



SIMULACIÓN NUMÉRICA. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

ZULMA MILLÁN, LEONOR DE LA TORRE, LAURA OLIVA, MARÍA DEL CARMEN BERENGUER

Facultad de Ingeniería
Departamento de Matemática
Av. Libertador San Martín 1109 Oeste San Juan – Argentina

(Recibido 6 de julio de 2011, revisado 26 de agosto de 2011, para publicación 30 de agosto de 2011)

Resumen – La simulación numérica es una herramienta eficaz en las ciencias aplicadas, para la determinación de soluciones y la predicción del comportamiento de las mismas, sin recurrir a la experimentación. Permite la recreación matemática de procesos físicos que aparecen con frecuencia en el área de Ingeniería. El uso de simulaciones numéricas para estudiar ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, en particular la ecuación de difusión, requiere normalmente de un cuidadoso estudio de métodos numéricos, de algoritmos a utilizar y de los procesos fundamentales a incluir en la simulación. Una simulación numérica difiere de un modelo matemático en que el primero constituye una representación en cada instante del proceso a simular, mientras que el modelo constituye una abstracción matemática de las ecuaciones fundamentales necesarias para analizar dicho fenómeno. Normalmente la utilización de una simulación numérica para estudiar un problema dado requiere una cuidadosa planificación del modelo matemático a utilizar y de los algoritmos necesarios para resolver dicho modelo. Por intermedio de los métodos numéricos se determina la solución numérica de problemas para los cuales puede o no conocerse su solución analítica. Ellos permiten traducir complicados esquemas matemáticos mediante el diseño de algoritmos, los resultados pueden ser contrastados con las soluciones analíticas, en los casos en los que éstas existan. En este artículo se estudian y modelan las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y en particular la ecuación de difusión. La elección de la misma se efectúa basándose en sus múltiples aplicaciones en problemas de la Mecánica. Mediante material desarrollado usando un software científico, se comparan distintos métodos de solución analizando las ventajas y desventajas de su aplicación. Se obtienen conclusiones en cuanto a la aplicación de los métodos de solución.

Palabras clave – Solución analítica, métodos numéricos, difusión.

1. INTRODUCCIÓN

En problemas de ingeniería es frecuente encontrar modelos matemáticos que incluyen ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. La solución analítica proporciona una mayor comprensión del comportamiento de algunos fenómenos ya que permite ser determinada en todo instante de tiempo. En general, no es posible determinar esta solución debido a la no linealidad de las ecuaciones que constituyen el modelo matemático o debido al dominio donde se estudia el mismo.

Los métodos numéricos en Ingeniería proporcionan una herramienta que permite traducir modelos matemáticos en procedimientos computacionales, cuyos resultados pueden ser contrastados con las soluciones analíticas, en los casos en los que éstas existan.

En este trabajo se muestra una forma de introducir al estudiante de ingeniería en el estudio de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y su modelado numérico. En particular la ecuación de difusión será el objeto de estudio. La elección de la misma se efectúa basándose en sus múltiples aplicaciones en problemas de la Mecánica.

Usando el método de diferencias finitas para determinar la solución numérica de la ecuación de difusión, se abordarán básicamente dos planteos: método explícito y método implícito. Para ambos procedimientos es necesario diseñar algoritmos computacionales.

Este trabajo pretende mostrar cómo contribuir a la formación matemática del ingeniero mediante el uso de métodos numéricos. Cómo éstos introducen a los alumnos en la programación para la solución de

Ecuaciones Diferenciales Parciales. Finalmente muestra la comparación de los resultados obtenidos con el uso de distintos métodos numéricos y la solución analítica hallada en los casos posibles.

2. PLANTEO DEL PROBLEMA

Se inicia esta sección con el problema de difusión del calor a partir de un modelo unidimensional dado que éste puede utilizarse tanto en situaciones donde el dominio de estudio es unidimensional como en aquellos casos en que la geometría del dominio permita considerarlo de este modo.

