



II CAIM 2010
Segundo Congreso Argentino
de Ingeniería Mecánica
San Juan - Noviembre 2010

ECUACIÓN DE DIFUSIÓN y MÉTODOS NUMÉRICOS

Zulma Millán^{*1}, Leonor de la Torre², Laura Oliva³, María Berenguer⁴

^{*1234} *Departamento de Matemática- Facultad de Ingeniería
Universidad Nacional de San Juan
Av. Libertador San Martín 1109 oeste San Juan Argentina*

¹ zmillan@unsj.edu.ar

² etorre@unsj.edu.ar

³ loliva@unsj.edu.ar

⁴ mcbere@unsj.edu.ar

RESUMEN

Se sabe de la importancia que tienen los métodos numéricos en Ingeniería, ya que son una herramienta muy útil que permite determinar la solución numérica de problemas para los cuales puede o no conocerse su solución analítica.

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. Si bien las soluciones analíticas resultan útiles y proporcionan una mayor comprensión del comportamiento de algunos fenómenos, no siempre es posible encontrarlas. Los métodos numéricos proporcionan entonces, una herramienta que permite traducir complicados esquemas matemáticos en operaciones elementales, cuyos resultados pueden ser contrastados con las soluciones analíticas, en los casos en los que éstas existan.

Entendiendo que para alumnos de Ingeniería es importante la simulación de problemas físicos, el uso de la computadora junto a los métodos numéricos con la integración del Álgebra Lineal y del Análisis Matemático, constituye un medio eficiente para iniciarse en el aprendizaje de la programación.

En este trabajo se describe material didáctico desarrollado usando un software científico que, gracias a su accesible sintaxis, permitió elaborar programas simples y sencillos de utilizar. El material diseñado está dirigido a brindar a los alumnos la posibilidad de estudiar, comparar y analizar la aplicación de distintos métodos numéricos.

Palabras Claves: Solución analítica, Métodos numéricos, difusión

1. INTRODUCCIÓN

En problemas de ingeniería es frecuente encontrar modelos matemáticos que incluyen ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. En general, no es posible determinar la solución analítica de las mismas a pesar de que éstas proporcionan una mayor comprensión del comportamiento de algunos fenómenos. Sin embargo, sí podemos encontrar la solución numérica, de ahí la importancia que tienen los métodos numéricos en Ingeniería. Estos proporcionan una herramienta que permite traducir complicados esquemas matemáticos en operaciones elementales, 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.

Este modelo, considerando las condiciones de frontera apropiadas, se puede usar para el estudio de la distribución de temperaturas en una barra cilíndrica de acero sometida al proceso de temple. Para ello se la sumerge en un medio refrigerante adecuado. La longitud de la barra es lo suficientemente grande como para que la pérdida de calor en los extremos de la misma sea despreciable respecto de la pérdida de calor en su superficie lateral. Debido a la simetría del dominio, el flujo de calor es estudiado únicamente sobre el radio de la pieza.

Para que el estudiante 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 para el posterior modelado matemático del proceso de templado.

2.1. Modelo Matemático

Se define la función temperatura como $u(x,t)$ que describe el flujo de calor en un objeto, de material homogéneo, de longitud L a través del tiempo. Se especifican las condiciones en la frontera para $x = 0$ y $x = L$. También se consigna la distribución inicial de temperatura en el objeto $f(x)$, la cual recibe el nombre de condición inicial. Este problema se modela matemáticamente mediante la Ecuación (1):

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & 0 < x < L, \quad t > 0 \\ u(0, t) = 0 & t \geq 0 \\ u(L, t) = 0 & t \geq 0 \\ u(x, 0) = f(x) & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (1)$$

El problema modelado de esta forma recibe el nombre de problema de valores iniciales y de frontera [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 $u(x, t) = X(x) \cdot T(t)$, se reduce (1) 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 la Ecuación (2)

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

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 como lo muestra la Ecuación (3)

$$b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx \quad (3)$$

2.1.2. Solución Numérica

Para la determinación de la solución numérica de (1), 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 Figura 1, cuyos puntos de intersección se denominan nodos. Por simplicidad al nodo (x_i, t_j) se lo designará como (i, j) .

