

## TP N° 2 MA53L

P. Frey, A. Osses, N. Carreño, M. de Buhan  
*El método de diferencias finitas (II)*

**Objetivo :** El objetivo es resolver numéricamente un problema de evolución simple unidimensional en espacio por diferencias finitas. Se trata de un modelo de evolución de la concentración  $u(t, x)$  de especies químicas transportadas por un fluido.

$\lambda$  : velocidad del fluido.

$\varepsilon(t, x)$  : intensidad del efecto difusivo en el medio unidimensional.

$c(t, x)$  : reacciones químicas simplificadas entre las especies.

$f$  : creación y desaparición de las especies por efectos externos a la dinámica.

$u_0$  : estado inicial de las concentraciones.

La ecuación que estudiaremos es a menudo llamada *ecuación de convección-difusión-reacción*. En principio  $u$  puede tomar valores multidimensionales (varias especies) con un análisis similar al que haremos, pero consideraremos  $u$  unidimensional (una especie).

### Ejercicio 1 : Análisis de un problema de evolución

Consideremos el siguiente problema con condiciones en los límites en el dominio  $\mathbb{R}_+^* \times \Omega$ , donde  $\Omega = ]0, 1[$  :

Dado  $\varepsilon > 0$ ,  $c \geq 0$ ,  $f(t, x) \in L^2(]0, T[, \Omega)$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$ , encontrar  $u : [0, T] \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  tal que

$$(\mathcal{P}) \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \right) + \lambda \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + cu(t, x) = f(t, x), & x \in \Omega, t \in ]0, T[, \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0, & t \in ]0, T[ \\ u(0, x) = u_0(x), & x \in \Omega \end{cases} \quad (1)$$

donde  $T > 0$  representa el tiempo final. Bajo estas suposiciones, el problema  $(\mathcal{P})$  tiene una única solución débil.

#### 1. Una solución analítica pseudo exacta.

Consideramos la función

$$u(t, x) = \exp(-L(t + t_0)(x - x_0)^2),$$

con las constantes  $L = 1000$ ,  $t_0 = 0.1$  y  $x_0 = 0.5$  escogidas de manera tal que  $u(t, x)$  sea casi nula en la frontera del dominio espacial durante el tiempo de simulación  $T = 1$ . Así, la solución "exacta"  $u$  satisface las condiciones de borde homogéneas y puede compararse con la solución numérica obtenida resolviendo el problema de condiciones de borde con  $u_0(x) = u(0, x)$ .

(i) Calcule la función correspondiente del lado derecho del problema  $(\mathcal{P})$  para el  $u$  dado.

(ii) Escriba un programa para calcular la solución numérica y el lado derecho correspondiente. La función deberá tener dos argumentos : el tiempo  $t$  y la coordenada espacial  $x$ .

## 2. Discretización por diferencias finitas del problema ( $\mathcal{P}$ ).

Para  $N \in \mathbb{N}^*$ , definimos el paso  $h = 1/(N + 1)$  y los puntos de discretización espacial  $x_k = kh$ ,  $k \in \{0, \dots, N + 1\}$  donde  $x_0 = 0$  y  $x_{N+1} = 1$ , y los subintervalos  $I_k = ]x_k, x_{k+1}[$ ,  $k \in \{0, \dots, N\}$ . De manera similar para la variable de evolución, consideramos  $M \in \mathbb{N}^*$  y definimos los pasos de tiempo  $t_n = n\delta$ ,  $\delta = 1/M$ ,  $n = 0, \dots, M$ . Con esto, el objetivo es obtener una aproximación de  $u(t, x)$  en cada *punto de grilla*  $(t_n, x_k)$ ,  $n = 0, \dots, M$ ,  $k = 0, \dots, N + 1$ . En lo que sigue denotamos por  $u_k^n$  tal aproximación (que calculará numéricamente) de  $u(t_n, x_k)$ .

(i) Usando las siguientes aproximaciones para las derivadas espaciales y temporales de  $u$  :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_k) &\simeq \frac{-u_{k+1}^n + 2u_k^n - u_{k-1}^n}{h^2}, & \frac{\partial u}{\partial x}(t_n, x - k) &\simeq \frac{u_{k+1}^n - u_{k-1}^n}{2h}, \\ \frac{\partial u}{\partial t}(t_n, x_k) &\simeq \frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\delta} \end{aligned} \quad (2)$$

escriba un esquema de diferencias finitas para el problema ( $\mathcal{P}$ ).

(ii) Muestre que este esquema es consistente con la ecuación del problema ( $\mathcal{P}$ ).

(iii) ¿Bajo qué condiciones el esquema que propuso será convergente?

(iv) Muestre que el esquema que propuso es equivalente al esquema de recurrencia :

$$\begin{cases} U^{n+1} = A_h U^n + \delta F^n, & n = 0, \dots, M \\ U_k^0 = u_0(x_k), & j \in \{1, \dots, N\} \end{cases} \quad (3)$$

donde para cada  $n \in \{0, \dots, M\}$ , se definen los vectores  $U^n = (u_k^n)_{1 \leq k \leq N}$ ,  $F^n = (f_k^n)_{1 \leq k \leq N}$  y cierta matriz  $A_h$  que depende de los parámetros  $\varepsilon$ ,  $\lambda$  y  $c$  en una forma que deberá determinar. Escriba un programa para calcular la matriz  $A_h$ . Resuelva entonces numéricamente el problema ( $\mathcal{P}$ ) para  $\varepsilon = 1$ ,  $\lambda = 1$ ,  $c = 1$  usando este último algoritmo de recurrencia.

(v) Deseamos reemplazar el esquema precedente que es un esquema **explícito** por uno **implícito**. Modifique la aproximación de la derivada temporal para obtener un esquema implícito (en tiempo). Escriba una función que implemente el nuevo esquema y calcule.

## 3. Aspectos numéricos.

La discretización del problema ( $\mathcal{P}$ ) hace aparecer varios aspectos numéricos.

(i) Para el esquema explícito (3), considere los parámetros :  $\varepsilon = 0.01$ ,  $\lambda = 1$ ,  $c = 1$ . Grafique las soluciones y grafique  $\|u_h(1, \cdot) - u(1, \cdot)\|_0$  en función de  $N$  en escala log-log para  $M = 2^5$  fijo.

(ii) Repita lo anterior para  $\varepsilon = 0.01$ ,  $\lambda = 0$ ,  $c = 1000$ .