

3. Ecuación de difusión

En este capítulo usaremos la ecuación de difusión como vehículo para introducir dos tipos de esquemas: explícitos e implícitos. Se estudiará con especial atención la estabilidad y exactitud de los esquemas. Desde un punto de vista computacional la ecuación de difusión contiene los mismos mecanismos de disipación de los que se encuentra en problemas de flujos con viscosidad. Consecuentemente, las técnicas computacionales que son efectivas para la ecuación de difusión proveerán una guía para elegir algoritmos apropiados para flujos viscosos.

3.1 Métodos explícitos

En los métodos explícitos aparece únicamente una sola incógnita, por ejemplo T^{n+1}_j , en el lado izquierdo de la fórmula algebraica resultante de la discretización.

3.1.1 Esquema FTCS

Las propiedades de este esquema fueron estudiadas en el capítulo 2. La figura 3.1 muestra un esquemático del esquema

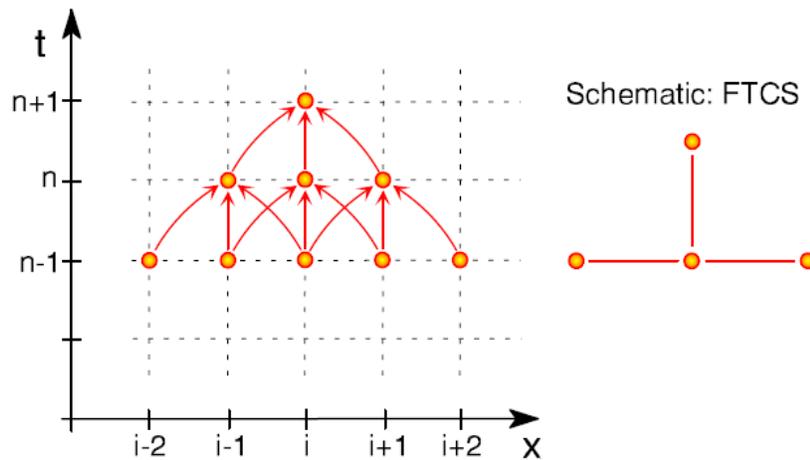


Figura 3.1 – Esquema FTCS.

3.1.2 Esquema de Richardson y DuFort-Frankel

Richardson propuso una fórmula de diferencias finitas centrada en el espacio y centrada en el tiempo. O sea, la ecuación de difusión queda

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2 \Delta t} - \alpha \frac{(T_{j-1}^n - 2T_j^n + T_{j+1}^n)}{\Delta x^2} = 0 \quad (3.1)$$

A pesar de que el esquema es de $O(\Delta x^2, \Delta t^2)$ un análisis de estabilidad de von Neumann indica que el esquema es incondicionalmente inestable para $s > 0$, por lo que el esquema no tiene uso práctico. No

obstante, ese esquema puede ser modificado para producir un algoritmo estable. Esto se logra reemplazando T_j^n en (3.1) por $0.5(T_j^{n+1} + T_j^{n-1})$. La ecuación resultante es

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2\Delta t} - \alpha \frac{(T_{j-1}^n - (T_j^{n+1} + T_j^{n-1}) + T_{j+1}^n)}{\Delta x^2} = 0 \quad (3.2)$$

La ecuación (5.2) se conoce como esquema de DuFort-Frankel y puede ser manipulada para dar el siguiente algoritmo

$$T_j^{n+1} = \frac{2s}{1+2s} (T_{j-1}^n + T_{j+1}^n) + \frac{1-2s}{1+2s} T_j^{n-1} \quad (3.3)$$

Notar que este esquema es un esquema de tres niveles en el tiempo, excepto para $s=0.5$ que se reduce al FTCS. En un esquema de tres niveles es necesario en la integración guardar los dos niveles anteriores y para el paso inicial es necesario tener otro esquema de dos niveles.