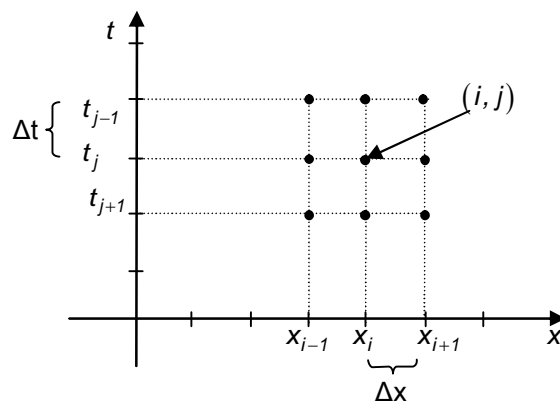


Figura 1 Grilla sobre la que se aplica la discretización de un dominio

- 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 (4)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (4)$$

se sustituye la derivada con respecto al tiempo en el nodo (i, j) por una diferencia progresiva dada por la Ecuación (5)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} \quad (5)$$

y la derivada con respecto a la coordenada espacial x en el mismo nodo se sustituye por una diferencia central dada en la Ecuación (6)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1}^j - 2u_i^j + u_{i-1}^j}{\Delta x^2} \quad (6)$$

La expresión de la Ecuación (7) representa la temperatura en el nodo $(i, j + 1)$:

$$\lambda u_{i-1}^j + (1 - 2\lambda) u_i^j + \lambda u_{i+1}^j = u_i^{j+1} \quad i \in \{1, \dots, N-1\}, \quad j \in N_0 \quad \text{donde } \lambda = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \quad (7)$$

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].

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

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

Con la finalidad de analizar el método explícito y comparar la solución analítica con la numérica, se considera una barra de acero de 15 cm de longitud que se encuentra inicialmente a 300°C y sus extremos permanecen a 300°C y a 50°C respectivamente.

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

En primer lugar se formula usando la Ecuación (8) el modelo matemático que corresponde al problema, resultando:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 & 0 < x < 15, \quad t > 0 \\ u(0, t) = 300 & t \geq 0 \\ u(L, t) = 50 & t \geq 0 \\ u(x, 0) = 300 & 0 \leq x < 15 \end{cases} \quad (8)$$

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 Figura 2 muestra el perfil de temperatura que se logra cuando han transcurrido 60 segundos.