Para que el lector se familiarice con el método analítico y los métodos numéricos usados en la resolución de la ecuación de difusión, se considerará un problema simplificado que sirva como punto de partida.

2.1. Modelo Matemático

Para describir la conducción de calor a través de una barra de sección transversal, de material homogéneo se usa la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (1)$$

Siendo $u=u(x,t)$ la función temperatura que describe el flujo de calor en el objeto, de longitud L a través del tiempo. Donde x representa la longitud que varía de 0 a L y t representa el tiempo y adopta valores mayores cero.

Para resolver esta ecuación es necesario definir condiciones de contorno que surgen del problema que se estudia, en este caso se especifican condiciones para $x=0$ y $x=L$

$$\begin{aligned} u(0,t) &= 0 & t \geq 0 \\ u(L,t) &= 0 & t \geq 0 \end{aligned} \quad (2)$$

También se consigna la distribución inicial de temperatura en el objeto, la cual recibe el nombre de condición inicial

$$u(x,0) = f(x) \quad 0 \leq x \leq L \quad (3)$$

Este problema queda modelado matemáticamente

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & 0 < x < L, \quad t > 0 \\ u(0,t) = 0 & t \geq 0 \\ u(L,t) = 0 & t \geq 0 \\ u(x,0) = f(x) & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (4)$$

Resulta así un problema de valores iniciales y de frontera homogéneo ya que los extremos de la barra se hallan a temperatura nula [2]. La constante α depende de características específicas del material que constituye el objeto en el que se estudia la distribución de temperaturas.

2.1.1. Solución Analítica

Por el método de separación de variables, si suponemos que la solución u tiene la forma $u(x,t) = X(x).T(t)$, se reduce (4) a un problema de ecuaciones diferenciales ordinarias con valores en la frontera. Usando métodos clásicos para la solución de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias se obtienen los autovalores y las correspondientes autofunciones que permiten determinar la expresión de la solución analítica como una serie de Fourier dada en

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n e^{-\frac{\alpha n^2 \pi^2}{L^2} t} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad (5)$$

donde b_n , con $n \in N$ son los coeficientes del desarrollo en serie de Fourier de la función $f(x)$ (condición inicial del problema) y se determinan a través de la fórmula

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx \quad (6)$$

Si las condiciones de frontera no son simultáneamente nulas, es decir si

$$\begin{aligned} u(0,t) &= T_0 & t \geq 0 \\ u(L,t) &= T_1 & t \geq 0 \end{aligned} \quad (7)$$

se aplica el siguiente cambio de variables en el problema (4)

$$w(x,t) = u(x,t) - \left[T_0 + \frac{x}{L}(T_1 - T_0) \right] \quad (8)$$

Este cambio de variables lo transforma en un problema homogéneo

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = 0 & 0 < x < L, \quad t > 0 \\ w(0,t) = 0 & t \geq 0 \\ w(L,t) = 0 & t \geq 0 \\ w(x,0) = g(x) & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (9)$$

Obteniéndose su solución $w(x,t)$ haciendo uso de la ecuación (5) y luego usando la ecuación (8) se obtiene la función incógnita $u(x,t)$ [7].

2.1.2. Solución Numérica

Para la determinación de la solución numérica de (4), se utilizan métodos en diferencias finitas. Estos incluyen tres aspectos principales:

1. La región en estudio se divide en intervalos de longitud Δx y el tiempo en etapas de duración Δt configurando así una grilla, como lo muestra la Fig. 1, cuyos puntos de intersección se denominan nodos. Por simplicidad al nodo (x_i, t_j) se lo designará como (i, j) .
2. Las derivadas parciales involucradas en la ecuación diferencial son reemplazadas por sus aproximaciones en diferencias finitas. Se obtiene así un sistema de ecuaciones algebraicas.
3. Se resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas y se encuentran los valores de la función incógnita $u(x,t)$ en los nodos de la grilla. Estos valores discretos describen aproximadamente la distribución temporal y espacial de la función incógnita. El valor de la función u en el nodo (x_i, t_j) se nota u_i^j .

