



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Matemàtiques
i Informàtica

GRAU DE MATEMÀTIQUES

Treball final de grau

El problema de Stefan

Autor: Sara Ramos Llauradó

Director: Dr. Miquel Bosch Gual

Realitzat a: Departament de Matemàtiques i Informàtica

Barcelona, 23 de gener de 2021

Abstract

In this thesis we study the one-dimensional Stefan problem, a classic example of a free boundary value problem for a partial differential equation. We will look at the Stefan condition and some techniques applied to problem solving. Furthermore, we will discuss the existence and uniqueness of heat equation, as well as the maximum principle. Finally the problem is solved numerically using the Crank-Nicolson scheme, for two different boundary conditions: one constant and the other time-dependent; doing an asymptotic analysis at the initial time, and an analysis of the approximation errors. The approximate solutions are shown graphically along with proper error estimates.

Resum

En aquest treball s'estudia el problema de Stefan unidimensional, un exemple clàssic de problema de condició a la frontera per a una equació diferencial en derivades parcials, on la frontera es desplaça en el temps. Veurem la condició de Stefan i algunes tècniques aplicades a la resolució del problema. També es discutirà l'existència i unicitat de l'equació del calor, així com el principi del màxim. Finalment es resol el problema numèricament usant el mètode de Crank-Nicolson, per a dues condicions a la frontera: una constant i l'altre dependent del temps; fent una anàlisi asimptòtica al temps inicial, i una anàlisi dels errors comesos en l'aproximació. Les solucions aproximades es mostren gràficament juntament amb els errors d'estimació adequats.

Agraïments

Voldria agrair al tutor d'aquest treball, el Dr. Miquel Bosch el seu recolzament i el seu ajut en el desenvolupament del treball, així com la proposta del tema que finalment s'ha convertit en el treball que és avui dia.

Índex

1	Introducció	1
2	Arrels històriques del problema	2
3	Hipòtesis físiques	3
3.1	L'equació de la calor	3
3.2	La condició de Stefan	6
4	Formulació matemàtica clàssica del problema	9
4.1	Reducció a una fase	9
4.2	Diferents tècniques matemàtiques per resoldre el problema	10
4.2.1	Semblança	10
4.2.2	Transformació de la frontera	14
4.2.3	Mètode de pertorbació	15
4.2.4	HBIM	17
4.3	Existència i unicitat de la solució	19
5	Anàlisi numèrica	24
5.1	Diferències finites	24
5.1.1	Mètode de diferències finites endavant	25
5.1.2	Mètode de diferències finites endarrere	29
5.1.3	Crank-Nicolson	31
5.2	Anàlisi asimptòtica	33
5.2.1	Per a una condició a la frontera constant	33
5.2.2	Per a una condició a la frontera dependent del temps	34
5.3	Resolució numèrica del problema de Stefan	35
5.3.1	Per a una condició a la frontera constant	35
5.3.2	Per a una condició a la frontera dependent del temps	38
5.4	Anàlisi d'errors	41
6	Conclusions	44

Annexos	45
A Gràfiques	45
A.1 Per a la condició a la frontera constant amb $\beta = 0.2$	45
A.2 Per a la condició a la frontera constant amb $\beta = 2$	47
A.3 Per a la condició a la frontera dependent del temps amb $\beta = 1$	49
B Codi font	52
B.1 El problema de Stefan amb C	52
B.2 Gràfiques de les solucions amb Gnuplot	60
Referències	63

1 Introducció

Un problema de Stefan és una classe de problema de valor a la frontera per a un sistema d'equacions en derivades parcials, on a part de resoldre les equacions que engloben el sistema, també s'ha de determinar la regió que ocupa en cada moment. El problema de Stefan clàssic descriu el canvi d'estat d'un material, per exemple la fusió d'un sòlid, com ara el gel a l'aigua. Per trobar una solució única del problema, es necessiten condicions a la frontera: per a la frontera mòbil a priori desconeguda, i per a les fronteres fixes dels dos estats del material en qüestió.

Algunes de les característiques que comparteixen els problemes de Stefan són: equacions per descriure la transferència de calor, que existeix una interfície entre cada una de les fases (que poden ser dos o més), i que la temperatura a la interfície és coneguda.

Els objectius que volem assolir en aquest treball són: entendre matemàticament el problema de Stefan clàssic de dos fases, trobar la solució analítica i discutir la validesa per al problema reduït d'una fase, i fer una anàlisi numèrica per trobar la solució aproximada amb els corresponents errors d'aproximació.

Estructura de la Memòria

1. La primera secció ha de servir per donar un punt de vista històric del problema de Stefan, veient les motivacions al darrere del problema clàssic, i repassant les diferents personalitats que han contribuït de manera directe o indirecte al problema.
2. A la segona secció establim una sèrie d'hipòtesis físiques sobre les quals treballarem, trobem l'equació de la calor i la condició de Stefan, amb les quals ja estarem en disposició de formular matemàticament el problema.
3. En la tercera secció es formula el problema de Stefan unidimensional de dos fases amb la corresponent reducció a una fase. Després s'expliquen diferents tècniques matemàtiques per resoldre'l, on també trobem la solució analítica, i per acabar es discuteix sobre l'existència i la unicitat de la solució.
4. Finalment, la última secció està dedicada a l'anàlisi numèrica. En ella, primer s'expliquen tres mètodes de diferències finites mirant l'estabilitat de cada un d'ells. Es fa una anàlisi asimptòtica del problema quan $t \rightarrow 0$ i es proposa un mètode numèric per resoldre el problema de Stefan, amb el corresponent anàlisi dels errors.

2 Arrels històriques del problema

S'anomena problema de Stefan a una classe de problemes de valor a la frontera en els quals la frontera és mòbil, és a dir, la posició d'aquesta és desconeguda i l'haurem de determinar com a part de la solució. Generalment, però no exclusivament, les equacions diferencials que engloben un problema de Stefan són parabòliques ².

L'exemple de problema de Stefan més comú, és el que descriu el canvi de fase de gel a aigua, per al qual s'ha de resoldre una equació de la calor per a cada una de les fases líquida i sòlida, i on la posició de la frontera mòbil separant els estats, ve determinada per l'anomenada condició de Stefan.

El nom del problema ve donat pel físic eslovè Jožef Stefan (1835-1893) que al llarg de la seva vida va dur a terme una multitud de treball experimental i analític en situacions físiques que incloïen el moviment de la frontera: canvi de fase sòlid-líquid, reaccions químiques, i canvi de fase líquid-vapor. Malgrat tot, el seu treball més rellevant va ser [13], en el que estudiava la formació de gel a l'Oceà Àrtic. En aquest estudi, considerava la temperatura de l'aigua del mar refredada a la seva temperatura de congelació, i la temperatura de l'aire en contacte amb l'aigua a una temperatura constant, per sota del punt de congelació, provocant la formació de gel a la interfície entre l'aire i l'aigua. Va trobar que el gruix de la capa de gel era proporcional a l'arrel quadrada del temps [14].

Malgrat que Stefan donés nom al problema i dugués a terme un ampli estudi tant experimental com teòric pel que feia al canvi de fase, no va ser el primer en formalitzar i resoldre el problema. Al segle XVIII, Joseph Black (1728-1799) va introduir el concepte de calor latent per primer cop, important per la comprensió de la física darrere del canvi de fase. Més tard, el físic i matemàtic Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830) va aportar la teoria física i matemàtica necessària referent a la conducció de la calor.

L'any 1831, el físic Gabriel Lamé (1795-1850) i l'enginyer Émile Clapeyron (1799-1864) van ser els primers en relacionar el concepte de calor latent amb l'equació de la calor, estenent la teoria de Fourier del temps transcorregut des de que la Terra va començar el procés de solidificació a partir del seu estat molt, suposant que la Terra inicialment estava en estat líquid a la temperatura de fusió (problema d'una fase). Van trobar que el gruix de l'escorça terrestre es proporcional a l'arrel quadrada del temps (tal i com va veure també Stefan en els seu estudi [13]) [6]. Després Stefan en va trobar la constant de proporcionalitat.

El 1860 el físic i matemàtic alemany Franz Ernst Neumann (1798-1895) va trobar en

²equació en derivades parcials de segon ordre del tipus

$$a_{11}u_{xx} + 2a_{12}u_{xy} + a_{22}u_{yy} + b_1u_x + b_2u_y + c = 0,$$

on $a_{11}a_{22} - 2a_{12} = 0$.

detall la solució d'un problema similar al de Lamé y Clapeyron, però prenent la temperatura inicial per sobre del punt de fusió (problema de dos fases). Malgrat tot, el seu treball no es va publicar fins l'any 1901 per Heimmich Weber en [15]. És per aquest motiu, que a dia d'avui la solució del problema de Stefan clàssic es coneix com a solució de Neumann, en el seu honor [3].

3 Hipòtesis físiques

Per tal d'establir el model matemàtic del problema, necessitarem tenir una idea clara de les hipòtesis subjacents. Donat que l'estudi involucra processos de *transformació de fase*, el model implicarà propietats físiques per a cada una de les fases. Per simplificar el problema, considerarem la *densitat* del material ρ constant, amb una temperatura de fusió constant u_M . Durant la transició de fase, apareixerà una *calor latent*, l , que serà absorbida o alliberada pel cos sense un canvi de temperatura. Cada fase tindrà *conductivitat tèrmica* k_L, k_S i *calor específica* c_L, c_S (on els subíndexs denoten l'estat *líquid* i *sòlid* respectivament), constants dins la fase però diferents entre elles.

A més, considerarem que la *calor*, mecanisme de transport d'energia entre dos cossos degut a una diferència de temperatura, es transfereix isotròpicament (i.e. igual en totes direccions) i per conducció.

3.1 L'equació de la calor

Volem obtenir un model matemàtic que descriu la distribució de la calor en un cos sòlid, per derivar aquest model hem seguit [11, p. 18-20]. Suposarem que el cos és homogeni i isotròpic, és a dir, en el que la calor es transmet igual en totes direccions. També considerarem la densitat ρ constant, i que el cos no rep l'energia de cap font externa.

Sigui V una regió arbitrària diferenciable a trossos, on $V \subset \mathbb{R}^n$.

Denotem per $e = e(\mathbf{x}, t)$ l'energia tèrmica per unitat de massa, mesurada en kJ/kg. Aleshores la quantitat total d'energia tèrmica dins de V , ve donada per

$$\int_V e\rho \, d\mathbf{x}$$

i derivant respecte el temps, obtenim ³

$$\frac{d}{dt} \int_V e\rho \, d\mathbf{x} = \int_V e_t\rho \, d\mathbf{x}$$

³assumint que la derivada pot entrar dins la integral.

Sigui \mathbf{q} el vector de flux de calor mesurat en $\text{kJ}/\text{m}^2\text{s}$, que estableix la direcció del flux de calor i la magnitud de la velocitat del flux a través d'una unitat d'àrea. Més específicament, si $d\sigma$ és una àrea continguda a la frontera de V , ∂V , amb vector unitari normal exterior ν , llavors

$$\mathbf{q} \cdot \nu d\sigma$$

es l'índex de flux d'energia a través de $d\sigma$ i en conseqüència, el flux de calor en ∂V ve donat per

$$-\int_{\partial V} \mathbf{q} \cdot \nu d\sigma = -\int_V \operatorname{div} \mathbf{q} dx$$

Aquesta igualtat ve donada pel teorema de la divergència.

Abans de continuar, cal mencionar la primera llei de la termodinàmica, que fa referència a la conservació d'energia, i que podem formular de la següent manera:

Sigui V un volum de control arbitrari dins del cos. *La taxa de variació de l'energia tèrmica dins V és igual al flux net de calor a través de la frontera ∂V de V , degut a la conducció, més la taxa de variació en que les fonts externes subministren calor.*

Degut a aquesta conservació de l'energia, i que estem suposant que el cos no rep cap aportació externa d'energia, tenim:

$$\int_V e_t \rho dx = -\int_V \operatorname{div} \mathbf{q} dx. \quad (3.1)$$

Per l'arbitrarietat de V , podem convertir l'equació integral (3.1) en la següent relació que estableix una llei bàsica en la conducció de la calor:

$$e_t \rho = -\operatorname{div} \mathbf{q}. \quad (3.2)$$

Per bé que e i \mathbf{q} són desconegudes, necessitarem més informació mitjançant relacions constitutives per aquestes quantitats.

Suposarem el següent:

- **La Llei de Fourier** de la conducció de la calor, estableix que sota condicions “normals”, per molts materials sòlids, el flux de calor és una funció lineal del gradient⁴ de la temperatura, és a dir:

$$\mathbf{q} = -k \nabla u \quad (3.3)$$

on u és la temperatura absoluta i $k > 0$ és la *conductivitat tèrmica* que depèn del material. En general, k no depèn de u , \mathbf{x} ni t , però sovint varia tan poc que té sentit

⁴el gradient d'una funció f , és $\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$.

negligir la variació i considerar-la constant, de manera que

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = -k \Delta u. \quad (3.4)$$

El signe negatiu en (3.3) evidencia la tendència del flux de calor, d'anar des de les regions càlides a les fredes.

- L'energia tèrmica és una funció lineal de la temperatura absoluta (mesurada en graus Kelvin o Celsius):

$$e = c_v u \quad (3.5)$$

on c_v denota la *calor específica* (a volum constant) del material.

Amb aquestes suposicions, convertim (3.2) en una equació en derivades parcials (EDP) que es satisfà per una distribució de temperatura $u(\mathbf{x}, t)$:

$$u_t - \frac{k}{c_v \rho} \Delta u = 0 \quad (3.6)$$

anomenada **equació de la calor**, i $D = \frac{k}{c_v \rho}$. El coeficient D s'anomena *difusivitat tèrmica*, que és el temps de resposta tèrmica del material.

Per tal de tenir un problema ben definit en un domini Ω , per un temps positiu $t > 0$, hem de combinar (3.6) amb

- a. una condició inicial $u(x, 0), \forall \mathbf{x} \in \Omega$;
- b. condicions a la frontera del domini per $u(x, 0), \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, t > 0$.

Restringint-nos al cas unidimensional, amb $\Omega = [0, \infty)$, l'equació (3.6) es transforma en

$$u_t = D u_{xx}.$$

3.2 La condició de Stefan

A continuació seguirem amb la deducció de l'anomenada condició de Stefan, una condició pel domini mòbil que necessitarem per tal d'obtenir una solució única del problema de Stefan. Ho farem seguint el treball de [5].

Denotem per $x = h(t)$ a la frontera mòbil desconeguda. Sigui u_M la temperatura de fusió entre la fase sòlida i líquida, que considerarem constant. Per raons de naturalesa física, la temperatura ha de ser contínua i per tant, en $x = h(t)$ tindrem:

$$\lim_{x \rightarrow h(t)^-} u_L(x, t) = \lim_{x \rightarrow h(t)^+} u_S(x, t) = u_M \quad \forall t. \quad (3.7)$$

En un temps fixat $t = t_0$, considerem el domini Ω que podem dividir en dos fases separades a $x = h(t_0)$: $\Omega_1 = \Omega \cap \{x < h(t)\}$ la fase líquida i $\Omega_2 = \Omega \cap \{x > h(t)\}$ la sòlida. Suposarem també que u només depèn de x i t .

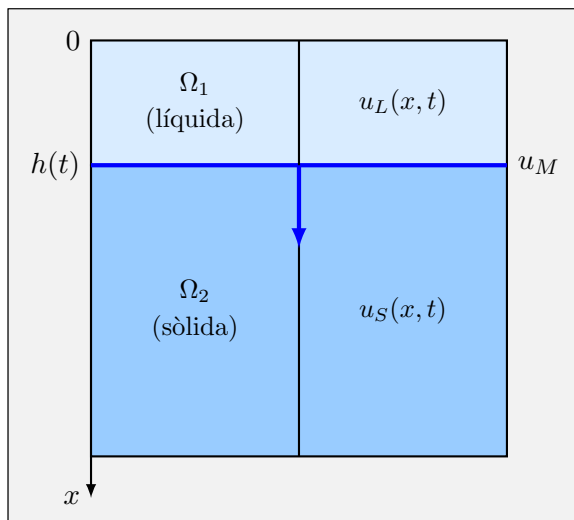


Figura 3.1: Fases líquida i sòlida amb interfície de separació $h(t)$ i temperatura en $x = h(t)$ imposada u_M .

Suposarem també que el sòlid s'està fonent, és a dir que segons la figura fig. 3.1 $h(t)$ es mou cap avall. Per tant, $u_L > u_M$ i $u_S < u_M$.

En el temps fixat, agafem un troç d'interfície amb forma de disc A , per simplificar els càlculs. En un temps $t_1 > t_0$ la posició de la interfície haurà canviat a $h(t_1) > h(t_0)$. Mentrestant, el cilindre de volum $V_{cilindre} = \text{àrea}(A) \times (h(t_1) - h(t_0))$ s'haurà fos alliberant una quantitat de calor Q :

$$Q = ml = V_{cilindre} \rho l \quad (3.8)$$

on ρ és la densitat i l la calor latent específica.