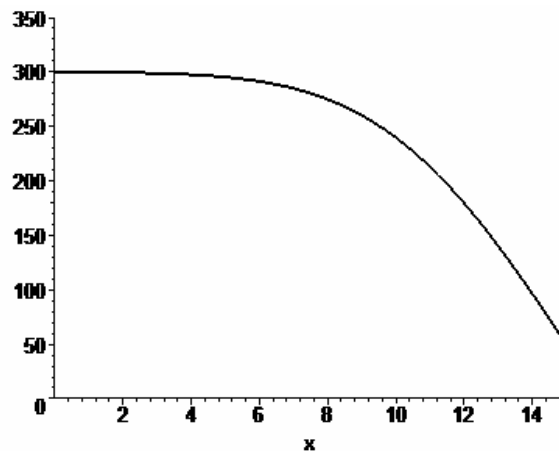


Figura 2 Perfil de Temperatura- Solución Analítica

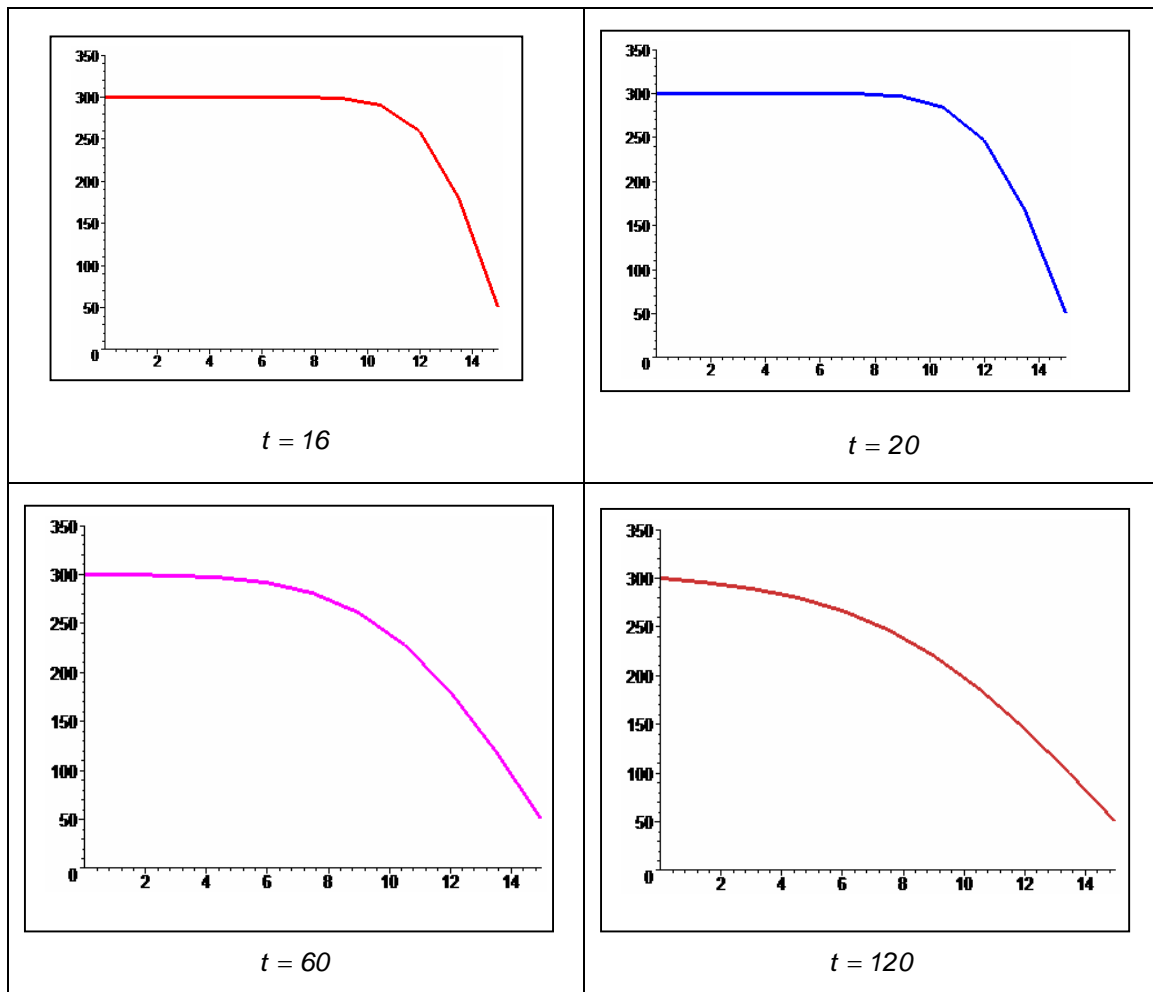
La figura anterior representa la solución analítica para este problema. En muchos casos esta solución no se puede determinar y es por ello que es necesario obtener una solución numérica.

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 $\Delta x = 1.5$ y $\Delta t = 2$. La Tabla 1 muestra la evolución del perfil de temperatura para distintos tiempos.

Tabla 1 Evolución del perfil de temperatura en el tiempo.



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 $O(\Delta t + \Delta x^2)$. La Tabla 2 permite comparar con la solución analítica los valores de la solución numérica obtenidos para un tiempo $t = 6$, con $\Delta t = 2$ y para $\Delta x = 3$ y $\Delta x = 1.5$.

Tabla 2 Comparación de resultados con la solución analítica.

Explícito para $\Delta x = 3$	Explícito para $\Delta x = 1.5$	Solución analítica
300	300	300
	299.64	299.64
297.86	298.80	298.78
	296.63	296.55
289.28	291.52	291.30
	280.81	280.35
258.88	260.91	260.15
	228.17	227.18
181.18	180.55	179.57

	119.36	118.75
50	50	50

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. Las Figuras 3 y 4 muestran los resultados de la aplicación del método explícito para $\Delta x = 0.75$, $\Delta t = 2$, $t = 30$, $t = 60$ respectivamente.