2.1.2.1. Método Explícito

En la Ecuación de difusión (1), se sustituye la derivada con respecto al tiempo en el nodo (i, j) por una diferencia progresiva dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} \quad (10)$$

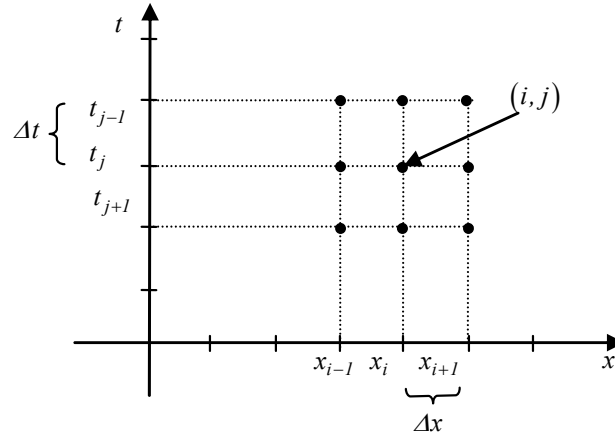


Fig. 1. Grilla sobre la que se aplica la discretización de un dominio.

y la derivada con respecto a la coordenada espacial x en el mismo nodo se sustituye por una diferencia central dada en

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{\Delta x^2} \quad (11)$$

Surge así la expresión que representa la temperatura en el nodo $(i, j+1)$, siendo $\lambda = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$

$$\lambda u_{i-1}^j + (1 - 2\lambda) u_i^j + \lambda u_{i+1}^j = u_i^{j+1} \quad i \in \{1, \dots, N-1\}, j \in N_0 \quad (12)$$

Esta ecuación permite determinar en forma explícita el valor de la temperatura en cada nodo en la etapa t_{j+1} en función de los valores de u en la etapa anterior t_j ya determinados [1,6].

El método explícito tiene un error de aproximación del orden de $O(\Delta t + \Delta x^2)$, pero su convergencia y estabilidad dependen del factor λ . En este factor interviene la constante α , la cual depende de características propias del material del objeto tales como la capacidad térmica ($[c] = \frac{\text{cal}}{\text{g } ^\circ\text{C}}$), la densidad

($[\rho] = \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$) y la conductividad térmica ($[k] = \frac{\text{cal}}{\text{s cm } ^\circ\text{C}}$). Con estas constantes se calcula el coeficiente

$$\alpha = \frac{k}{c\rho}.$$

Para analizar cada método de solución, se considera una barra de acero de 20 cm de longitud que se encuentra inicialmente con la distribución de temperatura $f(x) = \begin{cases} 10x & 0 \leq x \leq 10 \\ 200 - 10x & 10 \leq x \leq 20 \end{cases}$ y sus extremos permanecen aislados.

Se desea determinar la distribución de temperaturas en la barra para distintos intervalos de tiempo.

En primer lugar se formula usando el modelo matemático de la ecuación (4), que corresponde al problema, resultando:

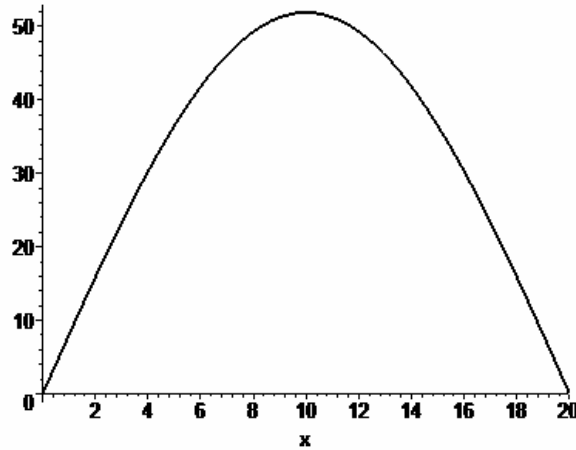


Fig. 2. Perfil de Temperatura- Solución Analítica.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & 0 < x < 20, \quad t > 0 \\ u(0,t) = 0 & t \geq 0 \\ u(L,t) = 0 & t \geq 0 \\ u(x,0) = f(x) & 0 \leq x < 20 \end{cases}$$