El flux de calor per cada fase serà:

$$\mathbf{q}_L = -k_L \nabla u_L \quad (3.9)$$

$$\mathbf{q}_S = -k_S \nabla u_S \quad (3.10)$$

on estem suposant que $u \in C^1$ i k_L i k_S és la conductivitat tèrmica del material per a la fase líquida i sòlida respectivament. Per la conservació de l'energia, la quantitat de calor absorbida en (3.8) és igual a

$$Q = \int_{t_0}^{t_1} \int_A [\mathbf{q}_L \cdot \mathbf{e}_1 + \mathbf{q}_S \cdot (-\mathbf{e}_1)] dA dt = \int_{t_0}^{t_1} \int_A [-k_L \nabla u_L(h(t), t) \cdot \mathbf{e}_1 - k_S \nabla u_S(h(t), t) \cdot (-\mathbf{e}_1)] dA dt, \quad (3.11)$$

on \mathbf{e}_1 és el vector unitari en la direcció d' x . Integrant l'expressió anterior sobre les coordenades espacials ens dóna

$$Q = A \int_{t_0}^{t_1} \left[-k_L \left(\frac{\partial u_L}{\partial x}(h(t), t), \frac{\partial u_L}{\partial t}(h(t), t) \right) + k_S \left(\frac{\partial u_S}{\partial x}(h(t), t), \frac{\partial u_S}{\partial t}(h(t), t) \right) \right] \cdot (1, 0) dt = A \int_{t_0}^{t_1} \left[-k_L \frac{\partial u_L}{\partial x}(h(t), t) + k_S \frac{\partial u_S}{\partial x}(h(t), t) \right] dt \quad (3.12)$$

i igualant 3.12 amb 3.8 obtenim

$$(h(t_1) - h(t_0)) \cdot \rho l = \int_{t_0}^{t_1} \left[-k_L \frac{\partial u_L}{\partial x}(h(t), t) + k_S \frac{\partial u_S}{\partial x}(h(t), t) \right] dt. \quad (3.13)$$

Ara dividim l'expressió per $(t_1 - t_0)$ i fem el límit quan $t_1 \rightarrow t_0$:

$$\rho l \cdot \lim_{t_1 \rightarrow t_0} \frac{h(t_1) - h(t_0)}{t_1 - t_0} = \lim_{t_1 \rightarrow t_0} \frac{1}{t_1 - t_0} \int_{t_0}^{t_1} \left[-k_L \frac{\partial u_L}{\partial x}(h(t), t) + k_S \frac{\partial u_S}{\partial x}(h(t), t) \right] dt. \quad (3.14)$$

Necessitarem els següents teoremes abans de continuar:

Teorema 3.1. (Teorema del valor intermedi) Sigui $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ contínua. Sigui $c \in \mathbb{R}$ tal que $f(a) < c < f(b)$. Aleshores existeix $t \in (a, b)$ tal que $f(t) = c$.

Demostració. Podeu trobar la demostració del teorema a [8, p. 111]. □

Teorema 3.2. (Teorema del valor mitjà per a integrals) Sigui $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ contínua, i sigui $g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ acotada, integrable i no-negativa. Aleshores existeix $\xi \in [a, b]$ tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx.$$

Demostració. El cas en que $\int_a^b g = 0$ és trivial. Suposem doncs $\int_a^b g > 0$. Siguin $M = \max_{x \in [a,b]} f(x)$ i $m = \min_{x \in [a,b]} f(x)$ (existeixen per ser f contínua i $[a, b]$ compacte). Aleshores, com $g(x) \geq 0$, tenim

$$m g(x) \leq f(x) g(x) \leq M g(x) \quad \forall x \in [a, b]$$

i per tant

$$m \int_a^b g = \int_a^b m g \leq \int_a^b f g \leq \int_a^b M g = M \int_a^b g.$$

El nombre $\int_a^b f g$ es troba entre el mínim i el màxim de $f(x) \int_a^b g$ en $[a, b]$. Com que f és contínua, podem aplicar el teorema del valor Intermedi 3.1 i concloure que existeix ξ en l'interval $[a, b]$, tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx.$$

□

Apliquem el Teorema 3.2 en l'interval $[t_0, t_1]$ amb $g(t) = 1$ i

$$f(t) = \left[-k_L \frac{\partial u_L}{\partial x}(h(t), t) + k_S \frac{\partial u_S}{\partial x}(h(t), t) \right]$$

a (3.14) i obtenim la següent expressió:

$$\rho l \cdot h'(t_1) = \lim_{t_1 \rightarrow t_0} \frac{1}{t_1 - t_0} \cdot (t_1 - t_0) f(t). \quad (3.15)$$

Com $t_1 \rightarrow t_0$ i f és contínua ($u \in C^1$), llavors

$$\rho l \cdot h'(t_1) = f(t_1). \quad (3.16)$$

Es podria haver repetit el mateix procediment per a un temps t qualsevol, en comptes de t_1 . Així, podem escriure l'expressió anterior com

$$\rho l \cdot h'(t) = f(t). \quad (3.17)$$

I finalment, substituint l'expressió de f arribem a l'anomenada *condició de Stefan*

$$\rho l \cdot \frac{dh}{dt} = -k_L u_x(h(t), t) + k_S u_x(h(t), t). \quad (3.18)$$

que és una condició per a la frontera mòbil.

4 Formulació matemàtica clàssica del problema

Amb totes les hipòtesis i condicions que hem establert fins ara, ja estem en situació per poder enunciar la forma més bàsica del problema de Stefan, que sorgeix de considerar el desglaç d'un bloc de gel unidimensional i semi-infinit ocupant $x \geq 0$, on el canvi d'estat es comença a produir en el temps inicial $t = 0$ i és degut a una font de calor en $x = 0$. La fase líquida en el subdomini Ω_1 , està separada per $h(t)$ de la fase sòlida en el subdomini Ω_2 . Cada fase tindrà la seva distribució de temperatura $u_L(x, t)$ i $u_S(x, t)$, és a dir, tindrem una equació de la calor (3.6) per a cada fase:

$$\frac{\partial u_L}{\partial t} = D_L \cdot \frac{\partial^2 u_L}{\partial x^2} \quad \text{en } 0 < x < h(t), \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial u_S}{\partial t} = D_S \cdot \frac{\partial^2 u_S}{\partial x^2} \quad \text{en } h(t) < x < \infty. \quad (4.1b)$$

A $x = h(t)$, per a $t > 0$, tindrem:

$$\rho l \cdot \frac{dh}{dt} = -k_L \frac{\partial u_L}{\partial x}(h(t), t) + k_S \frac{\partial u_S}{\partial x}(h(t), t) \quad (\text{condició de Stefan}), \quad (4.1c)$$

$$u_L(h(t), t) = u_S(h(t), t) = u_M. \quad (4.1d)$$

A l'instant inicial $t = 0$, la fase líquida encara no existeix, per tant tindrem,

$$h(0) = 0 \quad (\text{el material és sòlid inicialment}). \quad (4.1e)$$

La font de calor que deriva en el desglaçament a $x = 0$, pot ser qualsevol funció $f(t)$. Més endavant, considerarem un cas en el que la temperatura és constant, i un altre en la que dependrà del temps, amb $f(t) > u_M$. Tindrem:

$$u_L(0, t) = f(t). \quad (4.1f)$$

Formalment, encara necessitaríem definir una condició inicial i una condició a la frontera per a la distribució de temperatura a la fase sòlida u_S , però donat que treballarem amb la simplificació del problema que a continuació veurem, no serà necessari.

4.1 Reducció a una fase

Una simplificació del problema de Stefan de dos fases (4.1) és el considerar la temperatura a la fase sòlida constant, de manera que la única fase "activa" seria la líquida. Amb aquest plantejament, el problema es redueix a trobar la distribució de temperatura a la fase líquida i la localització de la frontera mòbil $h(t)$. Malgrat que el problema segueix sent de dos fases, s'anomena problema d'una fase ja que la fase sòlida és coneguda.

Considerant la regió sòlida inicialment a la temperatura de fusió u_M , el problema es redueix a:

- **La fase líquida:** $0 \leq x < h(t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{k_L}{c_L \rho_L} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = D_L \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{en } 0 < x < h(t), t > 0, \quad (4.2a)$$

$$u(0, t) = f(t), \quad \text{condició a la frontera,} \quad (4.2b)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad \text{condició inicial.} \quad (4.2c)$$

- **La frontera mòbil:** $x = h(t)$

$$\rho l \cdot \frac{dh}{dt} = -k_L \frac{\partial u}{\partial x}(h(t), t) \quad \text{condició de Stefan,} \quad (4.2d)$$

$$h(0) = 0, \quad \text{posició inicial de la interfície,} \quad (4.2e)$$

$$u(h(t), t) = u_M. \quad (4.2f)$$

- **La fase sòlida:** $h(t) < x < \infty$

$$u(x, t) = 0, \quad \forall t, x \geq h(t). \quad (4.2g)$$

Per a la condició a la frontera 4.2b com hem mencionat anteriorment, considerarem dues funcions diferents, tot seguint el treball de [10]. Funcions per a les quals, existeix la solució analítica del problema, i d'aquesta manera posteriorment podrem comparar-la amb la solució aproximada que trobarem a la secció 5. Són:

$$f(t) = 1, \quad f(t) = e^t - 1. \quad (4.3)$$

4.2 Diferents tècniques matemàtiques per resoldre el problema

A continuació, presentarem una visió global de diferents tècniques matemàtiques per al problema de Stefan (4.2).

4.2.1 Semblança

L'objectiu de la solució per semblança és reduir l'ordre de l'equació en derivades parcials reescriuint-la en termes d'una variable semblant, agrupant-hi les variables independents x i t en una de la forma $\xi = ct^\nu x^\gamma$.

Primer necessitarem considerar una versió adimensional del problema de Stefan unidimensional (4.2). Donat que ja tenim el model matemàtic, només haurem de comprovar que les noves expressions satisfan les equacions [5].

Sigui el següent canvi de variables:

$$\begin{cases} u = av, \\ t = \gamma\tau \end{cases} \quad (4.4)$$

amb a i γ constants i tal que

$$a = \frac{1}{\gamma} = D \quad (4.5)$$

on recordem que $D = \frac{k}{c\rho} \neq 0$. Amb el canvi de variables i (4.5) transformem el sistema (4.2) en

$$\begin{cases} \frac{\partial(av)}{\partial(\gamma\tau)} = D \frac{\partial^2(av)}{\partial x^2} \rightarrow \frac{a}{\gamma} v_\tau = Dav_{xx} \\ av(0, \gamma\tau) = f(\gamma\tau) \rightarrow v(0, \gamma\tau) = \gamma f(\gamma\tau) \\ v(x, 0) = 0 \\ \beta \frac{dh}{d(\gamma\tau)}(\gamma\tau) = -\frac{\partial(av)}{\partial x} \rightarrow \frac{\beta}{\gamma} \frac{dh}{d\tau}(\gamma\tau) = -a \frac{\partial v}{\partial x} \end{cases} \implies \begin{cases} v_\tau = v_{xx} \\ v(0, \gamma\tau) = \gamma f(\gamma\tau) \\ v(x, 0) = 0 \\ \beta \frac{d}{d\tau} h(\gamma\tau) = -v_x \end{cases} \quad (4.6)$$

on $\beta = \frac{\rho l}{k_L}$. Ara substituïm les funcions per

$$h(\gamma\tau) \rightarrow \sigma(\tau) \quad (4.7)$$

$$f(\gamma\tau) \rightarrow F(\tau)/\gamma \quad (4.8)$$

$$v(x, \gamma\tau) \rightarrow \lambda(x, \tau) \quad (4.9)$$

de tal manera, ens queda:

$$\lambda_\tau(x, \tau) = \lambda_{xx}(x, \tau) \quad (4.10)$$

$$\beta \frac{d}{d\tau} \sigma(\tau) = -\lambda_x(\sigma(\tau), \tau) \quad (4.11)$$

i tornant a canviar la notació del problema per l'original, obtenim el problema de Stefan adimensional com

$$u_t = u_{xx} \quad (4.12a)$$

$$u(0, t) = f(t) \quad (4.12b)$$

$$u(h(t), t) = 0 \quad (4.12c)$$

$$\beta \frac{dh}{dt} = -u_x(h(t), t). \quad (4.12d)$$

Considerem ara el problema de Stefan d'una fase, descrit pel sistema (4.2), amb la condició $u(0, t) = u_H$ a $x = 0$, trobarem una solució explícita del problema.

Sigui la variable semblant

$$\xi = \frac{x}{\sqrt{t}} \quad (4.13)$$

i buscarem una solució de la forma

$$u(x, t) = F(\xi(x, t)). \quad (4.14)$$

Substituint (4.14) a l'equació de la calor (4.2a), obtenim:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\frac{x}{2t\sqrt{t}}, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{t}} \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad (4.16)$$

$$D_L \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = D_L \frac{\partial F}{\partial \xi} \left(\frac{1}{\sqrt{t}} \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} = D_L \frac{1}{t} \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2}. \quad (4.17)$$

Convertint (4.2a) en l'equació diferencial lineal de segon ordre

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} + \frac{\xi}{2D_L} \frac{\partial F}{\partial \xi} = 0 \quad (4.18)$$

que podem resoldre amb el factor integrand

$$M(\xi) = e^{\int_{h_0}^{\xi} \frac{h}{2D_L} dh} = C_1 e^{\frac{\xi^2}{4D_L}} \quad (4.19)$$

amb C_1 constant. Multiplicant $M(\xi)$ a (4.18) obtenim

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} M(\xi) + \frac{\xi}{2D_L} M(\xi) \frac{\partial F}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(M(\xi) \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) = 0 \quad (4.20)$$

i integrant l'equació anterior arribem a

$$M(\xi) \frac{\partial F}{\partial \xi} = C_2 \quad (4.21)$$

amb C_2 constant. Finalment, pel Teorema Fonamental del Càlcul, la solució de l'equació és

$$F(\xi) = C_1 \int_0^{\xi} e^{-\frac{h^2}{4D_L}} dh + C_2. \quad (4.22)$$

Podem reescriure (4.21) en termes de la funció error ⁵

$$F(\xi) = C_1' \operatorname{erf}\left(\frac{\xi}{2\sqrt{D_L}}\right) + C_2 \quad (4.23)$$

i la solució de (4.2a) serà

$$u(x, t) = F\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) = C_1' \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_L t}}\right) + C_2. \quad (4.24)$$

Per obtenir el valor de les constants C_1' i C_2 , avaluem (4.24) a la frontera $x = 0$ i $x = h(t)$, obtenint

$$u(0, t) = C_1' \operatorname{erf}(0) + C_2 = u_H \implies C_2 = u_H, \quad (4.25)$$

$$u(h(t), t) = C_1' \operatorname{erf}\left(\frac{h(t)}{2\sqrt{D_L t}}\right) + u_H = 0 \implies C_1' = \frac{-u_H}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (4.26)$$

amb

$$\lambda \equiv \frac{h(t)}{2\sqrt{D_L t}}. \quad (4.27)$$

Com que C_1' és constant, λ també ho ha de ser, i per tant,

$$h(t) = 2\lambda\sqrt{D_L t}, \quad (4.28)$$

$$u(x, t) = u_H - \frac{u_H}{\operatorname{erf}(\lambda)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_L t}}\right). \quad (4.29)$$

Per trobar una condició per a la constant λ , ens ajudem de la condició de Stefan a $x = h(t)$ que és

$$\beta \frac{dh}{dt} = -\frac{\partial u}{\partial x}(h(t), t), \quad \beta = \frac{\rho l}{k_L}. \quad (4.30)$$

La derivada temporal amb l' $h(t)$ trobada a (4.28) serà

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \left(2\lambda\sqrt{D_L t}\right) = \lambda \frac{\sqrt{D_L}}{\sqrt{t}} \quad (4.31)$$

i per la derivada espacial de u , derivem primer (4.29):

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = -\frac{u_H}{\operatorname{erf}(\lambda)} \frac{2}{\pi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_0^{\frac{x}{2\sqrt{D_L t}}} e^{-y^2} dy \right) = -\frac{u_H}{\operatorname{erf}(\lambda)} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\frac{x^2}{4D_L t}}}{\sqrt{D_L t}} \quad (4.32)$$

i l'avaluem a $x = h(t)$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(h(t), t) = -\frac{u_H}{\operatorname{erf}(\lambda)} \frac{e^{-\lambda^2}}{\sqrt{D_L t} \sqrt{\pi}}. \quad (4.33)$$

⁵ $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy.$

Finalment substituint a (4.30), (4.33) i (4.31), obtindrem l'equació transcendental

$$\beta\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = 1. \quad (4.34)$$

Agrupant les equacions, tenim que la solució del problema de Stefan (4.2), coneguda com a solució de Neumann, és:

$$\begin{cases} u(x, t) = u_H - \frac{u_H}{\operatorname{erf}(\lambda)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_L t}}\right), \\ h(t) = 2\lambda\sqrt{D_L t}, \\ \beta\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = 1. \end{cases} \quad (4.35)$$

4.2.2 Transformació de la frontera

Un altre eina per a simplificar problemes de Stefan com (4.12), de gran interès per trobar solucions numèriques on treballar amb una frontera mòbil sempre és costós, són les transformacions de fixació de la frontera [3].