La aplicación del análisis de estabilidad de von Neumann a (3.3) produce un error de amplificación G mostrado en la tabla 3.1. Como $|G| \leq 1$ para todo valor de θ con $s > 0$ se sigue que el esquema de DuFort-Frankel es estable para cualquier valor de Δt . Por otro lado, una expansión de Taylor de la solución exacta sustituido en (3.2) produce el siguiente resultado

$$\left[\frac{\partial \hat{T}}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial x^2} + \alpha \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial t^2} \right]_j^n + O(\Delta t^2, \Delta x^2) = 0 \quad (3.4)$$

Por lo tanto para que exista consistencia $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow 0$ a medida que se refina la grilla por lo que debe valer $\Delta t \ll \Delta x$. No obstante, $s\Delta t = \alpha(\Delta t/\Delta x)^2$ y se espera que s sea de orden $O(1)$ para problemas de difusión. Así el esquema de DuFort-Frankel es consistente con la ecuación de difusión pero será poco exacta para $s\Delta t$ grande. Desde un punto de vista práctico este esquema tiene una restricción efectiva en el tamaño de Δt que aparece por una restricción de exactitud y no por una restricción de estabilidad, como en el caso del esquema FTCS.

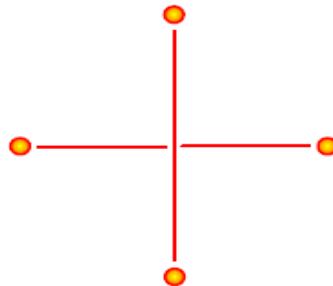
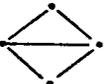


Figura 3.2 - Representación simbólica de DuFort-Frankel.

Table 7.1. Algebraic (discretised) schemes for the diffusion equation $\partial T / \partial t - \alpha \partial^2 T / \partial x^2 = 0$

Scheme	Algebraic form	Truncation error* (E) (leading term)	Amplification factor $G(\theta = m\pi\Delta x)$	Stability restrictions	Remarks
FTCS 	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} T_j^n = 0$	$\alpha(\Delta x^2/2) \left(s - \frac{1}{6} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$1 - 4s \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)$	$s \leq 0.5$	$s = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ $L_{xx} = \frac{1}{\Delta x^2} [1, -2, 1]$
DuFort-Frankel 	$\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2\Delta t} - \alpha \frac{[T_j^n - T_j^{n-1}]}{\Delta x^2} = 0$ $-(T_j^{n-1} + T_j^{n+1}) + T_j^n = 0$	$\alpha \Delta x^2 \left(s^2 - \frac{1}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{2s \cos \theta + (1 - 4s^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}{(1 + 2s)}$	None	$\Delta T_j^{n+1} = T_j^{n+1} - T_j^n$
Crank-Nicolson 	$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} \left(\frac{T_j^n + T_j^{n+1}}{2} \right) = 0$	$-\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{1 - 2s \sin^2(\theta/2)}{1 + 2s \sin^2(\theta/2)}$	None	
Three-level fully implicit 	$\frac{3 \Delta T_j^{n+1}}{2 \Delta t} - \frac{1 \Delta T_j^n}{2 \Delta t} - \alpha L_{xx} T_j^{n+1} = 0$	$-\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{1 \pm \frac{1}{2} [1 \pm \frac{1}{6} + s(1 - \cos \theta)]^{1/2}}{2 [1 + \frac{1}{2} s(1 - \cos \theta)]}$	None	$\Delta T_j^n = T_j^n - T_j^{n-1}$
Linear F.E.M. / Crank-Nicolson 	$M_x \frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha L_{xx} \left(\frac{T_j^n + T_j^{n+1}}{2} \right) = 0$	$\alpha \left(\frac{\Delta x^2}{12} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4}$	$\frac{(2 - 3s) + \cos \theta (1 + 3s)}{(2 + 3s) + \cos \theta (1 - 3s)}$	None	$M_x = \{ \frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6} \}$

*The truncation error has been expressed solely in terms of Δx and x -derivatives as in the modified equation method (Section 9.2.2). Thus the algebraic scheme is equivalent to $\partial T / \partial t - \alpha \partial^2 T / \partial x^2 + E(T) = 0$

Tabla 3.1 – Esquemas usados para resolver la ecuación de difusión.