Para la solución de este problema se consideran los datos del acero que son: conductividad térmica: $k = 0.13 \frac{\text{cal}}{\text{s} \cdot \text{cm} \cdot ^\circ\text{C}}$; capacidad térmica: $c = 0.11 \frac{\text{cal}}{\text{g} \cdot ^\circ\text{C}}$ y densidad: $\rho = 7.8 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$.

De acuerdo con las condiciones iniciales y de frontera de este problema podemos resolverlo utilizando el método de separación de variables y por lo tanto calcularemos los coeficientes de Fourier en función de la condición inicial y las condiciones de frontera. Interviene además la longitud L del objeto en estudio. Estos cálculos se introducen en un software científico y se obtiene rápidamente la solución analítica del problema. La Fig. 2 muestra el perfil de temperatura que se logra cuando han transcurrido 120 segundos.

La figura anterior representa la solución analítica para este problema. En muchos casos esta solución no se puede determinar y es por ello que es necesario obtener una solución numérica.

Si se usa un método explícito se puede calcular la temperatura en una etapa de tiempo a partir de los resultados logrados en la etapa de tiempo anterior. Pero se sabe que este método tiene sus limitaciones en cuanto a la estabilidad del mismo para valores de $\lambda > 0.5$.

Se diseña un algoritmo mediante un software científico [3] para obtener la solución introduciendo las condiciones iniciales del problema, las condiciones de frontera, la geometría del objeto, características propias del material constituyente y el tiempo de exposición del experimento. Se elige además la cantidad de nodos espaciales que se trabajarán lo que determina directamente la longitud del intervalo espacial Δx y la cantidad de nodos temporales o bien Δt .

Para el objeto en cuestión se determina la solución discretizando con $\Delta x=2$ y $\Delta t=0.5$. La Tabla 1 muestra la evolución del perfil de temperatura para distintos tiempos.

Con respecto a la aproximación, se puede observar que ésta mejora a medida que afinamos la longitud del intervalo espacial, ya que como se dijo anteriormente, este método tiene un error del orden de $O(\Delta t + \Delta x^2)$.

Tabla 1. Evolución del perfil de temperatura en el tiempo.