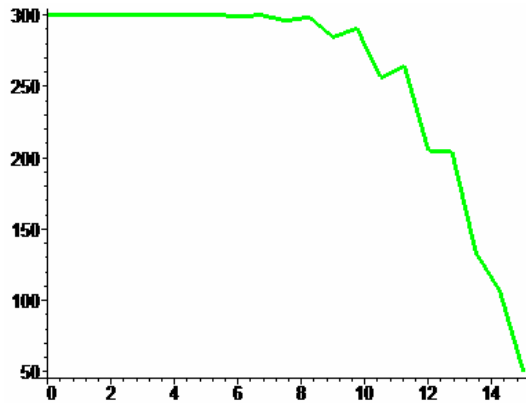


Figura 3 Perfil de Inestabilidad para $\lambda = 0.53$ y $t = 30$

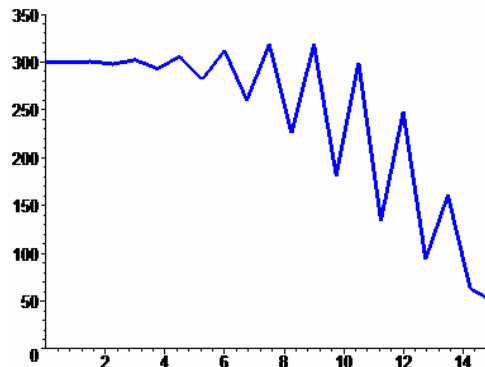


Figura 4 Perfil de Inestabilidad para $\lambda = 0.53$ y $t = 60$

La Tabla 3 muestra la comparación de los valores obtenidos con los de la solución analítica. Puede observarse la propagación del error. La solución lograda no es aceptable debido a la presencia de errores magnificados por la gran cantidad de iteraciones.

Tabla 3 Comparación de resultados con la solución analítica $\lambda = 0.53$ y $t = 60$.

Nodo	Explícito para $\Delta x = 0.75$, $\Delta t = 2$	Solución analítica	Nodo	Explícito para $\Delta x = 0.75$, $\Delta t = 2$	Solución analítica
0	300	300	11	225.55	
1	299.55		12	318.46	260.15
2	300.62	299.64	13	181.11	
3	297.82		14	299.04	227.18
4	302.16	298.78	15	134.36	

5	293.03	
6	305.74	296.55
7	281.74	
8	311.90	291.30
9	259.96	
10	318.57	280.35

16	247.68	179.57
17	93.97	
18	60.76	118.75
19	63.16	
20	50	50

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 $\Delta t = 1$, $\Delta x = 0.75$ y $t = 60$, la Figura 5 muestra la solución obtenida y la Tabla 4 permite comparar los valores de la temperatura en cada nodo con la solución analítica.

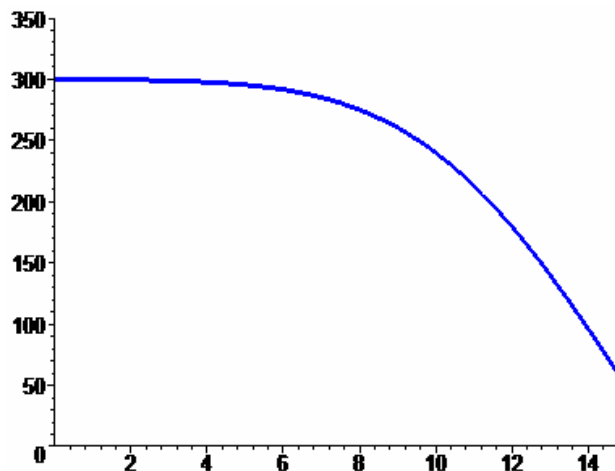


Figura 5 Perfil de temperatura para $\Delta t = 1$ y $t = 60$

Tabla 4 Comparación de resultados con la solución analítica en $t = 60$.

Nodo	Explícito para $\Delta x = 0.75,$ $\Delta t = 1$	Solución analítica
0	300	300
1	299.87	
2	299.68	299.64
3	299.38	
4	298.88	298.78
5	298.06	
6	296.74	296.55
7	294.7	
8	291.61	291.30
9	287.12	
10	280.79	280.35

Nodo	Explícito para $\Delta x = 0.75,$ $\Delta t = 1$	Solución analítica
11	272.13	
12	260.67	260.15
13	245.97	
14	277.7	227.18
15	205.69	
16	179.99	179.57
17	150.9	
18	118.98	118.75
19	85.02	
20	50	50

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 Figura 6.

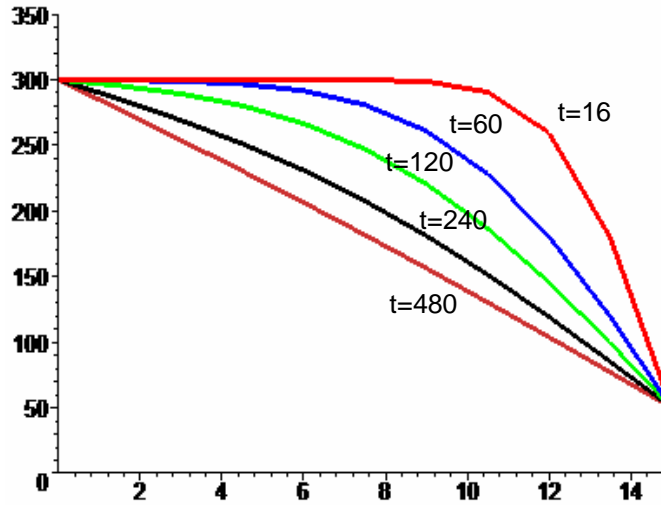


Figura 6 Perfiles de temperatura para distintos tiempos

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

2.1.2.2. Método Implícito

En este caso, se reemplazan en la Ecuación (4) las derivadas parciales definidas en la Ecuación (9)