Un exemple és aplicar el canvi de variable $\xi = x/h(t)$ a (4.12), convertint el problema en:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = h^2 \frac{\partial F}{\partial \xi} - \xi h \frac{dh}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad (4.36)$$

i les condicions a la frontera

$$F(0, t) = 1, \quad F(1, t) = 0, \quad \beta h \frac{dh}{dt} = - \left. \frac{\partial F}{\partial \xi} \right|_{\xi=1}, \quad (4.37)$$

on $F(\xi, t) = u(x, t)$. Aquesta transformació soluciona el problema del domini mòbil, ja que el domini original era $x \in [0, h(t)]$ i amb aquest canvi es transforma en $\xi \in [0, 1]$. De totes maneres, amb el problema de Stefan estàndard ens trobem amb una degeneració en el temps $t = 0$, ja que $h \sim \sqrt{t}$ i per tant $\frac{dh}{dt} \sim \frac{1}{\sqrt{t}}$ (que apareix en (4.36)). Aquesta singularitat es pot evitar treballant en termes de $z = h^2$, obtenint

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = z \frac{\partial F}{\partial \xi} - \frac{\xi}{2} \frac{dz}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad \frac{\beta}{2} \frac{dz}{dt} = - \left. \frac{\partial F}{\partial \xi} \right|_{\xi=1}. \quad (4.38)$$

A la secció 5, aplicarem aquesta transformació de la frontera per tal d'aproximar la solució del problema (4.2) i tractarem amb més profunditat la degeneració a 5.2.

4.2.3 Mètode de pertorbació

El mètode de pertorbació consisteix en aproximar la solució d'un problema que no pot ser resolt analíticament mitjançant una sèrie de potències en terme d'un paràmetre suficientment petit. Aquesta sèrie en el cas del nostre problema s'anomena gran expansió del nombre de Stefan. Partint de l'expressió adimensional del problema (4.12), per valors grans de β podem reescriure la condició de Stefan (4.12d) com

$$\frac{dh}{dt} = -\epsilon \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=h(t)}. \quad (4.39)$$

on $\epsilon = 1/\beta \ll 1$.

Com $h(t)$ és una funció monòtona, podem substituir la segona variable independent t per h . Usant (4.39) podem reescriure (4.12a) com:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\epsilon \frac{\partial u}{\partial h} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=h} \quad (4.40)$$

i la condició a $x = 0$:

$$u(x = 0, t) = f(t) = F(h). \quad (4.41)$$

Ara l'objectiu és trobar una solució pertorbada de tres termes de la forma

$$u(x, h) = u_0(x, h) + \epsilon u_1(x, h) + \epsilon^2 u_2(x, h). \quad (4.42)$$

Substituint (4.42) en les equacions (4.12b), (4.12c) i (4.39), les equacions governants per a u_0 , u_1 i u_2 seran:

$$\epsilon^0 : \quad \frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} = 0 \quad (4.43a)$$

$$u_0(0, h) = F(h), \quad u_0(h, h) = 0,$$

$$\epsilon^1 : \quad \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = -\frac{\partial u_0}{\partial h} \left(\frac{\partial u_0}{\partial x} \right)_{x=h} \quad (4.43b)$$

$$u_1(0, h) = 0, \quad u_1(h, h) = 0,$$

$$\epsilon^2 : \quad \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} = -\frac{\partial u_1}{\partial h} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)_{x=h} \quad (4.43c)$$

$$u_2(0, h) = 0, \quad u_2(h, h) = 0.$$

Les solucions d'aquestes EDPs són, respectivament:

$$u_0(x, h) = F(h)(1 - z), \quad (4.44)$$

$$u_1(x, h) = \frac{1}{6} F(h) z (1 - z) [F(h)(z + 1) - h F'(h)(z - 2)] \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned}
u_2(x, h) = & \frac{-1}{360} F(h) z (z - 1) [F(h)^2 (z + 1)(9z^2 + 19) \\
& + 10F'(h)^2 h^2 (z + 4) \\
& + 5F(h) F'(h) h (3z^2 + 5z + 17) \\
& + F(h) F''(h) h^2 (z - 2)(3z^2 - 6z - 4)], \tag{4.46}
\end{aligned}$$

amb $z = x/h$. Amb això, la posició de la frontera mòbil se segueix de l'equació

$$\begin{aligned}
\frac{dh}{dt} = & -\epsilon \left(\frac{\partial u_0}{\partial x} + \epsilon \frac{\partial u_1}{\partial x} + \epsilon^2 \frac{\partial u_2}{\partial x} \right)_{x=h} \\
= & \frac{\epsilon}{h} F(h) - \epsilon^2 F(h) \left[\frac{1}{6} F'(h) + \frac{1}{3h} \right] \\
& + \epsilon^3 F(h) \left[\frac{7}{45h} F(h)^2 + \frac{5}{36} F'(h)^2 h + \frac{25}{72} F(h) F'(h) - \frac{13}{360} F(h) F''(h) h \right]. \tag{4.47}
\end{aligned}$$

Desfent el canvi $f(t) \leftrightarrow F(h)$ amb les relacions

$$\frac{dF(h)}{dh} = \frac{df(t)}{dt} \left(\frac{dh}{dt} \right)^{-1}, \quad \frac{d^2 F(h)}{dh^2} = \frac{d^2 f(t)}{dt^2} \left(\frac{dh}{dt} \right)^{-2}, \tag{4.48}$$

l'equació (4.47) la podem reescriure de la forma

$$\left(\frac{dh}{dt} \right)^3 + a(t, h) \left(\frac{dh}{dt} \right)^2 + b(t, h) \frac{dh}{dt} + c(t, h) = 0, \tag{4.49}$$

on

$$a(t, h) = -\frac{\epsilon f(t)}{h} \left[1 - \frac{\epsilon}{3} f(t) + \frac{7\epsilon^2}{45} f(t)^2 \right], \tag{4.50}$$

$$b(t, h) = \epsilon^2 f(t) f'(t) \left[\frac{1}{6} - \frac{25\epsilon}{72} f(t) \right], \tag{4.51}$$

$$c(t, h) = -\epsilon^3 f(t) h \left[\frac{5}{36} f'(t)^2 - \frac{13}{360} f(t) f''(t) \right]. \tag{4.52}$$

Resolent l'equació (4.49), obtindrem el valor de dh/dt i mitjançant integració numèrica trobem h . La distribució de temperatura vindrà donada al substituir els termes de (4.42) pels trobats a (4.44)-(4.46).

De l'aplicació d'aquest mètode en la literatura, podem concloure que el mètode de pertorbació funciona com és esperat per a valors de ϵ fins a 0.5. Amb la inclusió de més termes en la sèrie de pertorbació, el mètode funcionaria per a valors més grans de ϵ [2].

4.2.4 HBIM

El mètode de la integral del balanç de la calor, a partir d'ara HBIM, per les seves sigles en anglès **H**eat **B**alance **I**ntegral **M**ethod, va ser originalment descrit per Goodman [4] i va tenir un major impacte en els problemes de Stefan, donat que a diferència d'altres problemes que involucren transferència de calor, es poden trobar molt poques solucions del problema de Stefan. Malgrat que com hem vist, existeixen altres mètodes per aproximar la solució, i que alguns donen lloc a solucions més precises, el HBIM és una opció popular per la seva senzillesa i el fet que dóna lloc a solucions analítiques per a una àmplia gamma de problemes i valors de paràmetres. Per desenvolupar aquesta secció ens hem guiat de [9].

A continuació, veurem la solució al problema de fusió d'un sòlid semi-infinit inicialment a temperatura constant (4.2) amb la funció $f(t) = 1$, és a dir, $u(0, t) = 1$. Trobarem la solució per HBI seguint el següent procediment:

1. Introduïm un nou paràmetre $\delta(t)$, a partir del qual, per a $x \geq \delta$ l'increment de temperatura és negligible.
2. Definim una funció que approximi la temperatura, sovint amb un polinomi, aplicant condicions en la frontera a $x = 0$ i a $x = \delta(t)$ per determinar tots els coeficients desconeguts de la funció, en funció del paràmetre δ .
3. Integrem l'equació governant per a $x \in [0, \delta]$ per produir l'anomenada integral del balanç de la calor. Això resultarà en una equació diferencial ordinària per δ .

Per tant, haurem reduït el problema de resoldre una equació en derivades parcials a una equació diferencial ordinària, la qual es pot resoldre analíticament.

Ara procedim a l'aplicació del mètode al nostre cas. Partim de la forma adimensional (4.12), amb la condició inicial

$$u(x, 0) = 0 \quad \text{per a } x > 0. \quad (4.53)$$

Utilitzarem la solució de Neumann per comparar després la veracitat del mètode:

$$u(x, t) = 1 - \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda)}, \quad h(t) = 2\lambda\sqrt{t} \quad (4.54)$$

on λ és la solució de l'equació transcendental

$$\beta\sqrt{\pi}\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = 1. \quad (4.55)$$

El mètode d'HBI implicarà integrar l'equació de la calor (4.12a) respecte x a l'interval

$(0, h(t))$. Aplicant (4.12c) en la integral, obtenim

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=h} - \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{d}{dt} \int_0^x u \, dx. \quad (4.56)$$

Un cop haguem definit la funció que aproxima u , haurem de resoldre (4.56) juntament amb al condició de Stefan (4.12d).

La funció d'aproximació original proposada per Goodman [4] és quadràtica de la forma $u(x, t) = a(h-x) + b(h-x)^2$. Tot i així, serà millor utilitzar la següent variació proposada per Woods [16],

$$u(x, t) = a \left(\frac{h-x}{h} \right) + b \left(\frac{h-x}{h} \right)^2 \quad (4.57)$$

ja que amb al condició a la frontera (4.53), els coeficients a i b que haurem de determinar, seran independents de t . Comprovem que se satisfan les condicions de frontera: $u(h(t), t) = 0$ es satisfà de manera automàtica, i aplicant $u(0, t) = 1$, obtenim $u(0, t) = a + b = 1$, per tant $b = 1 - a$, i la funció quedarà com

$$u(x, t) = a \left(\frac{h-x}{h} \right) + (1-a) \left(\frac{h-x}{h} \right)^2. \quad (4.58)$$

Amb aquesta equació, tindrem:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=h} = -\frac{a}{h}, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{a-2}{h}, \quad \frac{d}{dt} \int_0^x u \, dx = \frac{(a+2)h}{6}, \quad (4.59)$$

mentre la condició de Stefan es transforma en:

$$\beta \frac{dh}{dt} = \frac{a}{h} \implies h \frac{dh}{dt} = \frac{a}{\beta}. \quad (4.60)$$

Reescrivim l'equació integral (4.56), aplicant el fet que a és constant, de la següent manera:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=h} - \frac{a-2}{h} = \frac{a+2}{6} \frac{dh}{dt}. \quad (4.61)$$

Utilitzant la condició de Stefan (4.12d) podem substituir el gradient de la temperatura a $x = h$ de l'equació (4.61) per obtenir l'equació diferencial en termes de les dos incògnites a i $h(t)$

$$h \frac{dh}{dt} = \frac{6(2-a)}{6\beta + a + 2} \quad (4.62)$$

Juntament amb (4.60) conformen un sistema d'equacions, amb el que trobem fàcilment que la constant a satisfà l'equació quadràtica

$$a^2 + 2(6\beta + 1)a - 12\beta = 0 \quad (4.63)$$

amb solució

$$a = -(6\beta + 1) \pm \sqrt{1 + 24\beta + 36\beta^2}, \quad (4.64)$$

on agafem la solució de l'arrel positiva per assegurar $u_x(h, t) < 0$. Resolent (4.60), comprovem que, de la mateixa manera que a la solució (4.54), h és proporcional a l'arrel quadrada del temps,

$$h(t) = \sqrt{\frac{2a}{\beta}t} = 2\alpha\sqrt{t}, \quad \text{on } \alpha = \sqrt{\frac{a}{2\beta}}. \quad (4.65)$$

Finalment, substituint a (4.58) a i h que acabem de trobar, coneixerem la distribució de la temperatura $u(x, t)$ per a tot t .

4.3 Existència i unicitat de la solució

Per tal de poder utilitzar qualsevol tipus d'anàlisi numèrica en aquest treball, és important veure que el problema està ben definit, és a dir, que té una única solució, i que aquesta depèn de manera contínua de les dades.

Si existís més d'una solució, qualsevol predicció feta, dependria de la solució que haguessim considerat com la correcta. El fet que la solució depengui contínuament de les dades, és important en els problemes amb aplicacions físiques, ja que ens interessa que la solució no variï massa davant pertorbacions en les condicions inicials.

Donat que el nostre problema de Stefan involucra una equació de la calor, l'objectiu d'aquesta secció serà acabar demostrant la unicitat de l'equació de la calor. Prèviament, haurem de definir alguns conceptes i parlar del principi del màxim: el fet que la calor flueix des de les regions càlides a les fredes implica que la solució de l'equació de la calor homogènia assoleix el seu valor màxim i mínim sobre la frontera del domini Ω en que està definida. Aquest resultat es coneix com a principi del màxim, i constitueix una ajuda a l'hora d'obtenir informació de la solució d'una equació diferencial, inclús quan no tenim cap informació de la solució explícita. Per exemple, és una gran eina a l'hora de buscar una solució aproximada.

La teoria que s'exposa a continuació es pot trobar a [12].

Definició 4.1. *Sigui $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \in \mathbb{N}$, un domini tal que les funcions contínues $a_{ij}(x), b_i(x), c(x) : \mathbb{R} \rightarrow C^0(\Omega)$ per a $i, j = 1, \dots, n$ estan definides. A més, sigui la matriu $(a_{ij}(x))_{i,j=1,\dots,n}$ simètrica $\forall x \in \Omega$. Definim l'operador diferencial parcial lineal de segon ordre $\mathcal{L} : C^2(\Omega) \rightarrow C^0(\Omega)$ com:*

$$\mathcal{L}u(x) := \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(x) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} u(x) + \sum_{i=1}^n b_i(x) \frac{\partial}{\partial x_i} u(x) + c(x)u(x), \quad x \in \Omega.$$

Diem que és **el·líptic** (anàlogament **el·líptic degenerat**), si

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(x) \xi_i \xi_j > 0 \quad \left(\text{anàlogament} \quad \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \geq 0 \right)$$

per a tot $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ i per tot $x \in \Omega$. L'operador \mathcal{L} s'anomena **uniformement el·líptic** quan existeixen constants $0 < m \leq M < +\infty$ tals que

$$m|\xi|^2 \leq \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \leq M|\xi|^2$$

per a tot $\xi \in \mathbb{R}^n$ i per a tot $x \in \Omega$. En el cas en que $c(x) \equiv 0$, usem la notació $\mathcal{M}u(x) := \mathcal{L}u(x)$, $x \in \Omega$ per l'**operador diferencial reduït**.

Proposició 4.2. *Si $\mathcal{M} = \mathcal{M}u$, $u \in C^2(\Omega)$, un operador diferencial el·líptic reduït en el domini $\Omega \in \mathbb{R}^n$. Suposem que la funció u assoleix el màxim en un punt $z \in \Omega$, i.e.*

$$u(x) \leq u(z) \quad \forall x \in \Omega.$$

Aleshores, $\{\mathcal{M}u(x)\}_{x=z} \leq 0$.

Demostració. Aquesta demostració es pot trobar a [12, p. 356]. □

A continuació, demostrarem un principi del màxim per a equacions diferencials parabòliques. Sota el domini acotat $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, donat un $n \in \mathbb{N}$, considerem el *cilindre parabòlic*

$$\Omega_T = \{(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+ \mid x \in \Omega, t \in (0, T]\}$$

amb la temperatura $T \in \mathbb{R}^+$ donada. La *frontera parabòlica* ve determinada pel següent conjunt:

$$\Delta\Omega_T := \{(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+ \mid (x, t) \in (\partial\Omega \times [0, T]) \cup (\Omega \times \{0\})\}.$$

Proposició 4.3. *Si $u = u(x, t) \in C^2(\Omega_t)$ satisfent la inequació diferencial*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) - \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) > 0, \quad (x, t) \in \Omega_T.$$

Aleshores, u no pot assolir el màxim en cap punt de Ω_T .

Demostració. Suposem que u assoleix el seu màxim en un punt $P = (\xi, \tau) \in \Omega_T$.

Si $P \in \mathring{\Omega}_T$, per la proposició 4.2 tenim la desigualtat

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial t} \right) u(\xi, \tau) \leq 0 \quad (4.66)$$

en contradicció amb el que estem suposant. Per tant, $P \in \Omega_T \setminus \mathring{\Omega}_T$ i també $\tau = T$. A més, la desigualtat diferencial implica

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(\xi, T) > \frac{\partial}{\partial t} u(\xi, T) \geq 0. \quad (4.67)$$

Definim la funció $\tilde{u}(x) := u(x, T)$, $x \in \Omega$, que assoleix el seu màxim en un punt $\xi \in \Omega$. Aplicant un altre cop la proposició 4.2 deduïm que $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{u}(\xi) \leq 0$, en contradicció amb (4.67). \square

Proposició 4.4. *Sigui la funció $u = u(x, t) \in C^2(\Omega_T) \cap C^0(\Omega_T \cup \Delta\Omega_T)$ una solució de la inequació diferencial*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) - \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \geq 0, \quad (x, t) \in \Omega_T,$$

complint la condició a la frontera

$$u(x, t) \leq 0, \quad (x, t) \in \Delta\Omega_T.$$

Aleshores $u(x, t) \leq 0$ en $\Omega_T \cup \Delta\Omega_T$.