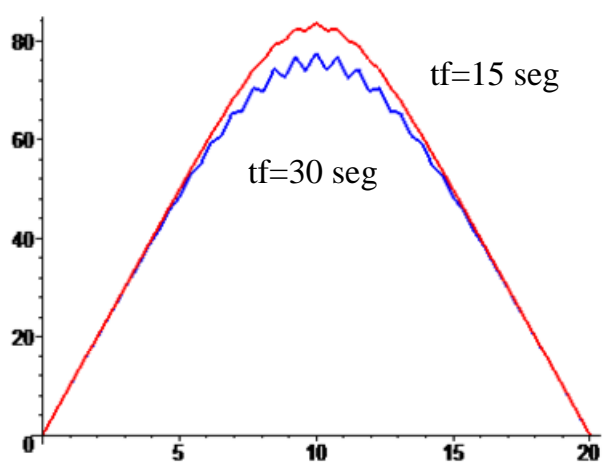
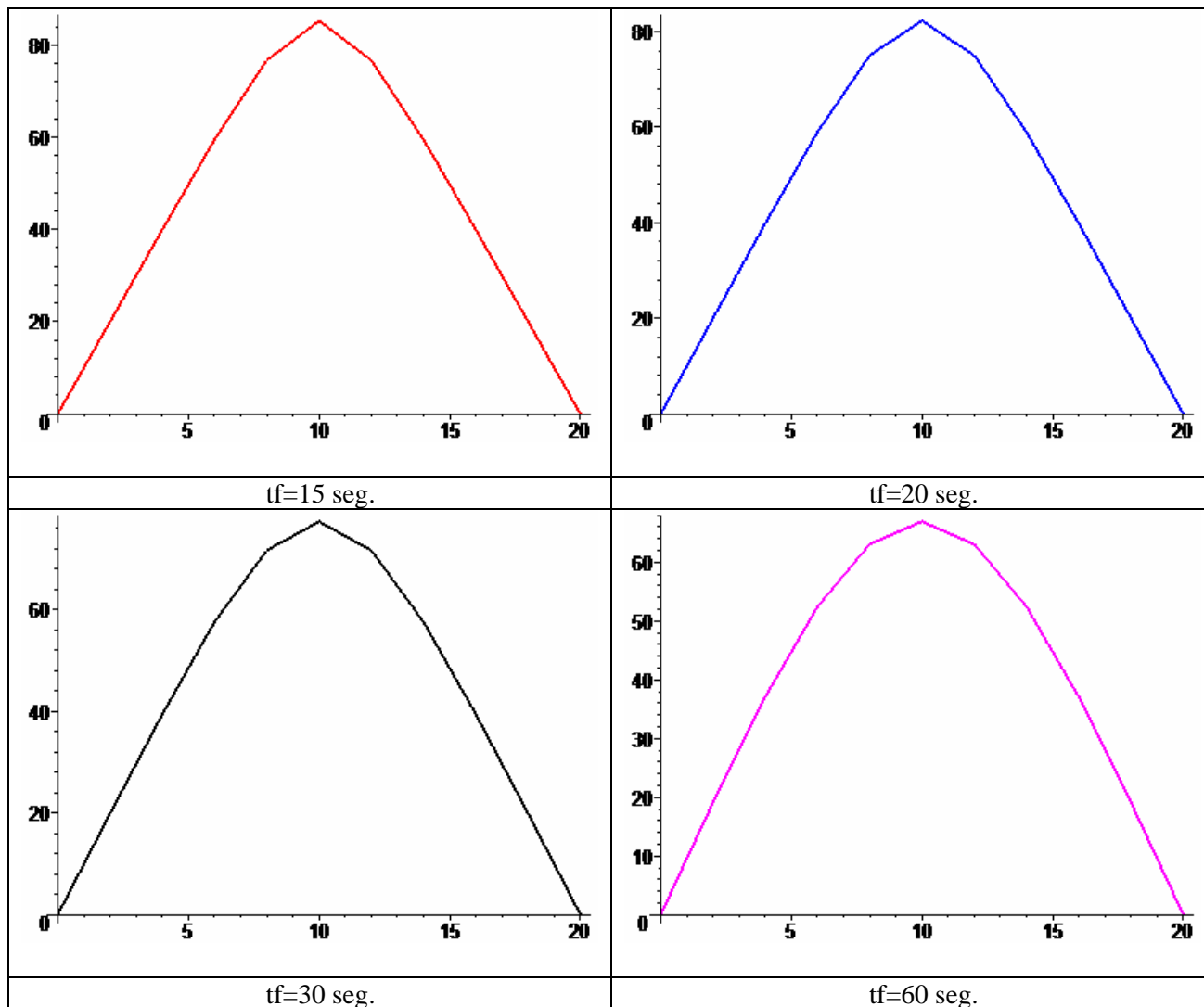
Fig. 3. Perfil de Inestabilidad para $\lambda = 0.51$ y $t_f = 15$ seg. o $t_f = 30$ seg.

Tabla 2. Comparación de resultados con la solución analítica.