3.1.2 Esquema de 3 niveles

Se puede escribir la forma general de un esquema de discretización 3 niveles de la ecuación de difusión de la siguiente forma

$$aT_j^{n+1} + bT_j^n + cT_j^{n-1} - (dL_{xx}T_j^n + eL_{xx}T_j^{n-1}) = 0 \quad (3.5)$$

donde

$$L_{xx}T_j = (T_{j-1} - 2T_j + T_{j+1})/\Delta x^2$$

Los parámetros a,b,c,d,e pueden ser determinados expandiendo cada término en (3.5) como una serie de Taylor alrededor del nodo (j,n) y requiriendo que (3.5) sea consistente con la ecuación de difusión. El procedimiento permite que (3.5) sea reescrita en función de solamente 2 parámetros γ y β en lugar de 5. Así, (3.5) queda de la forma

$$\frac{(1+\gamma)(T_j^{n+1} - T_j^n)}{\Delta t} - \frac{\gamma(T_j^n - T_j^{n-1})}{\Delta t} - \alpha[(1-\beta)L_{xx}T_j^n + \beta L_{xx}T_j^{n-1}] = 0 \quad (3.6)$$

Una expansión de Taylor de (3.6) alrededor del nodo (j,n) indica consistencia y un error de truncamiento dado por

$$E_j^n = \alpha s \Delta x^2 \frac{\partial^4 \bar{T}}{\partial x^4} \left(0.5 + \gamma + \beta - \frac{1}{12s} \right) + O(\Delta x^4) \quad (3.7)$$

En (3.7) todas las derivadas temporales fueron reemplazadas por derivadas espaciales usando la ecuación de difusión. Así, el error de truncamiento es de $O(\Delta x^4)$ si

$$\beta = -0.5 - \gamma + \frac{1}{12s} \quad (3.8)$$

Entonces, reemplazando (3.8) en (3.6) se obtiene el algoritmo

$$T_j^{n+1} = \left(\frac{1+2\gamma}{1+\gamma} \right) T_j^n - \left(\frac{\gamma}{1+\gamma} \right) T_j^{n-1} + \left(\frac{s}{1+\gamma} \right) L'_{xx} ((1-\beta)T_j^n + \beta T_j^{n-1}) \quad (3.9)$$

donde

$$L'_{xx}T_j = T_{j-1} - 2T_j + T_{j+1}$$

Este esquema es solo condicionalmente estable, con el valor máximo de s para la estabilidad dependiendo de γ . Esto se puede establecer formalmente aplicando el análisis de estabilidad de von Neumann a (3.9), lo cual resulta en la siguiente ecuación para G

$$G^2(1+\gamma) - G[1+2\gamma+2s(1-\beta)(\cos\theta-1)] + [\gamma - 2\beta s(\cos\theta-1)] = 0 \quad (3.10)$$

Para estabilidad es necesario que $|G| \leq 1$ para todos los valores de θ . Esta condición genera un mapa de estabilidad en función de γ y s mostrado en la figura 3.3.

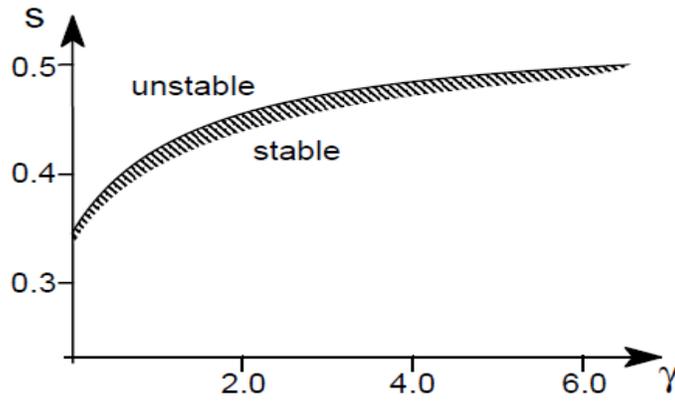


Figura 3.3 – Mapa de estabilidad de (3.10)

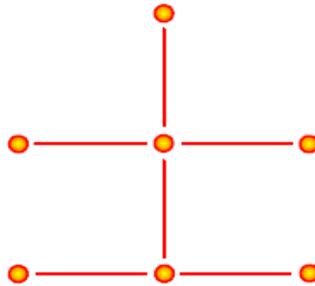


Figura 3.4 – Representación simbólica del esquema general de 3 niveles.