Demostració. Donat un $\epsilon > 0$, definim la funció $w(x, t) := u(x, t) - \epsilon t$ i observem que

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial t} \right) w(x, t) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial t} \right) u(x, t) + \epsilon \quad \text{en } \Omega_T.$$

I obtenim la següent condició a la frontera per a la funció auxiliar w :

$$w(x, t) = u(x, t) - \epsilon t \leq 0, \quad (x, t) \in \Delta\Omega_T.$$

Per la proposició 4.3, $w(x, t) \leq 0$ i en conseqüència $u(x, t) \leq \epsilon t$ en Ω_T . Prenent el límit quan $\epsilon \rightarrow 0$ acabem amb

$$u(x, t) \leq 0 \quad \text{en } \Omega_T \cup \Delta\Omega_T.$$

\square

Teorema 4.5 (Principi del màxim-mínim parabòlic). *Sigui $u = u(x, t) \in C^2(\Omega_T) \cap C^0(\Omega_T \cup \Delta\Omega_T)$ una solució de l'equació de la calor*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) - \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Omega_T.$$

Aleshores tenim

$$\min_{(\xi, \tau) \in \Delta\Omega_T} u(\xi, \tau) =: m \leq u(x, t) \leq M := \max_{(\xi, \tau) \in \Delta\Omega_T} u(\xi, \tau), \quad (x, t) \in \Omega_T.$$

Demostració. Aplicant la proposició 4.4 a les funcions auxiliars

$$u(x, t) - M \quad \text{i} \quad m - u(x, t), \quad (x, t) \in \Omega_T \cup \Delta\Omega_T,$$

obtenim el resultat esperat de manera immediata. \square

Teorema 4.6 (Unicitat de l'equació de la calor). *Sigui $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \in C^0(\mathbb{R}^n)$ contínua i acotada. Aleshores existeix una única solució u del problema de valors inicials per a l'equació de la calor associada a la funció f , és a dir*

$$\begin{aligned} u &= u(x, t) \in C^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+, \mathbb{R}) \cap C^0(\mathbb{R}^n \times [0, +\infty), \mathbb{R}), \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= 0 \quad \text{en} \quad \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+, \\ u(x, 0) &= f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \\ \sup_{(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+} |u(x, t)| &< +\infty. \end{aligned} \tag{4.68}$$

Demostració. Sigui $u = u(x, t)$ i $v = v(x, t)$ dues solucions de (4.68), i definim

$$M := \sup_{(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+} |u(x, t)| + \sup_{(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+} |v(x, t)| \in [0, +\infty). \tag{4.69}$$

Per a la funció

$$w(x, t) = u(x, t) - v(x, t) \in C^2(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+, \mathbb{R}) \cap C^0(\mathbb{R}^n \times [0, +\infty), \mathbb{R})$$

tenim

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial w}{\partial t}(x, t) &= 0 \quad \text{en} \quad \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+, \\ w(x, 0) &= 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \\ |w(x, t)| &< M \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R}^n \times [0, +\infty). \end{aligned} \tag{4.70}$$

Fixats $T, R \in \mathbb{R}_+$, definim la bola $B_R := \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < R\}$ i considerem el cilindre parabòlic

$$B_{R,T} := \{(x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ : x \in B_R, t \in (0, T]\}$$

amb la frontera parabòlica

$$\Delta B_{R,T} := \{(x, t) \in \overline{B_R} \times [0, T] : x \in \partial B_R \text{ o } t = 0\}.$$

En el domini $B_{R,T}$ considerem la solució $w(x, t)$ del problema (4.70) i la funció

$$W(x, t) := \frac{2nM}{R^2} \left(\frac{|x|^2}{2n} + t \right). \quad (4.71)$$

W satisfà l'equació diferencial

$$\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}(x, t) - \frac{\partial W}{\partial t}(x, t) = \frac{2nM}{R^2}(1 - 1) = 0, \quad (x, t) \in B_{R,T},$$

i dins la frontera parabòlica es compleix la desigualtat següent:

$$|w(x, t)| \leq W(x, t), \quad (x, t) \in \Delta B_{R,T}.$$

De l'aplicació del principi del màxim-mínim parabòlic, en resulta

$$|w(x, t)| \leq W(x, t), \quad (x, t) \in B_{R,T}. \quad (4.72)$$

Prenent el límit quan $R \rightarrow +\infty$ a (4.72) obtenim

$$w(x, t) = 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad t \in (0, T],$$

per un $T \in \mathbb{R}_+$ arbitrari. Per tant, tenim $u(x, t) = v(x, t)$ en $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+$. □

5 Anàlisi numèrica

En la majoria de problemes d'equacions diferencials en derivades parcials, no és possible trobar una solució explícita expressada en termes de funcions elementals. És en aquest punt on els mètodes numèrics són de gran utilitat a l'hora de donar més informació sobre el problema i la seva solució. La contribució de l'anàlisi a aquests problemes està enfocada a trobar condicions que garanteixin l'existència i unicitat de la solució, on el problema està definit en un espai dimensional infinit, a diferència de l'anàlisi numèrica on el problema és discret i definit en un espai dimensional finit.

Tot i que no existeix cap mètode general per trobar la solució d'un problema d'EDPs, sinó que segons el problema que vulguem aproximar podem utilitzar diferents mètodes numèrics, podríem dividir les classes de mètodes en dos. En primer lloc, podem trobar la solució a partir de la suma d'una sèrie de funcions definides al domini, i trobar els coeficients de la sèrie, com per exemple hem vist a les seccions (4.2.3) i (4.2.4). La segona manera de procedir, i amb la que ens centrarem en aquest treball, consisteix en trobar la solució en un nombre finit de punts en el domini de definició, s'anomena mètode de diferències finites.

5.1 Diferències finites

La idea del mètode de diferències finites és l'ús d'aproximacions de les derivades que apareixen a l'EDP mitjançant sumes i diferències dels valors de la funció. Aquests valors estan definits en un conjunt discret de punts, que anomenarem xarxa, uniformement distribuïts. Per mostrar aquest mètode usarem l'equació de la calor unidimensional,

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (5.1)$$

sota les condicions

$$u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad t > 0, \quad i \quad u(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq l.$$

Primer triem un enter $n > 0$ i definim la mida del pas de l'eix de les x com $h = l/n$. Després triem la mida del pas en la variable temporal t , li direm k . Els punts de la xarxa en aquesta situació seran (x_i, t_j) , amb $x_i = ih$, per a $i = 0, 1, \dots, n$, i $t_j = jk$, amb $j = 0, 1, \dots$.

La teoria referent a aquesta secció la podeu trobar a [1].

5.1.1 Mètode de diferències finites endavant

Obtenim el mètode de diferències mitjançant la sèrie de Taylor en t per formar el quocient de diferència

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) = \frac{u(x_i, t_j + k) - u(x_i, t_j)}{k} - \frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j), \quad (5.2)$$

per algun $\mu_j \in (t_j, t_{j+1})$, i la sèrie de Taylor en x per formar el quocient de diferència

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) = \frac{u(x_i + h, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i - h, t_j)}{h^2} - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i, t_j), \quad (5.3)$$

on $\xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$.

L'equació (5.1) implica que als punts interiors de la xarxa $(x_i, t_j) \forall i = 1, 2, \dots, n-1$ i $j = 1, 2, \dots$ tenim

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) = 0,$$

així doncs, el mètode de diferències usant (5.2) i (5.3) és

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0, \quad (5.4)$$

on

$$w_{ij} \approx u(x_i, t_j),$$

i l'equació de l'error de truncament local és

$$\tau_{ij} = \frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i, t_j). \quad (5.5)$$

Resolent (5.4) per a $w_{i,j+1}$ obtenim

$$w_{i,j+1} = \left(1 - \frac{2k}{h^2}\right)w_{ij} + \frac{k}{h^2}(w_{i+1,j} + w_{i-1,j}), \quad (5.6)$$

per a $i = 1, 2, \dots, n-1$ i $j = 1, 2, \dots$.

Aquesta fórmula ens permet calcular explícitament $w_{i,j+1}$ a partir de $w_{i,j}$.

Per a $j = 0$ tenim:

$$w_{i,0} = u(x_i, 0) = f(x_i) \quad \forall i = 0, \dots, n.$$

I generem la següent fila per a t amb

$$\begin{aligned} w_{0,1} &= u(0, t_1) = 0; \\ w_{1,1} &= \left(1 - \frac{2k}{h^2}\right)w_{1,0} + \frac{k}{h^2}(w_{2,0} + w_{0,0}); \\ w_{2,1} &= \left(1 - \frac{2k}{h^2}\right)w_{2,0} + \frac{k}{h^2}(w_{3,0} + w_{1,0}); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \vdots \\ w_{n-1,1} &= \left(1 - \frac{2k}{h^2}\right)w_{n-1,0} + \frac{k}{h^2}(w_{n,0} + w_{n-2,0}); \\ w_{n,1} &= u(n, t_1) = 0. \end{aligned}$$

A partir dels valors de $w_{i,1}$ podrem trobar $w_{i,2}$ i seguirem procedint de la mateixa manera.

La naturalesa explícita del mètode implica que la matriu $(n-1) \times (n-1)$ associada al sistema és tri-diagonal de la forma

$$A = \begin{pmatrix} (1-2\lambda) & \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda & (1-2\lambda) & \lambda & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & (1-2\lambda) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda & (1-2\lambda) \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

on $\lambda = k/h^2$. Si escrivim

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{(0)} &= (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_{n-1}))^t \\ \mathbf{w}^{(j)} &= (w_{1,j}, w_{2,j}, \dots, w_{n-1,j})^t, \quad \forall j = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

aleshores la solució aproximada ve donada per l'expressió

$$\mathbf{w}^{(j)} = A\mathbf{w}^{(j-1)}, \quad \forall j = 1, 2, \dots$$

Si la solució de l'EDP és suficientment diferenciable, per l'equació (5.5), tenim que el mètode de diferències finites endavant és d'ordre $O(k + h^2)$.

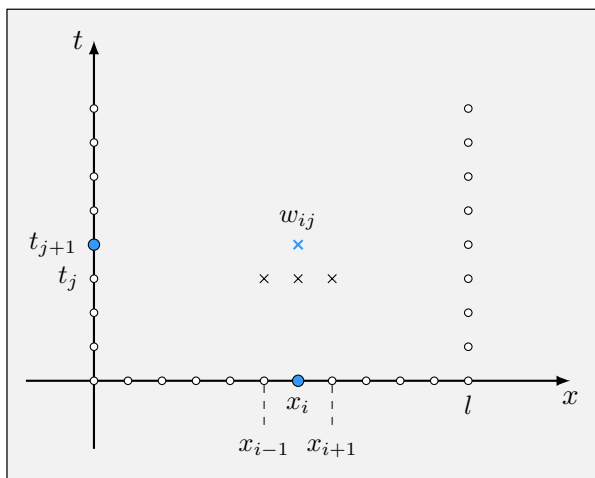


Figura 5.1: Mètode de diferències finites endavant.

Estabilitat

Diem que el mètode numèric és estable, si donat un error inicial en la representació de les dades, a mesura que els càlculs avancen, aquest error no augmenta sinó que disminueix. Anem a veure que el mètode de diferències finites endavant només és estable sota certes condicions, que depenen de la tria dels passos de discretització h i k .

Suposem doncs, que cometem un error inicial $\mathbf{e}^{(0)} = (e_1^{(0)}, e_2^{(0)}, \dots, e_{n-1}^{(0)})^t$ degut a la representació de les dades

$$\mathbf{w}^{(0)} = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_{n-1}))^t.$$

Al calcular $\mathbf{w}^{(1)}$, es propagarà un error $A\mathbf{e}^{(0)}$, ja que

$$\mathbf{w}^{(1)} = A(\mathbf{w}^{(0)} + \mathbf{e}^{(0)}) = A\mathbf{w}^{(0)} + A\mathbf{e}^{(0)}.$$

Si continuem amb el procés, veiem que en el pas j del temps, l'error en $\mathbf{w}^{(j)}$ degut a $\mathbf{e}^{(0)}$ és $A^j\mathbf{e}^{(0)}$. En conseqüència, el mètode serà estable quan aquests errors no creixin a mesura que j augmenta. Això es complirà si per a tot j i per a qualsevol error inicial $\mathbf{e}^{(0)}$, tenim $\|A^j\mathbf{e}^{(0)}\| \leq \|\mathbf{e}^{(0)}\|$. Per tant, necessitarem $\|A^j\| \leq 1$.

Teorema 5.1. *Si A és una matriu $n \times n$, aleshores $\rho(A) \leq \|A\|$, per a una norma natural $\|\cdot\|$.*

Demostració. Sigui λ un valor propi de la matriu A i \mathbf{x} el corresponent vector propi, tal que $\|\mathbf{x}\| = 1$. Tenim $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ i

$$|\lambda| = |\lambda| \cdot \|\mathbf{x}\| = \|\lambda\mathbf{x}\| = \|A\mathbf{x}\| \leq \|A\| \|\mathbf{x}\| = \|A\|.$$

Finalment tenim,

$$\rho(A) = \max |\lambda| \leq \|A\|.$$

□

Pel teorema 5.1, $\|A^j\| \leq 1$ implica que $\rho(A^j) = (\rho(A))^j \leq 1$. Per tant, el mètode de diferències endavant és estable si i només si $\rho(A) \leq 1$.

Veiem quins són els vectors propis de la matriu A :

Lema 5.2. *Sigui B una matriu de dimensió $n \times n$ definida per*

$$B = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Aleshores els valors propis de la matriu B són $\mu_k = 2 \left(1 - \cos \left(\frac{k\pi}{n+1}\right)\right)$, amb vectors propis associats $v_k^i = \sin \left(\frac{ki\pi}{n+1}\right)$ per a $i, k = 1, \dots, n$.

Demostració. La demostració no entra dins dels objectius del treball, la podeu trobar a [7]. \square

Lema 5.3. *Els valors propis de la matriu A de (5.7) són $\delta_k = 1 - 4\lambda \left(\sin \left(\frac{k\pi}{2n}\right)\right)^2$ per a cada $k = 1, 2, \dots, n - 1$.*

Demostració. Podem reescriure A com $A = Id - \lambda B$, on B és la matriu del lema anterior de dimensió $(n - 1) \times (n - 1)$. Si μ_i és un valor propi de B , el valor propi de la matriu A serà $1 - \lambda\mu_i$, $\forall i = 1, \dots, n - 1$. Pel lema 5.2, els valors propis de A seran:

$$\delta_i = 1 - \lambda \left(2 \left(1 - \cos \left(\frac{k\pi}{n}\right)\right)\right), \quad \forall i = 1, \dots, n - 1. \quad (5.9)$$

Utilitzant la identitat trigonomètrica $1 - \cos 2\theta = 2 \sin(\theta)^2$, arribem al resultat esperat:

$$\delta_i = 1 - 4\lambda \left(\sin \left(\frac{k\pi}{2n}\right)\right)^2, \quad \forall i = 1, \dots, n - 1. \quad (5.10)$$

\square

Per tant, la condició d'estabilitat es redueix a determinar si

$$\rho(A) = \max_{1 \leq i \leq n-1} \left| 1 - 4\lambda \left(\sin \left(\frac{k\pi}{2n}\right)\right)^2 \right| \leq 1, \quad (5.11)$$

que podem simplificar a

$$0 \leq \lambda \left(\sin \left(\frac{k\pi}{2n}\right)\right)^2 \leq \frac{1}{2}, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n - 1. \quad (5.12)$$

L'estabilitat del mètode requereix que la desigualtat anterior es compleixi quan $h \rightarrow 0$, o

equivalentment, $m \rightarrow \infty$. Prenent el límit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sin \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \right)^2 = 1, \quad (5.13)$$

tenim que el mètode només és estable si $0 \leq \lambda \leq \frac{1}{2} \iff \frac{k}{h^2} \leq \frac{1}{2}$.

5.1.2 Mètode de diferències finites endarrere

Considerem el mètode implícit que en resulta del quocient de diferència endarrere per a $\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_j)$ de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) = \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})}{k} + \frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j), \quad (5.14)$$

on $\mu_j \in (t_{j-1}, t_j)$. Substituint aquesta equació juntament amb (5.3) en l'equació de la calor, obtenim:

$$\frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})}{k} - \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j))}{h^2} \quad (5.15)$$

$$= -\frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, \mu_j) - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i, t_j), \quad (5.16)$$

per algun $\xi \in (x_{i-1}, x_{i+1})$. El mètode de diferències endarrere resultant és

$$\frac{w_{ij} - w_{i,j-1}}{k} - \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0, \quad (5.17)$$

per cada $i = 1, 2, \dots, n-1$ i $j = 1, 2, \dots$

Aquest mètode utilitza els punts (x_i, t_{j-1}) , (x_{i+1}, t_j) i (x_{i-1}, t_j) de la xarxa per tal d'aproximar (x_i, t_j) , tal i com s'il·lustra en la figura fig. 5.2.