Explícito para $\Delta x = 4$	Explícito para $\Delta x = 2$	Solución analítica
0	0	0
	15.99	15.86
36.15	30.56	30.27
	42.28	41.82
61.92	49.92	49.31
	52.57	51.91
61.92	49.92	49.31
	42.28	41.82
36.15	30.56	30.27
	15.99	15.86
0	0	0

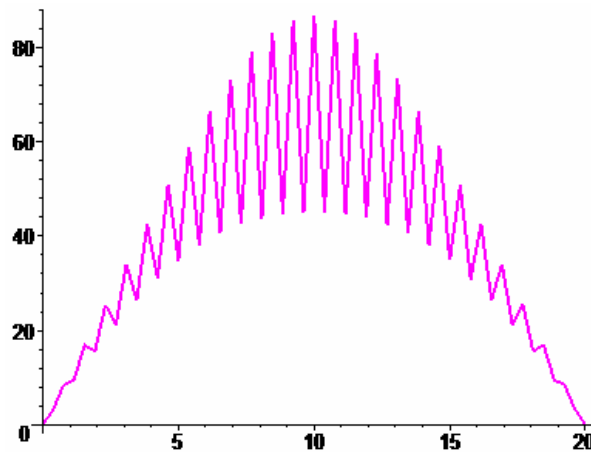


Fig. 4. Perfil de Inestabilidad para $\lambda = 0.51$ y $t_f = 60 \text{ seg}$.

La Tabla 2 permite comparar con la solución analítica los valores de la solución numérica obtenidos para un tiempo $t=120 \text{ seg.}$, con $\Delta t=0.5$ y para intervalos espaciales de longitud $\Delta x=4$ y $\Delta x=2$.

Pero si se sigue afinando el intervalo espacial sin modificar la amplitud del intervalo temporal aparece el fenómeno de inestabilidad en la solución [3]. Esta inestabilidad progresa en el tiempo. La Fig. 3 y la Fig. 4 muestran los resultados de la aplicación del método explícito para $\Delta x=5/13$ y $\Delta t=0.5$.

La solución no es aceptable en este caso. Bastará comparar los valores logrados en el nodo central 83.57 por aplicación del método explícito y 51.91 por aplicación de la solución analítica.

Los errores de cálculo tienden a magnificarse y por lo tanto la solución no es estable. El error de cálculo en una cierta etapa de tiempo aumenta al pasar a la próxima etapa de tiempo entonces el esquema es inestable.

Si modificamos la longitud del intervalo temporal la solución mejora en su precisión, pero esto trae aparejado la necesidad de aumentar el número de cálculos para lograr soluciones aceptables.

Para $\Delta t=0.25$, $\Delta x = 5 / 13$ y $t=60 \text{ seg}$, la Fig. 5 muestra la solución obtenida en la cual no se presenta el efecto de inestabilidad porque en este caso $\lambda=0.256$.

Se puede observar por último, la evolución de los perfiles de temperatura para distintos intervalos de tiempo. La temperatura tiende al estado de equilibrio como lo muestra la Fig. 6.

Para evitar la aparición del fenómeno de inestabilidad se introducen los métodos implícitos.

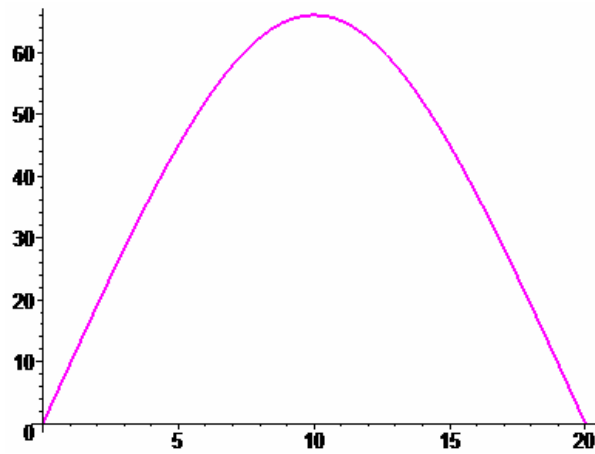
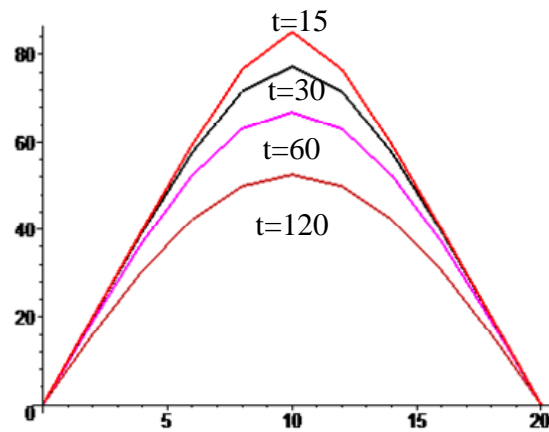
Fig. 5. Perfil de temperatura para $\Delta t = 0.25$ y $t = 60 \text{ seg}$.