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2}. \quad (9)$$

La expresión de la temperatura en el nodo (i, j) resulta dada por la Ecuación (10):

$$-\lambda u_{i-1}^{j+1} + (1 - 2\lambda) u_i^{j+1} - \lambda u_{i+1}^{j+1} = u_i^j \quad i \in \{1, \dots, N-1\}, \quad j \in N_0 \quad \text{con} \quad \lambda = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \quad (10)$$

La ecuación en diferencias (10) 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 (4) 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 Figura 7 muestra el perfil de temperatura logrado bajo las condiciones que introdujeron inestabilidad en el esquema explícito. Es decir para $\Delta x = 0.75$, $\Delta t = 2$ y $t = 60$

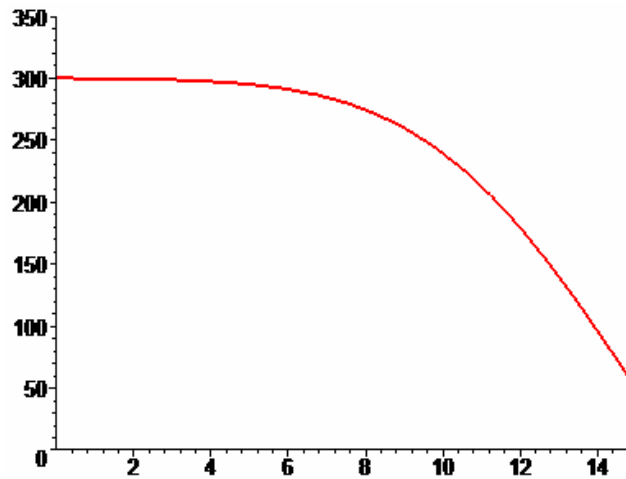


Figura 7 Perfil de temperatura usando Crank Nicolson

La Tabla 5 permite comparar los valores logrados utilizando este método con la solución analítica. Como puede observarse allí, se logra una buena aproximación.

Tabla 5 Comparación de resultados con la solución analítica.

Nodo	Implícito $\Delta x = 0.75$ $\Delta t = 2, t = 60$	Solución analítica
0	300	300
1	299.83	299.85
2	299.60	299.64
3	299.25	299.31
4	298.69	298.78
5	297.78	297.92
6	296.4	296.55
7	294.27	294.45
8	291.1	291.3
9	286.54	286.75
10	280.15	280.35

Nodo	Implícito $\Delta x = 0.75$ $\Delta t = 2, t = 60$	Solución analítica
11	271.47	271.64
12	260.02	260.15
13	245.36	245.44
14	227.16	227.18
15	205.23	205.21
16	179.63	179.57
17	150.64	150.57
18	118.81	118.75
19	84.94	84.9
20	50	50

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. 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 problema de templado de acero, se ha mostrado la obtención de la solución analítica de un ejemplo sencillo de aplicación de la ecuación de difusión, como así también los métodos numéricos explícito e implícito con sus ventajas y desventajas en cuanto a la estabilidad de cada uno.

Es importante destacar la conexión entre el ciclo básico de carreras de ingeniería y el ciclo superior, dado que situaciones como las aquí planteadas brindan al alumno la posibilidad de trabajar con un software científico, diseñando programas sencillos y abren el camino al estudio de problemas aplicados a su especialidad con mayor nivel de complejidad.

Los alumnos pueden diseñar material computacional que permita experimentar cambiando datos y condiciones del problema, analizando la influencia de estas variaciones tanto numérica como gráficamente poniendo énfasis en la interpretación de resultados y en la obtención de conclusiones.

4. REFERENCIAS

- [1] S. Chapra, R. Canale, *Métodos Numéricos para Ingenieros*, Ed. McGraw-Hill, 2003.
- [2] J.W. Thomas, *Numerical Partial Differential Equations*, Ed. Springer, 1995.
- [3] M.C. Berenguer, L. de la Torre, L. Oliva, Z. Millán, *Experimentando con la Ecuación de Difusión*, III Congreso Internacional de Matemática Aplicada a la Ingeniería y Enseñanza de la Matemática en Ingeniería, 2005.