Segons el que mostra la figura, no hi hauria cap mètode explícit per resoldre (5.17). Si λ denota un altre cop k/h^2 , reescrivim el mètode com

$$(1 + 2\lambda)w_{ij} - \lambda w_{i+1,j} - \lambda w_{i-1,j} = w_{i,j-1},$$

per a $i = 1, 2, \dots, n-1$ i $j = 1, 2, \dots$. Amb els valors coneguts de la frontera $w_{i,0} = u(x_i, 0) = f(x_i) \forall i = 1, 2, \dots, n-1$ i $w_{n,j} = w_{0,j} = 0, \forall j = 1, 2, \dots$, podem representar-

lo mitjançant el sistema matricial

$$\begin{pmatrix} (1+2\lambda) & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ -\lambda & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\lambda \\ 0 & \cdots & 0 & -\lambda & (1+2\lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_{1,j} \\ w_{2,j} \\ \vdots \\ w_{n-1,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{1,j-1} \\ w_{2,j-1} \\ \vdots \\ w_{n-1,j-1} \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

per a cada $j = 1, 2, \dots$. D'aquesta manera haurem de resoldre un sistema lineal per obtenir $\mathbf{w}^{(j)}$ de $\mathbf{w}^{(j-1)}$, on pel fet que $\lambda > 0$, la matriu A és definida positiva, estrictament diagonal dominant i tri-diagonal.

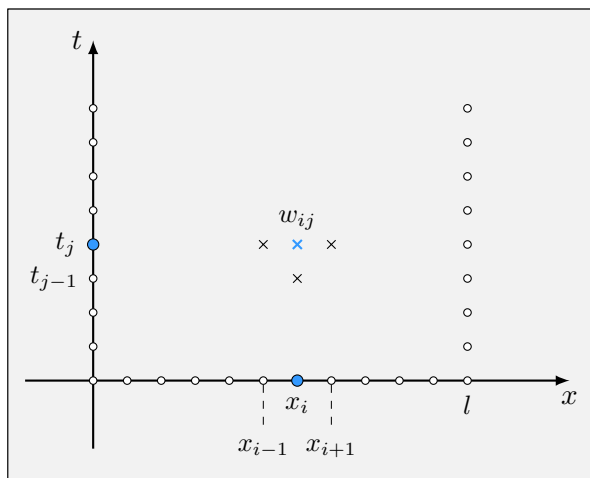


Figura 5.2: Mètode de diferències finites endarrerades.

Estabilitat

A diferència del mètode de diferències finites endavant, aquest mètode no comporta els problemes d'estabilitat de l'altre. Veiem-ho analitzant els valors propis de la matriu del sistema (5.18), diguem-li A . De la mateixa manera que a la secció anterior, podem veure que els valors propis són

$$\mu_i = 1 + 4\lambda \left(\sin \left(\frac{i\pi}{2n} \right) \right)^2, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n-1.$$

Com que $\lambda > 0$, per tot $i = 1, 2, \dots, n-1$ tenim $\mu_i > 1$. Donat que els valors propis de la matriu inversa A^{-1} seran $1/\mu_i$, tindrem $\rho(A^{-1}) < 1$. Això implica que la matriu A^{-1} és convergent.

Un error $\mathbf{e}^{(0)}$ en les dades inicials, produirà un error $(A^{-1})^j \mathbf{e}^{(0)}$ al pas j del mètode de

diferències finites endarrere. Com A^{-1} és convergent,

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (A^{-1})^j \mathbf{e}^{(0)} = \mathbf{0}.$$

Així doncs, hem vist que el mètode és estable independentment de l'elecció de λ .

La fragilitat d'aquest mètode resulta del fet que l'error de truncament local té un d'ordre $O(h^2)$ i l'altre d'ordre $O(k)$, fet que requereix l'elecció d'interval de temps molt més petits que els intervals de l'eix de les x 's. Per obtenir un procediment amb un error de l'ordre de $O(k^2 + h^2)$, el primer pas seria usar una equació de diferències amb un error d' $O(k^2)$ per a $u_t(x, t)$. Amb la sèrie de Taylor en t per $u(x, t)$ en el punt (x_i, t_j) i evaluant a (x_i, t_{j+1}) i (x_i, t_{j-1}) obtenim la fórmula de diferències centrada

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_{j-1})}{2k} + \frac{k^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_i, \mu_j), \quad (5.19)$$

on $\mu_j \in (t_{j-1}, t_{j+1})$. El mètode de diferències finites que resulta de substituir aquest quocient de diferència i el de l'equació (5.3) per a $(\partial^2 u / \partial x^2)$, s'anomena **mètode de Richardson**, i té un error de truncament local de l'ordre de $O(k^2 + h^2)$, però desafortunadament presenta seriosos problemes d'estabilitat.

5.1.3 Crank-Nicolson

Un mètode encara millor, s'obté en fer la mitjana del mètode de diferències endavant en el pas j en t (5.4), amb el mètode de diferències endarrere en el pas $j + 1$ en t ,

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{h^2} = 0, \quad (5.20)$$

amb errors de truncament locals respectius

$$\tau_F = \frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) + O(h^2), \quad \tau_B = -\frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, \hat{\mu}_j) + O(h^2).$$

Si suposem que

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) \approx \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, \hat{\mu}_j),$$

el mètode de diferències mitjanes

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} + \frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{h^2} \right) = 0$$

5.2 Anàlisi asimptòtica

El problema (4.2) té una degeneració quan $t \rightarrow 0$, ja que el gruix de la regió líquida és inicialment 0 d'acord amb la condició $h(0) = 0$. Per tal d'abordar aquest problema, serà convenient fer el següent canvi de variables, tal i com es proposa en [10]: Sigui

$$\xi = \frac{x}{h(t)}, \quad u = s(t)F(\xi, t), \quad (5.24)$$

on l'elecció de $s(t)$ és tal que assegura que el problema estigui ben definit quan $t \rightarrow 0$. Amb aquestes noves coordenades, la derivada temporal es transforma en

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{ds}{dt}(t)F(\xi, t) + s(t) \left(\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} \right) = \frac{ds}{dt}F + s \left(\frac{\partial F}{\partial t} - \frac{\xi}{h} \frac{dh}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi} \right), \quad (5.25)$$

i la derivada espacial de primer i segon ordre seran respectivament

$$\frac{\partial u}{\partial x} = s(t) \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{s(t)}{h(t)} \frac{\partial F}{\partial \xi} \quad (5.26)$$

i

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{s(t)}{h(t)} \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{s}{h^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2}. \quad (5.27)$$

Igualant (5.25) i (5.27) acabem amb

$$s \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = h \left(h \frac{ds}{dt} F + h s \frac{\partial F}{\partial t} - \xi \frac{dh}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi} \right). \quad (5.28)$$

5.2.1 Per a una condició a la frontera constant

Triant $f(t) = 1$ a (4.2b) tindrem

$$s \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = h \left(h \frac{ds}{dt} F + h s \frac{\partial F}{\partial t} - \xi \frac{dh}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \quad (5.29a)$$

sota les condicions

$$F = 0, \quad \text{en } \xi = 1, \quad (5.29b)$$

$$F = \frac{1}{s(t)}, \quad \text{en } \xi = 0, \quad (5.29c)$$

$$\beta h \frac{dh}{dt} = -s \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad \text{en } \xi = 1. \quad (5.29d)$$

Hem de triar una funció s que ens asseguri la independència de $F(0, t)$ respecte t quan $t \rightarrow 0$. Per això, clarament l'ideal serà agafar $s(t) = cte$ i per simplificar, $s(t) = 1$.

Agafant la solució de la frontera mòbil $h(t) = 2\lambda\sqrt{t}$, el sistema (5.29) es redueix en

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = -2\lambda^2 \xi \frac{\partial F}{\partial \xi} \quad (5.30)$$

amb

$$F(1) = 0, \quad F(0) = 1, \quad 2\lambda^2 \beta = - \left. \frac{\partial F}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} \quad (5.31)$$

quan $t \rightarrow 0$. Aquest sistema té solució

$$F(\xi) = 1 - \frac{\operatorname{erf}(\lambda\xi)}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (5.32)$$

on λ satisfà l'equació transcendental (4.34).

5.2.2 Per a una condició a la frontera dependent del temps

En aquesta ocasió agafarem $f(t) = e^t - 1$ a (4.2b). Amb aquesta condició a la frontera, la solució exacte del problema (4.2) (amb $\beta = 1$) és

$$u(x, t) = e^{t-x} - 1, \quad h(t) = t. \quad (5.33)$$

En aquest cas, la condició a la frontera queda així:

$$F = \frac{e^t - 1}{s(t)}, \quad \xi = 0, \quad (5.34)$$

i com abans, hem de triar s tal que $\lim_{t \rightarrow 0} F(0, t)$ no depengui de t . La sèrie de Taylor de $f(t)$ al voltant de $t = 0$,

$$f(t) \sim t + \frac{t^2}{2} + \frac{t^3}{3!} + O(t^4),$$

ens suggereix que una bona tria serà $s(t) = t$, i analitzant (5.29d), tenim

$$h \frac{dh}{dt} = O(t).$$

Aquest fet, implica que per a alguna constant $\lambda > 0$, $h(t) \sim \lambda t$. Aleshores, el sistema quan $t \rightarrow 0$ es transforma en

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = 0, \quad (5.35)$$

$$F(1) = 0, \quad F(0) = 1, \quad \beta\lambda^2 = - \left. \frac{\partial F}{\partial \xi} \right|_{\xi=1}, \quad (5.36)$$

i té solució

$$F(\xi) = 1 - \xi, \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{\beta}}. \quad (5.37)$$

5.3 Resolució numèrica del problema de Stefan

Un cop hem vist els mètodes de diferències finites per a l'aproximació de solucions de problemes de valors a la frontera, i havent conclòs que el mètode de Crank-Nicolson és incondicionalment estable i a més de segon ordre per a les variables espacial i temporal, serà aquest el mètode que utilitzarem a continuació per aproximar el problema de Stefan, suposant que la discretització de ξ i t és uniforme.

5.3.1 Per a una condició a la frontera constant

Per al cas en que $f(t) = 1$, tenim $s(t) = 1$ en el sistema (5.29). Fent el canvi de variable $z(t) = h(t)^2$ per alleujar la notació l'equació (5.29a) es transforma en:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = z \frac{ds}{dt} + zs \frac{\partial F}{\partial t} - \frac{\xi}{2} \frac{dz}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi} \quad (5.38a)$$

i substituint $s(t) = 1$, el sistema (5.29) ens queda:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = z \frac{\partial F}{\partial t} - \xi t \frac{dz}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad (5.38b)$$

$$F = 1, \quad \xi = 0, \quad (5.38c)$$

$$F = 0, \quad \xi = 1, \quad (5.38d)$$

$$\frac{\beta}{2} \frac{dz}{dt} = - \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad \xi = 1, \quad (5.38e)$$

amb la condició $z(0) = 0$. Aplicant el mètode de Crank-Nicolson de la mateixa manera que a la secció 5.1.3, amb passos de discretització h^6 i k , per a cada $i = 1, 2, \dots, n - 1$ i per a cada $j = 0, 1, 2, \dots$ tenim:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}}{h^2} + \frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{h^2} \right) =$$

⁶D'ara en endavant s'usa la mateixa notació per fer referència al pas de discretització h i a la frontera mòbil $h(t)$, suposant que pel context, s'entendrà quan estem parlant d'un i l'altre.

$$\frac{z_j + z_{j+1}}{2} \left(\frac{w_{i,j+1} - w_{i,j}}{k} \right) - \frac{\xi_i}{2} \frac{z_{j+1} - z_j}{k} \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+1,j} - w_{i-1,j}}{2h} + \frac{w_{i+1,j+1} - w_{i-1,j+1}}{2h} \right). \quad (5.39)$$

Amb les condicions a la frontera:

$$\begin{cases} w_{n,j+1} = 0, \\ w_{0,j+1} = 1, \\ \frac{\beta}{2} \frac{z_{j+1} - z_j}{k} = -\frac{1}{2} \left(\frac{w_{n+1,j+1} - w_{n-1,j+1}}{2h} + \frac{w_{n+1,j} - w_{n-1,j}}{2h} \right). \end{cases} \quad (5.40)$$

On, $w_{i,j} \approx F(\xi_i, t_j)$.

Per poder aproximar-ho numèricament, hem d'escriure (5.39) en forma matricial, tenint en compte la condició inicial (5.38c). Reagrupant els termes amb $w_{i,j}$ i $w_{i,j+1}$ a l'esquerra i la dreta respectivament, obtenim:

$$L' = \frac{1}{2h^2} (w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}) - \frac{z_j + z_{j+1}}{2} \frac{1}{k} w_{i,j+1} + \frac{\xi_i}{2} \frac{z_{j+1} - z_j}{k} \frac{1}{4h} (w_{i+1,j+1} - w_{i-1,j+1}) \quad (5.41)$$

i

$$R' = -\frac{1}{2h^2} (w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}) - \frac{z_j - z_{j+1}}{2} \frac{1}{k} w_{i,j} - \frac{\xi_i}{2} \frac{z_{j+1} - z_j}{k} \frac{1}{4h} (w_{i+1,j} - w_{i-1,j}) \quad (5.42)$$

Per tenir en compte la condició a la frontera a $i = 0$, $w_{0,j+1} = 1$, en el sistema matricial, avaluem l'equació (5.41) (anàlogament (5.42)) a $i = 1$:

$$L'_{i=1} = \frac{1}{2h^2} (w_{2,j+1} - 2w_{1,j+1} + 1) - \frac{z_j + z_{j+1}}{2} \frac{1}{k} w_{1,j+1} + \frac{\xi_1}{2} \frac{z_{j+1} - z_j}{k} \frac{1}{4h} (w_{2,j+1} - 1). \quad (5.43)$$

Aquesta condició, generarà dos vectors constants que podem unir en

$$C = \begin{pmatrix} \frac{1}{2h^2} - \frac{\xi_1}{2} \frac{z_{j+1} - z_j}{k} \frac{1}{4h} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

A més, de (5.41), en podem extreure dos matrius de coeficients:

$$A = \frac{1}{2h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad i \quad B = \frac{1}{8h} \begin{pmatrix} 0 & \xi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\xi_2 & 0 & \xi_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \xi_{n-2} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -\xi_{n-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.45)$$

Amb això, podem escriure el sistema (5.39) en la forma matricial

$$L\mathbf{w}^{(j+1)} = R\mathbf{w}^{(j)} - 2C, \quad (5.46)$$

on

$$L = A - \frac{z_j + z_{j+1}}{2} \frac{1}{k} \text{Id}_{(n-1)} + \frac{z_{j+1} - z_j}{k} B, \quad (5.47)$$

$$R = -A - \frac{z_j + z_{j+1}}{2} \frac{1}{k} \text{Id}_{(n-1)} - \frac{z_{j+1} - z_j}{k} B. \quad (5.48)$$

La condició de Stefan aproximada de (5.40) inclou els valors ficticis $w_{n+1,j+1}$ i $w_{n+1,j}$. Per tal d'eliminar-los, avaluem (5.39) a $i = n$, i després d'alguns càlculs, arribarem a la següent equació de segon grau per a z_{j+1}

$$\frac{\beta\xi_n}{2k} (z_{j+1})^2 + \left(-\frac{\beta\xi_n}{k} z_j + \frac{2\beta}{h} \right) z_{j+1} + \frac{\beta\xi_n}{2k} z_j^2 - \frac{2\beta}{h} z_j - 2\frac{k}{h^2} (w_{n-1,j+1} + w_{n-1,j}) = 0. \quad (5.49)$$

Diagrama de flux

- Declarem totes les constants i guardem memòria dinàmica per als vectors i les matrius tri-diagonals.
- Per trobar el valor de λ , donat un β , hem de resoldre l'equació transcendental (4.34). Trobarem λ amb el mètode de Newton-Raphson:

$$\lambda_{i+1} = \lambda_i - \frac{g(\lambda_i)}{g'(\lambda_i)},$$

on $g(x) = \sqrt{\pi}\beta x e^{x^2} \text{erf}(x) - 1$, i prenent inicialment $\lambda_0 = 1/(\sqrt{\pi}\beta)$.

- Iterem el problema sencer per al temps, fins a un temps màxim: $j = 1, 2, \dots, NT$.

Donat que el problema implica trobar el valor de z_{j+1} , inicialment considerarem $z_{j+1} = z_j$ i iterarem el valor de z_{j+1} fins a assolir una certa tolerància. Això és:

- Resolem el sistema (5.46) mitjançant la factorització LU, i.e. descomponem la matriu L en dues matrius triangulars inferior i superior \tilde{L} i \tilde{U} , i si $b = R\mathbf{w}^{(j)} - 2C$, fem el següent:

$$L\mathbf{w}^{(j+1)} = \tilde{L}\tilde{U}\mathbf{w}^{(j+1)} = b \implies \tilde{L}y = b, \quad \tilde{U}\mathbf{w}^{(j+1)} = y.$$

- Resolent l'equació quadràtica (5.49) trobem el valor de z_{j+1} , quedant-nos amb la solució positiva.
- Per a cada iteració del temps, desfem el canvi de variables per a la temperatura i la frontera mòbil, és a dir:

$$u(\mathbf{x}, t_{j+1}) = \mathbf{1} \cdot \mathbf{w}^{(j+1)},$$

$$h(t_{j+1}) = \sqrt{z_{j+1}}.$$

Imprimim els valors en fitxers per després fer les gràfiques respecte les solucions exactes, i les gràfiques de l'error en les solucions numèriques.