El programa **diffex.f** incorpora los tres métodos explícitos para resolver la ecuación de difusión. Ver práctico.

3.2 Esquemas implícitos

Para esquemas implícitos el término espacial $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ se evalúa, al menos parcialmente, en el nivel temporal (n+1). En la práctica esto resulta en el acoplamiento de las ecuaciones en cada nodo (j,n+1) en el nivel temporal (n+1) y se debe resolver un sistema de ecuaciones algebraicas para integrar en el tiempo.

3.2.1 Esquema implícito (“fully implicit”)

El esquema implícito mas simple para la ecuación de difusión es equivalente al FTCS pero la derivada segunda espacial se calcula en el tiempo (n+1)

$$\frac{(T_j^{n+1} - T_j^n)}{\Delta t} - \frac{\alpha(T_{j-1}^{n+1} - 2T_j^{n+1} + T_{j+1}^{n+1})}{\Delta x^2} = 0 \quad (3.11)$$

Para generar un algoritmo útil escribimos (5.11) de la forma

$$-sT_{j-1}^{n+1} + (1 + 2s)T_j^{n+1} - sT_{j+1}^{n+1} = T_j^n \quad (3.12)$$

Una expansión de Taylor alrededor del nodo (j,n) indica que el esquema tiene un error de truncamiento

$$E_j^n = -\frac{\Delta t}{2} \left(1 + \frac{1}{6s}\right) \left[\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial t^2}\right]_j^n + O(\Delta t^2, \Delta x^4) \quad (3.13)$$

que tiene un orden igual al del esquema FTCS explícito con $s \neq 1/6$ a pesar que la constante de multiplicación es grande. Aplicando el método de von Neumann para estudiar la estabilidad produce la siguiente expresión para el factor de amplificación

$$G = [1 + 2s(1 - \cos \theta)]^{-1} \quad (3.14)$$

La ecuación (3.14) expresa que para cualquier valor de θ , si $s > 0$ entonces $|G| \leq 1$ lo cual indica que el esquema es incondicionalmente estable. Así, el esquema implícito es una mejora sustancial sobre el FTCS. No obstante, para resolver (3.12) es necesario considerar todos los nodos j y sus correspondientes ecuaciones. Por lo tanto se tiene una matriz de ecuaciones escrita para las incógnitas T_j^{n+1}

$$\begin{bmatrix} (1+2s) & -s & & & \\ -s & (1+2s) & -s & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & & & -s & (1+2s) & -s \\ & & & \dots & \dots & \dots \\ & & & & -s & (1+2s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ \dots \\ T_j^{n+1} \\ \dots \\ T_{j-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_2 \\ d_3 \\ \dots \\ d_j \\ \dots \\ d_{j-1} \end{bmatrix} \tag{3.15}$$

donde

$$d_2 = T_2^n + sT_1^{n+1}, \tag{3.16}$$

$$d_j = T_j^n, \quad d_{j-1} = T_{j-1}^n + sT_j^{n+1},$$

siendo T_1^{n+1} , T_j^{n+1} conocidas de las condiciones de borde. El sistema de ecuaciones es tri-diagonal y puede resolverse usando el algoritmo de Thomas.