Fig. 6. Perfiles de temperatura para distintos tiempos.

2.1.2.2. Método Implícito

En este caso, se reemplazan en (1) las derivadas parciales y se obtiene

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2} \quad (13)$$

La expresión de la temperatura en el nodo (i,j) resulta dada por

$$-\lambda u_{i-1}^{j+1} + (1 - 2\lambda) u_i^{j+1} - \lambda u_{i+1}^{j+1} = u_i^j \quad (14)$$

$$i \in \{1, \dots, N-1\}, j \in N_0 \text{ con } \lambda = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2}$$

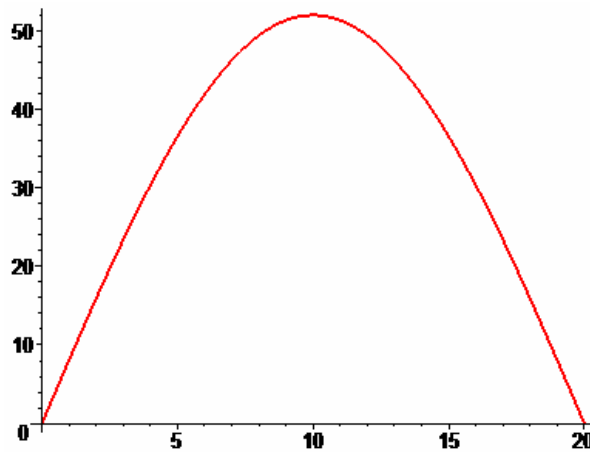


Fig. 7. Perfil de temperatura usando Crank Nicolson.

Tabla 3. Comparación de resultados con la solución analítica.

Posición del Nodo	Solución usando Crank Nicolson	Solución Analítica
Primer Nodo	0	0
Nodo ubicado a ¼ de la longitud	36.49	36.48
Nodo central	51.93	51.91

La ecuación en diferencias (14) contiene varias incógnitas $(u_{i-1}^{j+1}, u_i^{j+1}, u_{i+1}^{j+1})$ por lo que no puede resolverse en forma explícita. Pueden escribirse ecuaciones similares a la (14) para todos los nodos interiores de la grilla [1]. Cuando estas condiciones se combinan con las condiciones de frontera se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas lineales cuya matriz de coeficientes es tridiagonal y puede resolverse por distintos métodos.

Un método implícito es el método de Crank Nicolson, el cual tiene un orden de aproximación igual a $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$. Este método tiene la ventaja de ser incondicionalmente estable, es decir no aparece el fenómeno de inestabilidad en la solución que se vio para el método explícito. La Fig. 7 muestra el perfil de temperatura logrado bajo las condiciones que introdujeron inestabilidad en el esquema explícito. Es decir para $\Delta x=5/13$ y $\Delta t=0.5$ y para $t=120$ seg.

La Tabla 3 permite comparar los valores logrados utilizando este método con la solución analítica. Como puede observarse allí, se logra una buena aproximación.

