Laboratorio n°3 :
MA5302.- Laboratorio de Análisis Numérico de EDP

Profesores.- Pascal Frey, Axel Osses
Auxiliares.- Nicolás Carreño (ncarrenog@gmail.com), Cristóbal Quiñinao (toba@dim.uchile.cl)

Tema del Laboratorio : Diferencias Finitas

Descripción : En el presente laboratorio se pretende estudiar una Ecuación de Transporte y Difusión mediante el Método de las Diferencias Finitas, y aplicar los conceptos de Difusión Numérica y condición CFL.

Considere la ecuación :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) + \frac{\partial}{\partial x}(c(x)u(t,x)) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\right) = 0 \tag{1}$$

donde $u(t,x)$ es una función escalar que representa la concentración de una especie química en una atmósfera que suponemos aquí unidimensional, $c(x) > 0$ representa la velocidad del viento y $\kappa(x) > 0$ es un coeficiente de mezcla turbulenta, que por simplicidad consideraremos constantes.

Considere una equipartición del espacio, de largo L, con paso $h = L/(N+1)$, con $N \in \mathbb{N}$, con lo que los puntos de discretización son $x_j = j\,h$, $j \in \{1,\dots,N+1\}$. Asimismo, considere un paso temporal igual a Δt, con lo que el tiempo se discretiza como $t_n = n\,\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$. Denotamos por u_j^n una aproximación de $u(t_n, x_j)$.

Ejercicio 1

(a) Justifique el siguiente esquema explícito utilizado para discretizar la ecuacion (1). Específicamente demuestre que es consistente con la ecuación (1) :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} - \kappa\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = 0, \quad \forall j = 1\dots N. \tag{2}$$

(b) Haga lo anterior para el siguiente esquema implícito :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c\frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} - \kappa\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} = 0, \quad \forall j = 1\dots N. \tag{3}$$

Ejercicio 2 Considere un dominio espacial de $100[km]$, condiciones de borde periódicas ($u(t,0) = u(t,L)$) y una velocidad del viento de $c = 5\left[\frac{m}{s}\right]$. Suponga que inicialmente, la sustancia química tiene una distribución gaussiana dada por

$$u_0(x) = \overline{u}e^{-\frac{(x-50)^2}{8}},$$

donde x es la variable espacial expresada en $[km]$ con una amplitud de $\overline{u} = 10^{12}\left[\frac{moleculas}{cm^3}\right]$. (Note que como la ecuación es lineal puede tomar $\overline{u} = 1$ y luego reescalar la solución).

(a) Fijando $\kappa = 0$, demuestre que el esquema (2) se puede escribir como el siguiente sistema :

$$\begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & 1 & \gamma & \dots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \gamma \\ 0 & \dots & 0 & \alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha u_N^n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \gamma u_1^n \end{pmatrix}$$

con $\alpha = \frac{c\Delta t}{2h}$ y $\gamma = -\frac{c\Delta t}{2h}$.

(b) Implemente el esquema anterior (explícito) y experimente la condición CFL para distintos valores de Δt ($h = 5[km]$ fijo).

(c) Fijando $\kappa = 0$, demuestre que el esquema (3) se puede escribir como el siguiente sistema :

$$\begin{pmatrix} 1 & \gamma & 0 & \dots & \alpha \\ \alpha & 1 & \gamma & \dots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \gamma \\ \gamma & \dots & 0 & \alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N^n \end{pmatrix}$$

con $\alpha = -\frac{c\Delta t}{2h}$ y $\gamma = \frac{c\Delta t}{2h}$.

(d) Implemente ahora el esquema implícito, tome $\Delta t = 5[s]$ y simule 10 revoluciones en la grilla. En cada revolución compare los valores que obtiene de las gaussianas y comente el efecto de la difusión numérica (a pesar de que $\kappa = 0$).

(e) Tome ahora $\kappa > 0$ en ambos esquemas y experimente.

Ejercicio 3 Repita el ejercicio anterior para una condición inicial que no es regular y presente discontinuidades, por ejemplo tome u_0 de la siguiente manera :

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \left[\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right) \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

Registre los problemas numéricos encontrados en la presente implementación. Si lo desea, utilice una malla no equiespaciada que se refine cerca de las discontinuidades para obtener mejores resultados.