5.3.2 Per a una condició a la frontera dependent del temps

Per al cas en que $f(t) = e^t - 1$, tenim $s(t) = t$ i el sistema a aproximar serà:

$$t \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} = h \left(hF + ht \frac{\partial F}{\partial t} - \xi t \frac{dh}{dt} \frac{\partial F}{\partial \xi} \right), \quad (5.50a)$$

$$F = \frac{e^t - 1}{t}, \quad \xi = 0, \quad (5.50b)$$

$$F = 0, \quad \xi = 1, \quad (5.50c)$$

$$\beta h \frac{dh}{dt} = -t \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad \xi = 1, \quad (5.50d)$$

amb $h(0) = 0$. Aplicant el mètode de Crank-Nicolson de la mateixa manera que a la secció 5.1.3, per a cada $i = 1, 2, \dots, n-1$, per a cada $j = 0, 1, 2, \dots$ i amb $w_{i,j} \approx F(\xi_i, t_j)$ tenim:

$$\frac{t_j + t_{j+1}}{2} \left(\frac{w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}}{2h^2} + \frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{2h^2} \right) =$$

$$\left(\frac{h_j + h_{j+1}}{2} \right)^2 \left(\frac{w_{i,j} + w_{i,j+1}}{2} + \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{w_{i,j+1} - w_{i,j}}{k} \right) -$$

$$\xi_i \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \frac{h_{j+1} - h_j}{k} \frac{1}{2} \left(\frac{w_{i+1,j} - w_{i-1,j}}{2h} + \frac{w_{i+1,j+1} - w_{i-1,j+1}}{2h} \right), \quad (5.51)$$

amb les condicions a la frontera:

$$\begin{cases} w_{n,j+1} = 0, \\ \frac{1}{2}(w_{0,j+1} + w_{0,j}) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{t_{j+1}} - 1}{t_{j+1}} + \frac{e^{t_j} - 1}{t_j} \right) \\ \beta \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \frac{h_{j+1} - h_j}{k} = -\frac{1}{2} \left(\frac{t_j + t_{j+1}}{2} \right) \left(\frac{w_{n+1,j+1} - w_{n-1,j+1}}{2h} + \frac{w_{n+1,j} - w_{n-1,j}}{2h} \right). \end{cases} \quad (5.52)$$

Per aproximar numèricament (5.50), hem de reescriure (5.51) en forma matricial, tenint en compte la condició a $\xi = 0$: $\frac{1}{2}(w_{0,j+1} + w_{0,j}) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{t_{j+1}} - 1}{t_{j+1}} + \frac{e^{t_j} - 1}{t_j} \right)$. Per això, avaluem (5.51) a $i = 1$, i després substituïm $(w_{0,j+1} + w_{0,j})$ per $\left(\frac{e^{t_{j+1}} - 1}{t_{j+1}} + \frac{e^{t_j} - 1}{t_j} \right)$:

$$\begin{aligned} & \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \left(\frac{w_{2,j} - 2w_{1,j}}{2h^2} + \frac{w_{2,j+1} - 2w_{1,j+1}}{2h^2} \right) + \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{1}{2h^2} \left(\frac{e^{t_{j+1}} - 1}{t_{j+1}} + \frac{e^{t_j} - 1}{t_j} \right) = \\ & \left(\frac{h_j + h_{j+1}}{2} \right)^2 \left(\frac{w_{1,j} + w_{1,j+1}}{2} + \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{w_{1,j+1} - w_{1,j}}{k} \right) - \\ & \xi_1 \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \frac{h_{j+1} - h_j}{k} \frac{1}{4h} \left[(w_{2,j} + w_{2,j+1}) - \left(\frac{e^{t_{j+1}} - 1}{t_{j+1}} + \frac{e^{t_j} - 1}{t_j} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Podem reagrupar els termes en el següent vector:

$$C(t) = \begin{pmatrix} \left(- \left(\frac{t_j + t_{j+1}}{2} \right) \frac{1}{2h^2} + \xi_1 \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \frac{h_{j+1} - h_j}{k} \frac{1}{4h} \right) \left(\frac{e^{t_{j+1}} - 1}{t_{j+1}} + \frac{e^{t_j} - 1}{t_j} \right) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.54)$$

Reagrupant (5.51), obtindrem el sistema matricial

$$L\mathbf{w}^{(j+1)} = R\mathbf{w}^{(j)} + C(t), \quad (5.55)$$

on

$$L := \frac{t_j + t_{j+1}}{2} A - \left(\frac{h_j + h_{j+1}}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{2} + \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{1}{k} \right) \text{Id}_{(n-1)} + \quad (5.56)$$

$$\frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \frac{h_{j+1} - h_j}{k} B, \quad (5.57)$$

$$R := -\frac{t_j + t_{j+1}}{2} A + \left(\frac{h_j + h_{j+1}}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{1}{k} \right) \text{Id}_{(n-1)} - \quad (5.58)$$

$$\frac{t_j + t_{j+1}}{2} \frac{h_j + h_{j+1}}{2} \frac{h_{j+1} - h_j}{k} B. \quad (5.59)$$

i les matrius de coeficients A i B són:

$$A = \frac{1}{2h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & 1 & & & \\ & 0 & & & 0 \\ & \vdots & & & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{4h} \begin{pmatrix} 0 & \xi_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\xi_2 & 0 & \xi_2 & & \\ 0 & & & & 0 \\ \vdots & & & & \xi_{n-2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\xi_{n-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.60)$$

Per actualitzar el valor de h_{j+1} , farem servir la condició de Stefan de (5.52), però donat que aquesta conté els valors ficticis $w_{n+1,j+1}$ i $w_{n+1,j}$, els haurem d'eliminar tal i com he fet en l'apartat anterior, avaluant el sistema (5.55) a $i = n$. Arribarem a la següent equació de quart grau per a h_{j+1} :

$$2 \frac{k}{h^2} (t_{j+1} + t_j) (w_{n-1,j+1} + w_{n-1,j}) - \frac{4\beta h}{k} \left(\frac{k}{h^2} + \frac{\xi_n}{4h} (h_{j+1}^2 - h_j^2) \right) (h_{j+1}^2 - h_j^2) = 0. \quad (5.61)$$

Diagrama de flux

- Declarem totes les constants i guardem memòria dinàmica per als vectors i les matrius tri-diagonals.
- Iterem el problema sencer per al temps, fins a un temps màxim: $j = 1, 2, \dots, NT$. Donat que el problema implica el valor de h_{j+1} , inicialment considerem $h_{j+1} = h_j$ i iterem el valor de h fins a assolir una certa tolerància.
 - Vigilem amb el cas degenerat quan $t \rightarrow 0$ per a $j = 1$, els valors dels quals hem analitzat a la secció 5.2.
 - Calculem $C(t_j)$.
 - Resolem el sistema (5.55) mitjançant la factorització LU, i.e. descomponem la matriu L en dues matrius triangulars inferior i superior \tilde{L} i \tilde{U} , i si $b = R\mathbf{w}^{(j)} + C(t)$, fem el següent:

$$L\mathbf{w}^{(j+1)} = \tilde{L}\tilde{U}\mathbf{w}^{(j+1)} = b \implies \tilde{L}y = b, \quad \tilde{U}\mathbf{w}^{(j+1)} = y.$$

- Actualitzem h_{j+1} amb l'equació quàrtica (5.61), que resolem amb el mètode de Newton-Raphson.

- Per a cada iteració del temps, desfem el canvi de variables per a la temperatura i la frontera mòbil, és a dir:

$$\begin{aligned}u(\mathbf{x}, t_{j+1}) &= t_{j+1} \cdot \mathbf{w}^{(j+1)}, \\h(t_{j+1}) &= h_{j+1}.\end{aligned}$$

Imprimim els valors en fitxers per després fer les gràfiques respecte les solucions exactes, i les gràfiques de l'error en les solucions numèriques.

5.4 Anàlisi d'errors

En aquesta secció volem analitzar els resultats obtinguts per a les dues condicions a la frontera, que en aquest cas hem pogut comparar amb la solució analítica.

En tots els càlculs hem pres $k = h$. Seguint [10], per mesurar l'error en la temperatura considerarem la successió $\{h_k\}_{k \in \mathbb{N}}$, on

$$h_0 = 0.1, \quad h_k = 2^{-k}h_0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.62)$$

I per a l'obtenció de z_{j+1} i h_{j+1} a (5.39) i (5.51) respectivament, iterarem sobre z_{j+1} (resp. h_{j+1}) fins a assolir la tolerància desitjada, diguem-li ϵ . Si denotem per $z_{n,j+1}$ i $h_{n,j+1}$ l' n -èssim valor iterat de z_{j+1} i h_{j+1} , podem escriure el criteri de convergència emprat de la següent manera:

$$|z_{n+1,j+1} - z_{n,j+1}| < \epsilon, \quad |h_{n+1,j+1} - h_{n,j+1}| < \epsilon. \quad (5.63)$$

Per exemple, agafant $\epsilon = 1 \times 10^{-13}$, i $h = 0.1$, ens han calgut com a màxim 16 iteracions per trobar h_{j+1} i 47 per trobar z_{j+1} . Dividint el pas h per 10, és a dir amb $h = 0.01$, han calgut 11 iteracions per trobar h_{j+1} i com a màxim 67 per trobar z_{j+1} . S'ha de dir, que les iteracions necessàries per trobar z_{j+1} disminueixen ràpidament a mesura que avancem en el temps (augmentem j).

Resultats per a $h(t)$:

L'error per a la frontera mòbil al temps t_j ve donat per

$$|h(t_j) - h_j|. \quad (5.64)$$

Podem veure que els errors obtinguts en l'aproximació de $h(t)$ són deguts a la discretització de x . A l'Annex A es poden trobar les gràfiques de l'error en qüestió, on es pot comprovar visualment que els errors en l'aproximació de la frontera mòbil són de l'ordre $O(h^2)$.

Resultats per a $u(x, t)$:

Per a la temperatura, comprovarem experimentalment l'ordre de Crank-Nicolson. Si denotem per $u(x_i, t_j)$ la solució exacte a $x = x_i$ i $t = t_j$, i $w_{i,j}$ la solució numèrica, l'error en el temps t_j el mesurarem amb la norma $l_{2,h}$:

$$E_j := \|u_j - w_j\|_{2,h} = \left(h \sum_{i=0}^n (u(x_i, t_j) - w_{i,j})^2 \right)^{1/2}. \quad (5.65)$$

L'ordre de convergència ve definit per p , en cas de que existeixi, on

$$E_j = O(h^p). \quad (5.66)$$

Fixem $j = n$ i definim la successió

$$E_n^k = \left(h_k \sum_{i=0}^{n_k} (u(x_i, t_n) - w_{i,n})^2 \right)^{1/2}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (5.67)$$

una aproximació de l'ordre, \tilde{p} , es pot obtenir a partir de dos valors consecutius E_n^k i E_n^{k+1} amb la següent fórmula:

$$\tilde{p} = \frac{\ln(E_n^k/E_n^{k+1})}{\ln(h_k/h_{k+1})} = \frac{\ln(E_n^k/E_n^{k+1})}{\ln(2)}. \quad (5.68)$$

A les taules 5.1 i 5.2, es mostren els errors en la temperatura i el càlcul de l'ordre aproximat, per a al condició a la frontera constant. Podem veure que en aquest cas, per als dos valors de $\beta = \{0.2, 2\}$ el nombre \tilde{p} tendeix a 2 quan $h \rightarrow 0$, com podíem esperar, sabent que Crank-Nicolson és d'ordre $O(h^2 + k^2) \underset{k=h}{=} O(h^2)$.

k	h_k	Error(n)	Ordre aproximat, \tilde{p}
0	1/10	2.21516×10^{-4}	
1	1/20	5.50066×10^{-5}	2.009732
2	1/40	1.37141×10^{-5}	2.003887
3	1/80	3.42313×10^{-6}	2.002330
4	1/160	2.19047×10^{-7}	2.001478

Taula 5.1: Ordre de convergència de la solució numèrica, fent servir (5.68), per w al temps fixat $t_j = 1$, per a la condició a la frontera $f(t) = 1$, i $\beta = 0.2$.

k	h_k	Error(n)	Ordre aproximat, \tilde{p}
0	1/10	1.20289×10^{-4}	
1	1/20	2.92034×10^{-5}	2.042293
2	1/40	7.19168×10^{-6}	2.021734
3	1/80	1.78460×10^{-6}	2.010731
4	1/160	4.44416×10^{-7}	2.005615

Taula 5.2: Ordre de convergència de la solució numèrica, fent servir (5.68), per w al temps fixat $t_j = 1$, per a la condició a la frontera $f(t) = 1$, i $\beta = 2$.

6 Conclusions

Aquest treball ha servit per introduir el problema de Stefan, treballant el cas unidimensional definit en un interval semi-infinit. Per trobar la condició de Stefan, hem considerat la mateixa densitat per a la fase líquida i la sòlida, fet que a la realitat, un procés de fusió i solidificació comporta sempre un canvi de densitat, traduït físicament en una contracció o expansió d'una de les fases. Aquest canvi de densitat esdevindria en un nou terme a l'equació de la calor, i en conseqüència també canviaria l'aspecte de la condició de Stefan. Tenint en compte el canvi de densitat entre fases, s'eleva el grau de complexitat del problema. Per exemple a [3], s'estudia la influència del canvi de densitat per a un problema de Stefan en particular.

Una altre simplificació del problema que hem fet, ha sigut la de prendre la temperatura de la fase sòlida a la mateixa temperatura que la del canvi de fase. El problema de Stefan de dos fases que hem descrit a l'inici de la secció 4, acostuma a ser més complicat de resoldre al haver de trobar la solució de les dues equacions de la calor en una frontera mòbil, a priori desconeguda, a més de la inclusió d'un nou terme en la condició de Stefan, com hem vist a la secció 3.2.

Per trobar la solució numèrica primer hem comparat tres mètodes de diferències finites: un explícit, un implícit, i Crank-Nicolson. Hem triat l'últim dels tres ja que té una convergència de segon ordre tant per a la variable espacial, com per la temporal i és incondicionalment estable. Tot i que la implementació del mètode de Crank-Nicolson és més feixuga, el mètode de diferències finites endavant presenta problemes d'estabilitat per segons quina sigui l'elecció dels passos de discretització, i el mètode de diferències finites endarrere presenta ordres de convergència diferents per a la variable temporal i espacial.

Per acabar, podem dir que hem assolit els objectius que ens havíem plantejat a l'inici del treball, tot i així, com hem vist, el problema ofereix un gran ventall d'oportunitats per continuar estudiant-lo. Començant per l'estudi del problema de dos fases, o el problema tenint en compte el canvi de densitat entre fases. En aquest treball només hem treballat amb una condició a la frontera dependent del temps, però podríem considerar altres condicions a la frontera per tal de donar-li més realisme al problema. També podríem treballar amb problemes on la temperatura al canvi de fase depèn del temps, amb el qual reduir el problema a una fase no seria trivial. Evidentment sempre tindrem la opció d'augmentar la dimensió, però el nivell de complexitat augmentarà juntament amb la dimensió.

Gran part dels coneixements bàsics referents a l'anàlisi numèrica, han estat treballats a l'assignatura "Mètodes Numèrics II" del tercer curs del grau. Els coneixements bàsics d'equacions en derivades parcials els hem anat aprenent durant el desenvolupament del projecte, al no haver cursat l'optativa del quart curs amb el mateix nom.

Annexos

A Gràfiques

A continuació, presentem les gràfiques de la solució aproximada del problema descrit a (4.2). Les que representarem aquí, són per a

$$n = 10,$$

$$k = h = 1/n,$$

$$\beta = \{0.2, 2\}, \quad \text{per a la condició a la frontera constant,}$$

$$\beta = 1, \quad \text{per a la condició a la frontera dependent del temps.}$$

A.1 Per a la condició a la frontera constant amb $\beta = 0.2$

Fent servir el mètode descrit a la secció 5.3.1 presentem les gràfiques de les solucions per a la frontera mòbil $h(t)$, la distribució de temperatura $u(x, t)$ (fig. A.1 i fig. A.3) i els errors respectius definits a la secció 5.4 (fig. A.2 i fig. A.4).