2.1.3. Convergencia y Estabilidad

El error de aproximación para el esquema explícito es $O(\Delta t + \Delta x^2)$ y el implícito de Crank Nicolson tiene un error del orden de $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$. Si la solución de la ecuación en diferencias tiende a la solución de la ecuación diferencial original cuando $\Delta t \rightarrow 0$ y $\Delta x \rightarrow 0$; el esquema en diferencias es convergente [1,2].

Si el error de cálculo producido en una cierta etapa de tiempo disminuye o al menos no aumenta al pasar a la próxima etapa de tiempo, el esquema es estable.

Se puede probar que el esquema implícito es incondicionalmente estable mientras que el esquema explícito no [4,5]. La convergencia y estabilidad de un esquema explícito depende del tamaño de los intervalos de tiempo y de espacio. Para $\lambda \leq 0.5$ el método explícito es convergente y estable [1].

3. CONCLUSIONES

Usando como motivación un ejemplo sencillo de aplicación de la ecuación de difusión, se han podido comparar la aplicación de distintos métodos para su solución. Se presentaron los métodos numéricos explícito e implícito con sus ventajas y desventajas en cuanto a la estabilidad de cada uno.

El usuario puede seleccionar el método de solución de acuerdo con las necesidades requeridas. Es decir advirtiendo el problema de inestabilidad se puede seleccionar el método deseado eligiendo la longitud del intervalo espacial y temporal.

Se puede observar que la aplicación de un método implícito permite obtener la solución sin caer en el fenómeno de inestabilidad. Además el método de Crank Nicolson permite una mejor aproximación.

Sin embargo habrán casos en los que un error de aproximación tan estricto puede que no sea necesario y entonces bastará un método explícito con menos cálculos, pero cuidando la estabilidad del esquema.

REFERENCIAS

- [1] Chapra, S., Canale, R., *Métodos Numéricos para Ingenieros*, McGraw-Hill, New York (2007)
- [2] Thomas, J.W., *Numerical Partial Differential Equations*, Springer, New York (1995)
- [3] Berenguer, M.C., de la Torre, L., Oliva, L., Millán, Z., “Experimentando con la Ecuación de Difusión”, III Congreso Internacional de Matemática Aplicada a la Ingeniería y Enseñanza de la Matemática en Ingeniería, Argentina (2005)
- [4] Ascher, U., “Numerical methods for evolutionary differential equations”, *SIAM* (2008)
- [5] Tveito, A., Langtangen, H., Nielsen, B., Cai, X., *Elements of Scientific Computing Volumen 7 de Texts in Computational Science and Engineering*, Springer, New York (2010)
- [6] Gerald, C., Wheatley, P., *Análisis Numérico con Aplicaciones*, Pearson Educación (2000)
- [7] Weinberger, H., *Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales con métodos de variable compleja y de transformaciones integrales*, Reverté (1988)

NUMERICAL SIMULATION. DIFFUSION EQUATION

Abstract – Numerical simulation is an effective tool in applied science, for determining and predicting solutions without experimentation. It allows that the physical processes, that frequently occur at the engineering area, would be shown by mathematical algorithms. Partial differential equations, particularly the diffusion equation, usually need a careful study of numerical methods. It is also important to be careful at the algorithms and the fundamental processes included in the simulation. Numerical simulation and mathematical model differ. While the first is a simulated representation in every moment, the second is a mathematical abstraction of the fundamental equations necessary to analyze a phenomenon. Using a numerical simulation to study a given problem usually requires careful planning to use the mathematical model and algorithms needed to solve it. We can determine the numerical solution of problems which may or may not know its analytical solution. In this article we develop and exemplify model partial differential equations, particularly we study the diffusion equation. This equation was chosen because it has multiple applications in mechanical problems. Using a scientific software, we can develop computing material to compare different methods. We analyzed both, the advantages and disadvantages of its implementation. Conclusions are obtained through out the application of solving methods.

Keywords – Analytical solution, Numerical methods, Diffusion.