 2r) u_{i,j+1} - r u_{i+1,j+1} = u_{i,j}.$$

Por lo tanto, para cada $j = 1, \dots, m-1$, los elementos $u_{i,j+1}$ se obtienen a partir de los elementos $u_{i,j}$ solucionando el siguiente sistema lineal:

$$\begin{pmatrix} 1+2r & -r & & & \\ -r & 1+2r & -r & & \\ & -r & 1+2r & -r & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -r & 1+2r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{n-1,j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{1,j} + r u_{0,j+1} \\ u_{2,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{n-1,j} + r u_{n,j+1} \end{pmatrix}$$

Método de Euler implícito

Propiedades

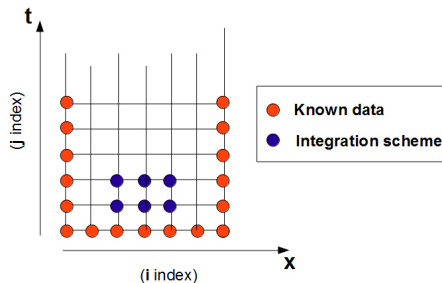
- El método de Euler implícito es siempre **estable numéricamente** y convergente.
- Computacionalmente, es **más costoso** que el método explícito: tenemos un sistema con las **variables acopladas**, mientras que en el método explícito, las variables están desacopladas y vamos resolviendo las ecuaciones una por una.
- Los **errores** son lineales respecto al paso de discretización temporal y cuadráticos respecto al paso de discretización espacial:

$$\Delta u = O(k) + O(h^2).$$

Método de Crank-Nicolson

Planteamiento

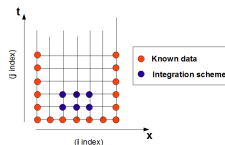
- Para incrementar el **orden** del método en el tiempo, el método de Crank-Nicolson usa una media entre dos niveles de tiempo.
- Puede interpretarse como si se usara una **diferencia centrada** en el tiempo y una **diferencia centrada** de segundo orden en el espacio.



Método de Crank-Nicolson

Ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} &= \frac{\alpha}{2h^2} (u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}) \\ &+ \frac{\alpha}{2h^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}). \end{aligned}$$



Entonces,

$$-\frac{r}{2} u_{i-1,j+1} + (1+r) u_{i,j+1} - \frac{r}{2} u_{i+1,j+1} = \frac{r}{2} u_{i-1,j} + (1-r) u_{i,j} + \frac{r}{2} u_{i+1,j}.$$

Por lo tanto, para cada $j = 1, \dots, m-1$, los elementos $u_{i,j+1}$ se obtienen a partir de los elementos $u_{i,j}$ resolviendo de nuevo un sistema lineal:

$$\begin{pmatrix} 1+r & -r/2 & & & \\ -r/2 & 1+r & -r/2 & & \\ & -r/2 & 1+r & -r/2 & \\ & & \ddots & \ddots & -r \\ & & & -r/2 & 1+r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{n-1,j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{r}{2} u_{0,j} + (1-r) u_{1,j} + \frac{r}{2} u_{2,j} + \frac{r}{2} u_{0,j+1} \\ \frac{r}{2} u_{1,j} + (1-r) u_{2,j} + \frac{r}{2} u_{3,j} \\ \frac{r}{2} u_{2,j} + (1-r) u_{3,j} + \frac{r}{2} u_{4,j} \\ \vdots \\ \frac{r}{2} u_{n-2,j} + (1-r) u_{n-1,j} + \frac{r}{2} u_{n,j} + r u_{n,j+1} \end{pmatrix}$$

Método de Crank-Nicolson

Propiedades

- Los errores son cuadráticos tanto respecto al paso de discretización temporal como respecto al paso de discretización espacial:

$$\Delta u = O(k^2) + O(h^2).$$

- El coste computacional es parecido al coste del método de Euler implícito.

Conclusión

- Generalmente, el esquema de Crank-Nicolson es el más preciso para pasos de tiempo cortos.
- El esquema de Euler explícito es el menos preciso y puede ser **inestable**, pero por otro lado es el más fácil de implementar y el menos costoso computacionalmente.
- El esquema de Euler implícito se comporta mejor para pasos de tiempo relativamente largos.

Referencias

- Ana Lacasta. “Transferencia de calor y vapor de agua”. Presentación del curso de *Fenómenos físicos en la edificación* del MUCAE, Departament de Física Aplicada EPSEB-UPC.
- Toni Susín. Presentación de la sesión sobre *ecuación del calor* del curso sobre *simulación continua*, Ingeniería Industrial, Dept. de Matemàtiques ETSEIB-UPC.
- Wikipedia, entrada (en inglés) sobre *diferencias finitas*.
- J. Crank. “The Mathematics of Diffusion”. 2nd Edition, Oxford, 1975, p. 143.