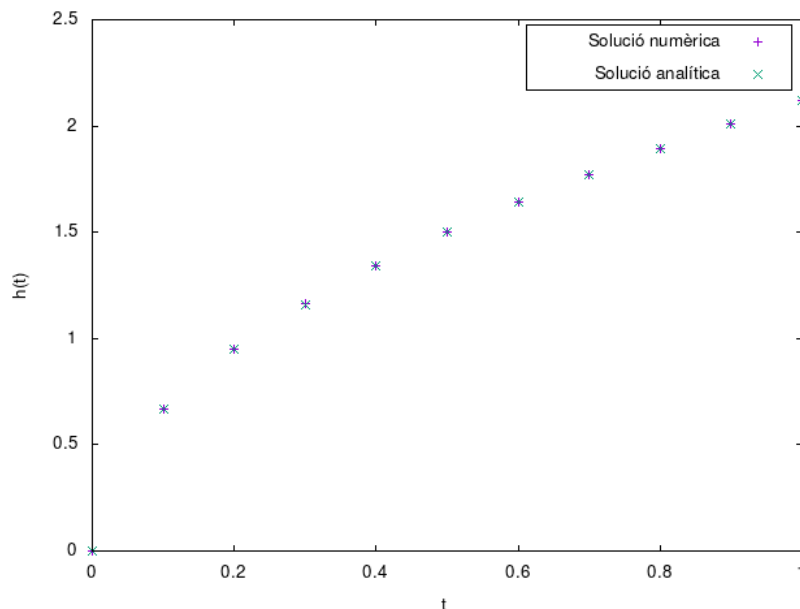


Figura A.1: Gràfica de la posició de la frontera mòbil $h(t)$ respecte el temps t , per a la solució numèrica i l'anàlítica, prenent $\beta = 0.2$.

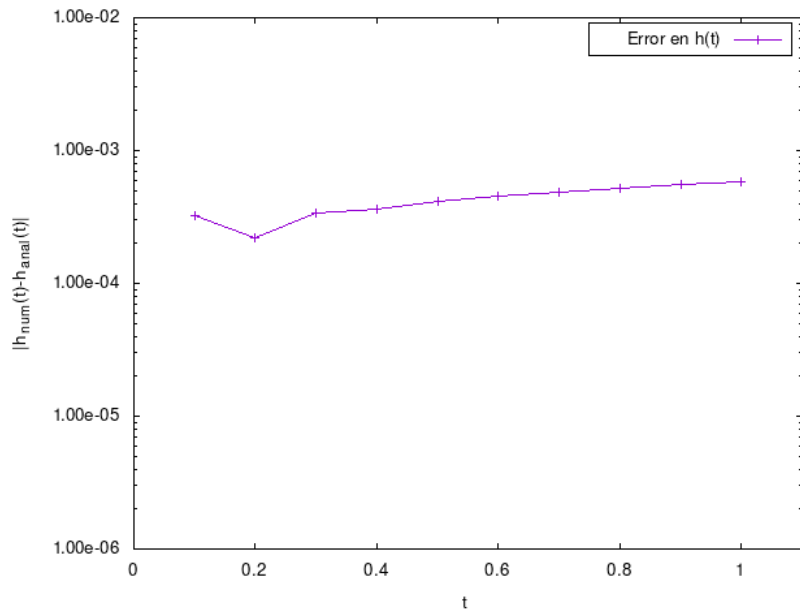


Figura A.2: Gràfica de l'error comès en l'aproximació de $h(t)$, prenent $\beta = 0.2$. Escala logarítmica.

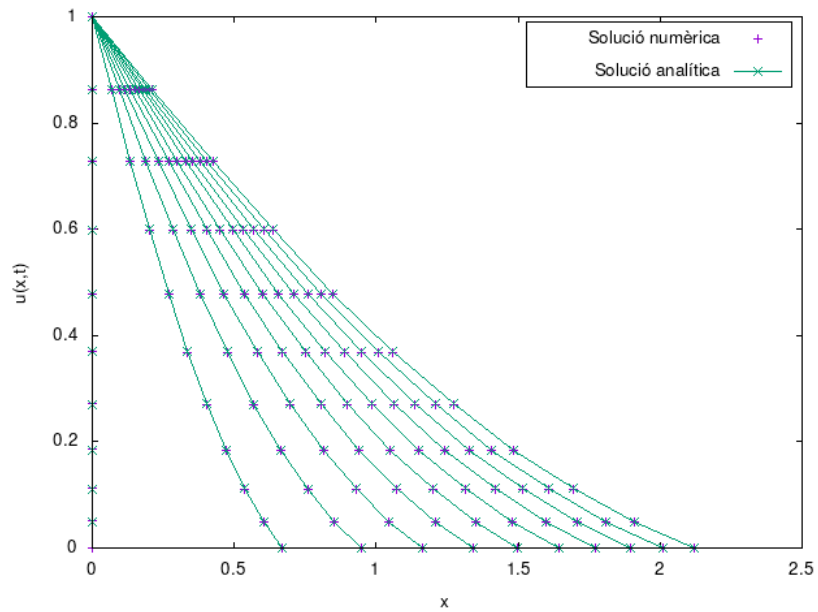


Figura A.3: Gràfica de la distribució de temperatura $u(x, t)$ respecte la posició x , per a la solució numèrica i l'analítica, prenent $\beta = 0.2$.

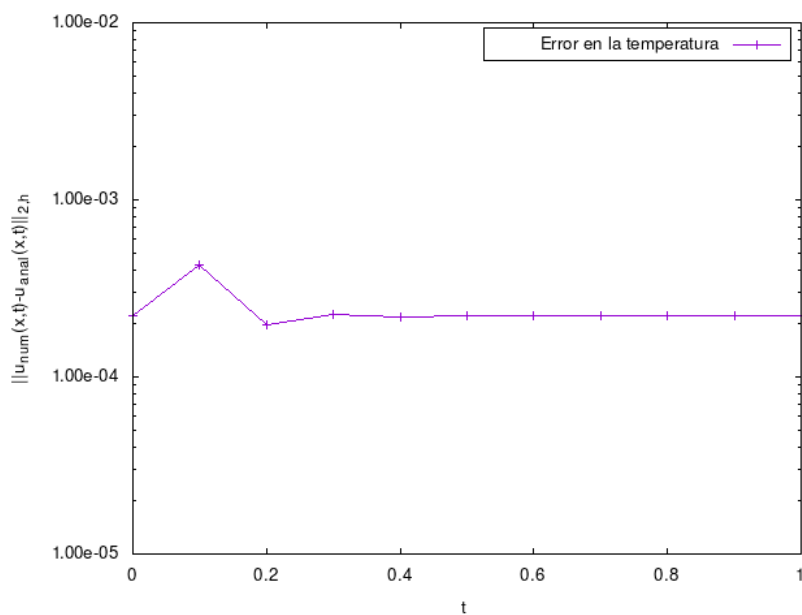


Figura A.4: Gràfica de l'error comès en l'aproximació de $u(x, t)$, prenent $\beta = 0.2$. Escala logarítmica.

A.2 Per a la condició a la frontera constant amb $\beta = 2$

Fent servir el mètode descrit a la secció 5.3.1 presentem les gràfiques de les solucions per a la frontera mòbil $h(t)$, la distribució de temperatura $u(x, t)$ (fig. A.5 i fig. A.7) i els errors respectius definits a la secció 5.4 (fig. A.6 i fig. A.8).

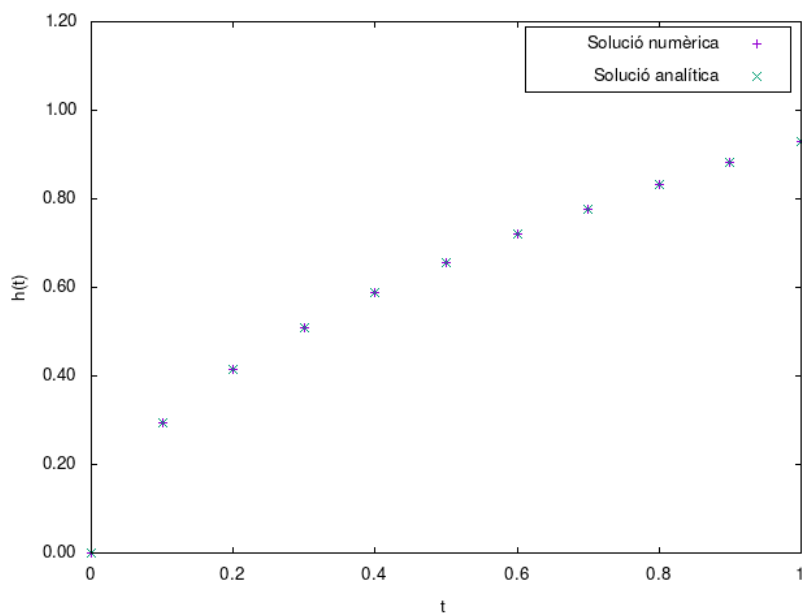


Figura A.5: Gràfica de la posició de la frontera mòbil $h(t)$ respecte al temps t , per a la solució numèrica i l'analítica, prenent $\beta = 2$.

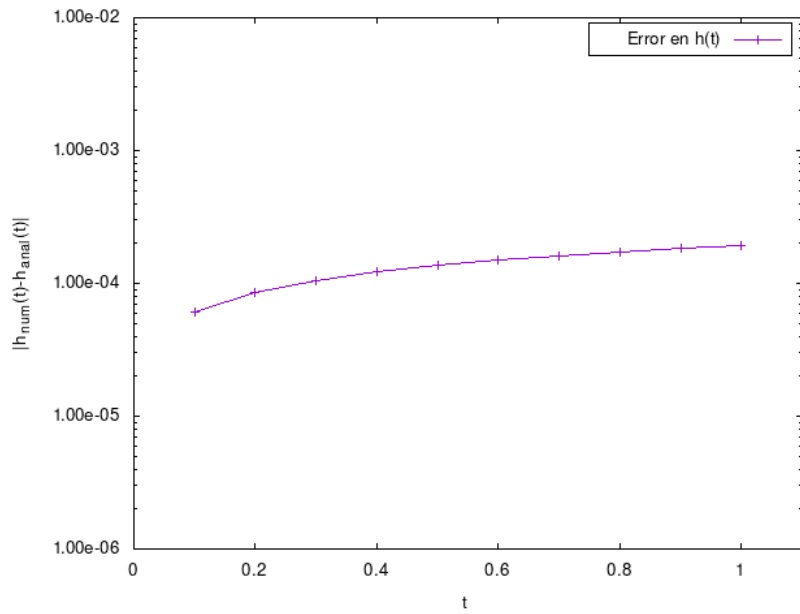


Figura A.6: Gràfica de l'error comès en l'aproximació de $h(t)$, prenent $\beta = 2$.

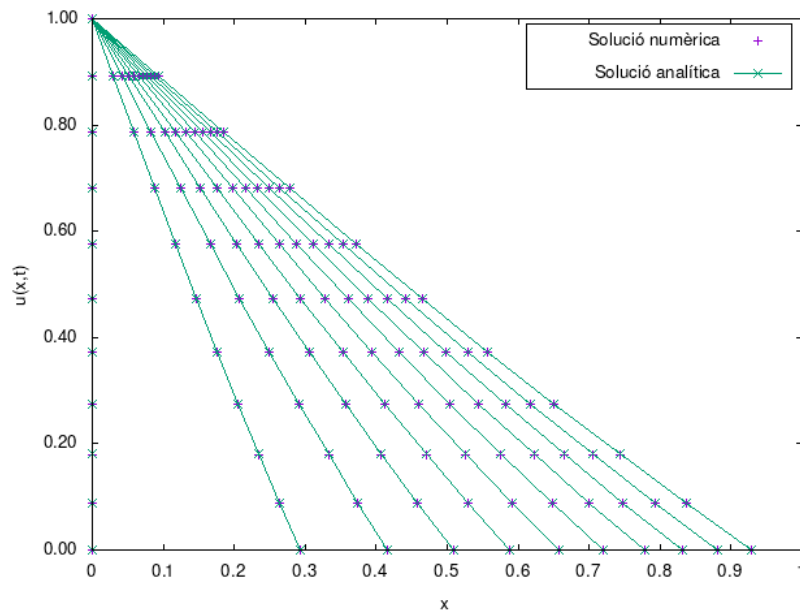


Figura A.7: Gràfica de la distribució de temperatura $u(x,t)$ respecte la posició x , per a la solució numèrica i l'analítica, prenent $\beta = 2$. Escala logarítmica.

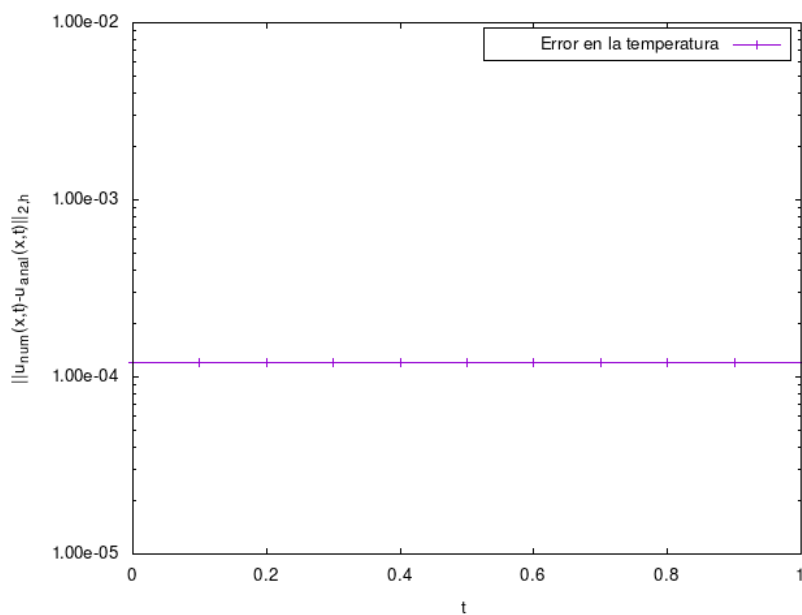


Figura A.8: Gràfica de l'error comès en l'aproximació de $u(x, t)$, prenent $\beta = 2$. Escala logarítmica.

A.3 Per a la condició a la frontera dependent del temps amb $\beta = 1$

Fent servir el mètode descrit a la secció 5.3.2 presentem les gràfiques de les solucions per a la frontera mòbil $h(t)$, la distribució de temperatura $u(x, t)$ (fig. A.9 i fig. A.11) i els errors respectius definits a la secció 5.4 (fig. A.10 i fig. A.12).

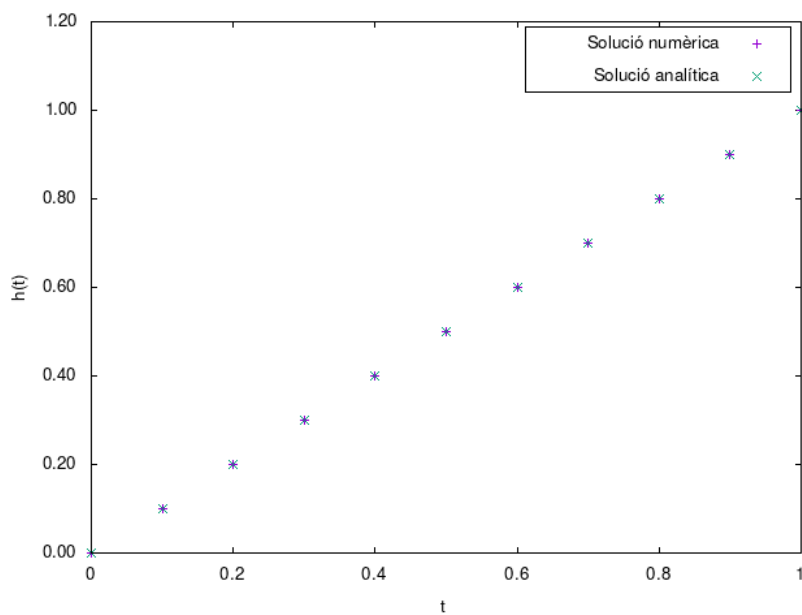


Figura A.9: Gràfica de la posició de la frontera mòbil $h(t)$ respecte el temps t , per a la solució numèrica i l'analítica, prenent $\beta = 1$.

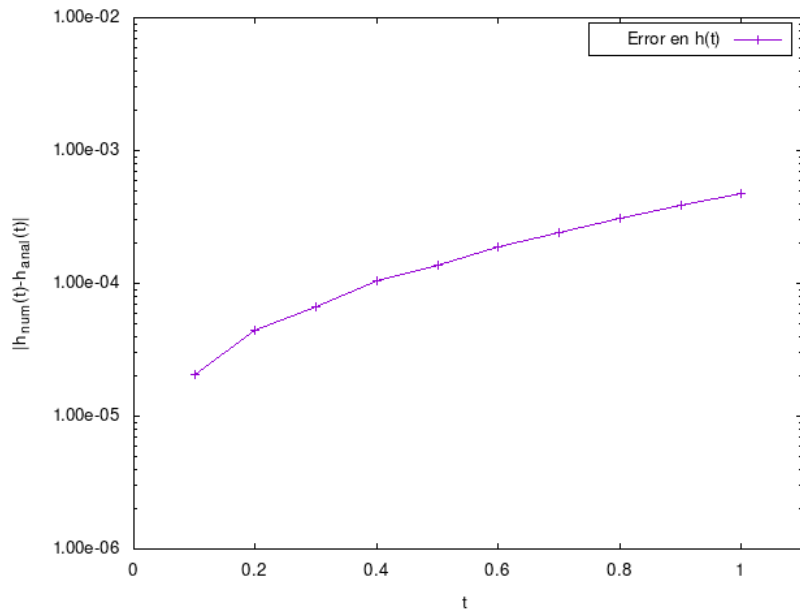


Figura A.10: Gràfica de l'error comès en l'aproximació de $h(t)$, prenent $\beta = 1$. Escala logarítmica.