El algoritmo de Thomas se puede representar de acuerdo a la figura 3.5

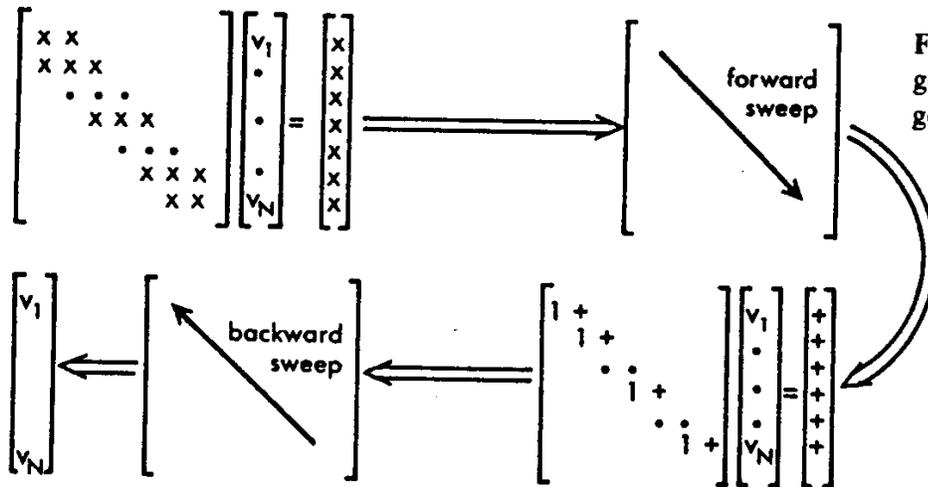


Fig. 6.17. The Thomas algorithm for solving a tridiagonal system of equations

Figura 3.5 – Algoritmo de Thomas.

El método consiste en reducir el sistema tri-diagonal a un sistema bidiagonal superior. Para ello se procede en forma recursiva comenzando desde $j=2$. Luego, el sistema bidiagonal resultante se puede resolver de manera muy fácil por medio de sustitución hacia atrás.

El primer paso en el algoritmo es manipular la matriz de tal forma que se normaliza la diagonal y se encuentran nuevos coeficientes c_j dados por

$$c_2 = \frac{-s}{(1+2s)}, \quad d'_2 = \frac{d_2}{(1+2s)} \tag{3.17}$$

$$c_j = \frac{-s}{(1+2s)+sc_{j-1}}, \quad d'_j = \frac{d_j + sd'_{j-1}}{(1+2s)+sc_{j-1}}, \quad \text{para } j=3,4,\dots,J-1$$

El segundo paso consiste en una sustitución hacia atrás

$$T_{J-1}^{n+1} = d'_{J-1} \tag{3.18}$$

$$T_j^{n+1} = d'_j - T_{j+1}^{n+1} c_j \quad \text{para } j=J-2, J-3, \dots, 2$$

El algoritmo de Thomas es bastante económico, solo requiere $5(J-2)-4$ operaciones para resolver el sistema de ecuaciones (3.15). Esta metodología es parte de los algoritmos que se conocen como “fast solvers” y resulta en un trabajo computacional que es apenas 3 veces el del método explícito (FTCS) cuando se utiliza este algoritmo. La verdadera importancia del método implícito radica en que los pasos de tiempo pueden tomarse significativamente mayores a los permitidos por el método explícito, lo cual implica un ahorro en el costo computacional.

3.2.2 Esquema de Crank-Nicholson

Otro algoritmo explícito para resolver la ecuación de difusión es el esquema de Crank-Nicholson

$$\frac{(T_j^{n+1} - T_j^n)}{\Delta t} - \alpha(0.5L_{xx} T_j^n + 0.5L_{xx} T_j^{n+1}) = 0 \tag{3.19}$$

donde

$$L_{xx} T = \frac{T_{j-1} - 2T_j + T_{j+1}}{\Delta x^2} \tag{3.20}$$

Efectivamente este esquema evalúa la derivada espacial en el promedio de los niveles de tiempo n y $(n+1)$, o sea en el nivel $(n+1/2)$. Si se realiza una expansión de Taylor alrededor de $(j, n+1/2)$, se demuestra que (3.19) es consistente y tiene un error de truncamiento de $O(\Delta x^2, \Delta t^2)$ (ver tabla 3.1). Esto es una mejora sustantiva con respecto al FTCS y al esquema “fully implicit” cuyos errores eran $O(\Delta t)$. Además, un análisis de estabilidad de von Neumann indica que el esquema de Crank-Nicholson es incondicionalmente estable (ver tabla 3.1).

Escribiendo (3.19) para que quede en forma útil se obtiene

$$\begin{aligned}
 & -0.5s T_{j-1}^{n+1} + (1+s) T_j^{n+1} - 0.5s T_{j+1}^{n+1} \\
 & = 0.5s T_{j-1}^n + (1-s) T_j^n + 0.5s T_{j+1}^n ,
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Nuevamente, considerando todos los nodos espaciales (3.21) produce un sistema de ecuaciones que puede ser resuelto usando el algoritmo de Thomas. Debido a su menor error de truncamiento el esquema de Crank-Nicholson es muy usado para resolver eficientemente EDPs parabólicas.

Una generalización de (3.19) puede ser obtenida escribiendo

$$\frac{\Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \alpha [(1-\beta) L_{xx} T_j^n + \beta L_{xx} T_j^{n+1}] = 0 , \tag{3.22}$$

donde $\Delta T_j^{n+1} = T_j^{n+1} - T_j^n$ y $0 \leq \beta \leq 1$. Si $\beta=0$ se recupera el esquema FTCS; si $\beta=0.5$ se recupera el esquema de Crank-Nicholson; si $\beta=1$ se recupera el esquema "fully implicit".

Un análisis de estabilidad de von Neumann indica que la solución puede ser estable en las siguientes condiciones

$$\begin{aligned}
 \Delta t & \leq \frac{0.5 \Delta x^2}{\alpha(1-2\beta)} & \text{if } 0 \leq \beta < 1/2 \\
 \text{no restriction} & & \text{if } 1/2 \leq \beta \leq 1 .
 \end{aligned}$$

Se observa que el esquema de Crank-Nicholson está en la frontera del régimen incondicionalmente estable. Por esa razón en algunos casos este esquema produce oscilaciones espúreas en la solución y no converge rápidamente. Otros esquemas de 3 niveles son más efectivos.

3.2.3 Esquema generalizado de 3 niveles

Para la ecuación de difusión un esquema generalizado de 3 niveles que incluye (3.22) puede escribirse como

$$\frac{(1+\gamma) \Delta T_j^{n+1}}{\Delta t} - \frac{\gamma \Delta T_j^n}{\Delta t} - \alpha [(1-\beta) L_{xx} T_j^n + \beta L_{xx} T_j^{n+1}] = 0 \tag{3.23}$$

donde $\Delta T_j^n = T_j^n - T_j^{n-1}$.

Un esquema particularmente efectivo de 3 niveles está dado por la elección: $\gamma=0.5$, $\beta=1.0$. Este esquema tiene un error de truncamiento de $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$, es incondicionalmente estable, puede ser resuelto usando el algoritmo de Thomas y amortigua las oscilaciones espúreas. A este esquema lo llamaremos esquema de 3 niveles fully implicit (3LFI). Ver table 3.1 para sus propiedades.

3.3 Condiciones de borde

Los algoritmos desarrollados hasta ahora son apropiados para los nodos internos. Para usar esas fórmulas en los nodos frontera se requiere conocimiento de la solución fuera del dominio computacional. Por lo tanto es necesario desarrollar fórmulas alternativas en las fronteras.

Hasta ahora hemos impuesto condiciones de borde de tipo Dirichlet, o sea que se imponen valores de la variable en la frontera. Por ejemplo, para el caso de la ecuación de difusión mostrado en la figura 3.6

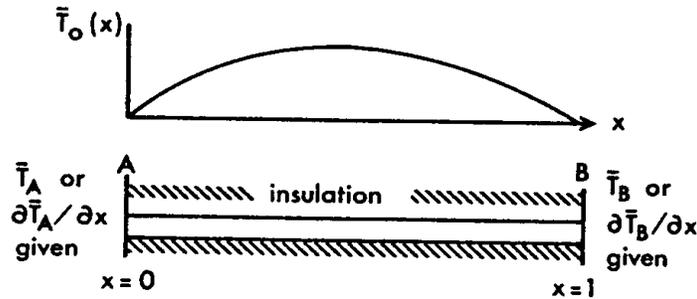


Figura 3.6

se impuso en $x=0$ (en A)

$$\bar{T}(0, t) = b(t) \tag{3.24}$$

En la práctica b es en general constante en el tiempo.

Entonces, en el caso de condiciones de Dirichlet es relativamente fácil imponer las condiciones de borde. Por ejemplo para el esquema FTCS si se requiere el valor de T_1^n , se sustituye $T_1^n = b^n$.

Por otro lado, podría haber sido posible imponer como condición de borde la derivada espacial de T en $x=0$, o sea una condición de tipo Neumann

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial x}(0, t) = c(t) \tag{3.25}$$

donde c es muchas veces una constante. En estos casos es mas dificultoso imponer las condiciones de borde. Es posible introducir una expresión de diferencias finitas usando información únicamente de dentro del dominio computacional de la forma

$$\frac{T_2^{n+1} - T_1^{n+1}}{\Delta x} = c^{n+1} \tag{3.26}$$

En un caso típico se usa el esquema FTCS para obtener el valor de T_j^{n+1} en todos los nodos interiores, $j=2,3,\dots,J-1$. En la frontera, $x=0$, (3.26) da

$$T_1^{n+1} = T_2^{n+1} - c^{n+1} \Delta x \tag{3.27}$$

El mayor problema de (3.27) es que tiene un error de truncamiento de $O(\Delta x)$ mientras que el esquema FTCS tiene un error $O(\Delta x^2)$. Como la ecuación de difusión es parabólica, la menor exactitud de la solución en la frontera se propagará hacia el interior afectando la exactitud de la solución en todo el dominio. Por lo tanto es deseable encontrar una representación de la condición de frontera de Neumann que tenga la misma exactitud que la expresión usada para los nodos interiores. Esto puede hacerse de la siguiente forma. Escribamos (3.25) como

$$\frac{T_2^n - T_0^n}{2\Delta x} = c^n \tag{3.28}$$

la cual incluye un nodo ficticio $(0,n)$ fuera del dominio computacional. Si extendemos el dominio computacional para incluir el punto $(0,n)$ podemos utilizar la ecuación de los nodos interiores para eliminar T_0^n .

Por ejemplo aplicando FTCS para $(1,n)$ y usando (3.28) se obtiene

$$T_1^{n+1} = -2s\Delta x c^n + (1 - 2s) T_1^n + 2s T_2^n \tag{3.29}$$

y el error de truncamiento es $O(\Delta t, \Delta x^2)$ en todos lados del dominio.

Si se usa un esquema implícito en el interior, por ejemplo el “fully implicit” la ecuación (3.28) debe ser evaluada en tiempo $(n+1)$ y combinada con (3.12). Esto resulta en

$$(1 + 2s) T_1^{n+1} - 2s T_2^{n+1} = T_1^n - 2s\Delta x c^{n+1} \tag{3.30}$$

que es la primera ecuación en el sistema tridiagonal equivalente a (3.15) y puede ser resuelto por un algoritmo de Thomas. La figura 3.7 ilustra los casos explícito e implícito.

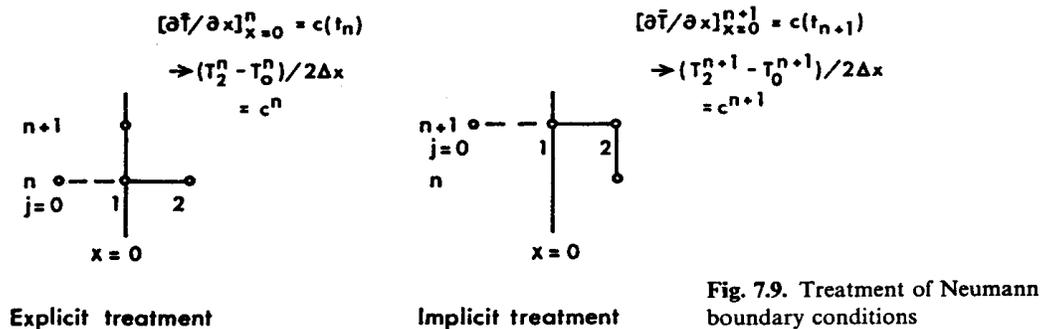


Figura 3.7

El uso de diferentes fórmulas en las fronteras resultará en diferentes propiedades de estabilidad. Si bien el método de von Neumann es estrictamente aplicable en los puntos interiores solamente se ha sugerido que también puede aplicarse en los bordes, al menos heurísticamente. Alternativamente, es posible usar el método de la matriz para estudiar la estabilidad.

Bibliografía principal

- Computational Techniques for Fluid Dynamics 1, Fletcher.