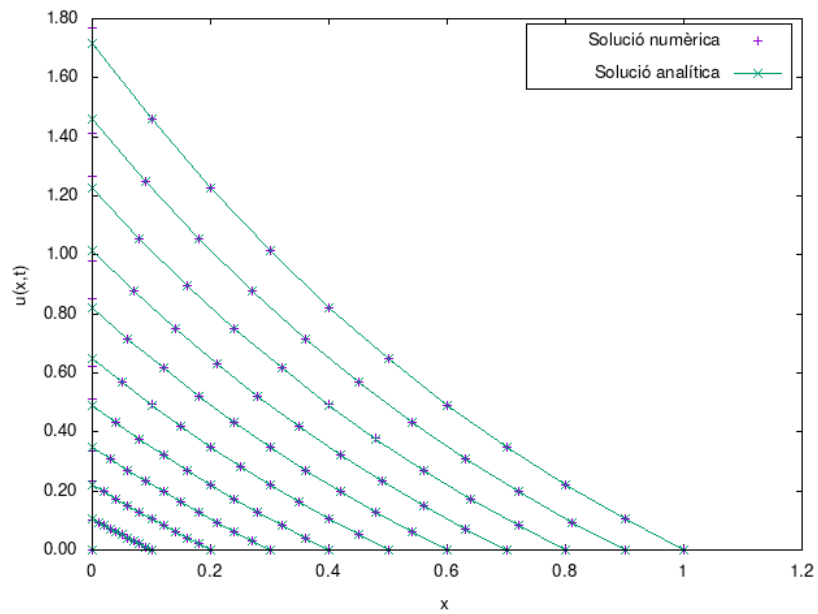


Figura A.11: Gràfica de la distribució de temperatura $u(x,t)$ respecte la posició x , per a la solució numèrica i l'analítica, prenent $\beta = 1$.

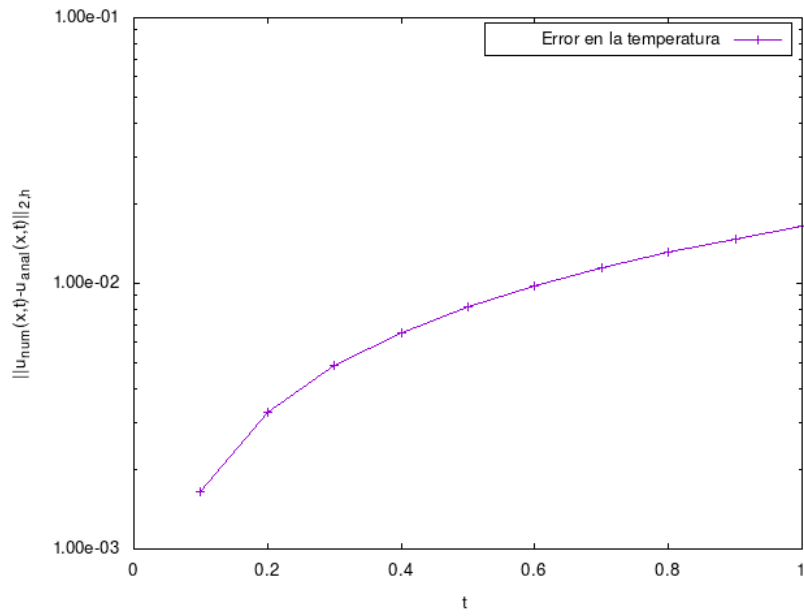


Figura A.12: Gràfica de l'error comès en l'aproximació de $u(x, t)$, prenent $\beta = 1$. Escala logarítmica.

B Codi font

B.1 El problema de Stefan amb C

El següent codi escrit en C troba les solucions del problema de Stefan descrit en (4.2) per a les dues condicions a la frontera.

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <stdlib.h>
3 #include <math.h>
4 #include <time.h>
5
6 #define tol 1.e-10
7 #define ITER_MAX 10000
8
9 void StefanProblem_TI_BoundaryCondition(int n, int NT, double h, double k, double t[], double **A, double
   **B, double **L, double **R, double *w0, double *w1, double *w, double *xi_i, double *b, double *
   h_num);
10 void StefanProblem_TD_BoundaryCondition(int n, int NT, double h, double k, double t[], double **A, double
   **B, double **L, double **R, double *w0, double *w1, double *w, double *xi_i, double *b, double *
   h_num);
11
12 double Find_z(int n, double beta, double h, double k, double z[], double *w0, double *w1, double *xi_i);
13 double Find_h(int n, int l, double beta, double h, double k, double z[], double *w0, double *w1, double *
   xi_i, double t[]);
14
15 double f(double x, double a[], double hv[]);
16 double df(double x, double a[], double hv[]);
17 double newton(double x0, double a[], double hv[]);
18
19 double *Solve_Tridiagonal_Crout(int n, double **A, double *b);
20
21 void Omplir_L(int n, double **L, double **U, double **A);
22 void Omplir_U(int n, double **U, double **A);
23
24 double *triang_inf(int n, double **A, double *F);
25 double *triang_sup(int n, double **A, double *F);
26
27 double *mult_MatVec_Tridiag(int n, double **A, double *x);
28
29 int main(void){
30     clock_t time;
31     /*Nombre de nodes*/
32     int n=10;
33     /*Nombre de passos temporals*/
34     int NT = n;
35     /*Pas espacial h*/
36     double h=1./n;
37     /*Pas temporal k*/
38     double k=h;
39
40     int i;
41     double *b, *w, *w0, *w1, *xi_i, *h_num;
42     double **A, **B, **L, **R;
43
44     double t[NT+1];
45     for(i=0; i<NT+1; i++){
46         t[i] = i*k;
47     }
48
49     /*-----Guardem memòria per les matrius i vectors-----*/
50     b = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
51     w = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
52     w0 = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
53     w1 = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
```

```

54     h_num = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
55     xi_i = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
56     if(b == NULL || w == NULL || w0 == NULL || w1 == NULL || h_num == NULL || xi_i == NULL){
57         printf("No hi ha prou memòria\n");
58         exit (1);
59     }
60     A = (double **) calloc(3, sizeof(double *));
61     B = (double **) calloc(3, sizeof(double *));
62     L = (double **) calloc(3, sizeof(double *));
63     R = (double **) calloc(3, sizeof(double *));
64     if(A == NULL || B == NULL || L == NULL || R == NULL){
65         printf("No hi ha prou memòria\n");
66         exit (1);
67     }
68     for(i=0; i<n+1; i++){
69         A[i] = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
70         B[i] = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
71         L[i] = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
72         R[i] = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
73         if(A[i] == NULL || B[i] == NULL || L[i] == NULL || R[i] == NULL){
74             printf("No hi ha prou memòria\n");
75             exit (1);
76         }
77     }
78
79     /*Omplim A:*/
80     for(i=1; i<n; i++){
81         A[0][i] = (1./(2*(h*h)))*(-.);
82         if(i<n-1) A[1][i] = (1./(2*(h*h)));
83         if(i>1) A[2][i] = (1./(2*(h*h)));
84     }
85
86     /*Omplim el vector de posició \xi:*/
87     for(i=0; i<n+1; i++){
88         xi_i[i] = i*h;
89     }
90
91     time=clock();
92     StefanProblem_TI_BoundaryCondition(n,NT,h,k,t,A,B,L,R,w0,w1,w,xi_i,b,h_num);
93     time=clock() - time;
94     double t_taken = ((double) time)/CLOCKS_PER_SEC;
95     printf("Execution time = %16.8e\n", t_taken);
96     time=clock();
97     StefanProblem_TD_BoundaryCondition(n,NT,h,k,t,A,B,L,R,w0,w1,w,xi_i,b,h_num);
98     time=clock() - time;
99     t_taken = ((double) time)/CLOCKS_PER_SEC;
100    printf("Execution time = %16.8e\n", t_taken);
101
102
103    free(b);
104    free(w);
105    free(w0);
106    free(w1);
107    free(xi_i);
108    free(B[0]); free(B[1]); free(B[2]);
109    free(L[0]); free(L[1]); free(L[2]);
110    free(R[0]); free(R[1]); free(R[2]);
111
112    return 0;
113 }
114
115 /*Resol problema de Stefan per a la condició a la frontera independent del temps*/
116 void StefanProblem_TI_BoundaryCondition(int n, int NT, double h, double k, double t[], double **A, double
    **B, double **L, double **R, double *w0, double *w1, double *w, double *xi_i, double *b, double *
    h_num){
117     int i, l;
118     double z_aux, z_err;
119     double beta, lambda;

```

```

120
121  /*Inicialitzem z_j i z_{j+1}*/
122  double z[2];
123  z[0] = 0;
124  z[1] = 0;
125
126  /*Obrim els fitxers d'entrada i sortida*/
127  FILE *in1, *in2;
128  in1 = fopen("lambda.in", "r");
129  in2 = fopen("beta02.in", "r");
130  if (in1 == NULL || in2 == NULL){
131  printf("Error al obrir el fitxer d'entrada.\n");
132  exit (-1);
133  }
134
135  fscanf(in1, "%lf", &lambda);
136  fscanf(in2, "%lf", &beta);
137
138
139  FILE *out1, *out2;
140  out1 = fopen("freeBoundaryPos.out", "w");
141  out2 = fopen("temperatureDistribution.out", "w");
142  if (out1 == NULL || out2 == NULL){
143  printf("Error al obrir el fixer de sortida.\n");
144  exit (-1);
145  }
146
147  /*Omplim B:*/
148  for(i=1; i<n; i++){
149  B[0][i] = 0.;
150  if(i<n-1) B[1][i] = (1./(8.*h))*xi_i[i];
151  if(i>1) B[2][i] = -(1./(8.*h))*xi_i[i];
152  }
153
154  i=0;
155  while(fscanf(in1, "%lf", &w[i]) != EOF){
156  if(i>0 && i<n){
157  w0[i] = w[i];
158  }
159  i++;
160  }
161  fclose(in1);
162
163  h_num[0] = z[0];
164  fprintf(out1, "%16.8e %16.8e\n", t[0], h_num[0]);
165  for(i=0; i<n+1; i++){
166  fprintf(out2, "%16.8e %16.8e\n", xi_i[i]*h_num[0], i*w[i]);
167  }
168  fprintf(out2, "\n");
169
170  for(l=1; l<NT+1; l++){
171  z_err = 1e-12;
172  while(z_err > 1e-13){
173  double z_mid = (z[1]+z[0])/2;
174  double dz = (z[1]-z[0])/k;
175
176  for(i=1; i<n; i++){
177  L[0][i] = A[0][i] - z_mid/k;
178  if(i<n-1) L[1][i] = A[1][i] + dz*B[1][i];
179  if(i>1) L[2][i] = A[2][i] + dz*B[2][i];
180  }
181
182  for(i=1; i<n; i++){
183  R[0][i] = -A[0][i] - z_mid/k;
184  if(i<n-1) R[1][i] = -A[1][i] - dz*B[1][i];
185  if(i>1) R[2][i] = -A[2][i] - dz*B[2][i];
186  }
187

```

```

188     b = mult_MatVec_Tridiag(n, R, w0);
189
190     double cte;
191     cte = 1/(2*h*h)-(xi_i[1]/(8*h))*dz;
192     b[1] = b[1] - 2*cte;
193
194     /*Resolució del sistema Lw1=Rw0 - 2cte */
195     w1 = Solve_Tridiagonal_Crout(n, L, b);
196
197     z_aux = z[1];
198     z[1] = Find_z(n, beta, h, k, z, w0, w1, xi_i);
199     z_err = fabs(z[1] - z_aux);
200 }
201
202 /*Condicions a la frontera*/
203 w[0] = 1.;
204 w[n] = 0.;
205 for(i=1; i<n; i++){
206     w[i] = w1[i];
207 }
208
209 /*Desfem els canvis de variable i guardem u(x,t) i h(t) en fitxers separats*/
210 h_num[1] = sqrt(z[1]);
211 fprintf(out1, "%16.8e %16.8e\n", t[1], h_num[1]);
212 for(i=0; i<n+1; i++){
213     fprintf(out2, "%16.8e %16.8e\n", xi_i[i]*h_num[1], 1*w[i]);
214 }
215 fprintf(out2, "\n");
216
217 w0 = w1;
218 z[0] = z[1];
219 z[1] = z[1];
220 }
221
222 /*Tanquem els fitxers de sortida*/
223 fclose(out1); fclose(out2);
224 }
225
226 /*Resol problema de Stefan per a la condició a la frontera dependent del temps*/
227 void StefanProblem_TD_BoundaryCondition(int n, int NT, double h, double k, double t[], double **A, double
    **B, double **L, double **R, double *w0, double *w1, double *w, double *xi_i, double *b, double *
    h_num){
228     int i, l;
229     double beta=1.;
230     double lambda = 1./sqrt(beta);
231
232     double hv_aux, hv_err;
233     double hv[2];
234     hv[0] = 0;
235     hv[1] = 0;
236
237     FILE *out1, *out2, *out1_anal, *out1_err, *out2_anal, *out2_err;
238     out1 = fopen("freeBoundaryPosTD.out", "w");
239     out2 = fopen("temperatureDistributionTD.out", "w");
240     out1_anal = fopen("freeBoundaryPosTD_anal.out", "w");
241     out1_err = fopen("freeBoundaryPosTD_err.out", "w");
242     out2_anal = fopen("temperatureDistributionTD_anal.out", "w");
243     out2_err = fopen("temperatureDistributionTD_err.out", "w");
244     if (out1 == NULL || out2 == NULL || out1_anal == NULL || out1_err == NULL || out2_anal == NULL ||
        out2_err == NULL){
245         printf("Error al obrir el fixer de sortida.\n");
246         exit (-1);
247     }
248
249     /*Omplim B:*/
250     for(i=1; i<n; i++){
251         B[0][i] = 0.;
252         if(i<n-1) B[1][i] = (1./(4.*h))*xi_i[i];

```

```

253     if(i>1) B[2][i] = -(1./(4.*h))*xi_i[i];
254 }
255
256 for(i=0; i<n+1; i++){
257     w[i] = 1 - xi_i[i];
258     if(i>0 && i<n){
259         w0[i] = w[i];
260     }
261 }
262
263 h_num[0] = hv[0];
264 fprintf(out1, "%16.8e %16.8e\n", t[0], h_num[0]);
265 double h_anal = lambda*t[0];
266 fprintf(out1_anal, "%16.8e %16.8e\n", t[0], h_anal);
267 fprintf(out1_err, "%16.8e %16.8e\n", t[0], fabs(h_num[0]-h_anal));
268
269 double u_num, u_anal;
270 double sum=0.;
271 for(i=0; i<n+1; i++){
272     u_num = t[0]*w[i];
273     fprintf(out2, "%16.8e %16.8e\n", xi_i[i]*h_num[0], u_num);
274     u_anal = exp(t[0]-xi_i[i]*h_anal)-1.;
275     fprintf(out2_anal, "%16.8e %16.8e\n", xi_i[i]*h_num[0], u_anal);
276     sum += pow(u_anal - u_num, 2);
277 }
278 fprintf(out2, "\n");
279 fprintf(out2_anal, "\n");
280 fprintf(out2_err, "%16.8e %16.8e\n", t[0], sqrt(h*sum));
281
282 for(l=1; l<NT+1; l++){
283     hv_err = 1e-12;
284
285     double y;
286     if(l==1) y = (exp(t[l])-1)/t[l] + 1;
287     else y = (exp(t[l])-1)/t[l] + (exp(t[l-1])-1)/t[l-1];
288
289     while(hv_err > 1e-13){
290         double hv_mid = (hv[l]+hv[0])/2;
291         double dhv = (hv[l]-hv[0])/k;
292         double t_mid = (t[l]+t[l-1])/2;
293
294         for(i=1; i<n; i++){
295             L[0][i] = t_mid*A[0][i] - pow(hv_mid,2.)*(1./2. + t_mid/k);
296             if(i<n-1) L[1][i] = t_mid*A[1][i] + t_mid*hv_mid*dhv*B[1][i];
297             if(i>1) L[2][i] = t_mid*A[2][i] + t_mid*hv_mid*dhv*B[2][i];
298         }
299
300         for(i=1; i<n; i++){
301             R[0][i] = -t_mid*A[0][i] + pow(hv_mid,2.)*(1./2. - t_mid/k);
302             if(i<n-1) R[1][i] = -t_mid*A[1][i] - t_mid*hv_mid*dhv*B[1][i];
303             if(i>1) R[2][i] = -t_mid*A[2][i] - t_mid*hv_mid*dhv*B[2][i];
304         }
305
306         b = mult_MatVec_Tridiag(n, R, w0);
307
308         double d;
309         d = (-t_mid*(1./(2.*pow(h,2.))) + xi_i[1]*t_mid*hv_mid*dhv*(1./(4.*h)))*y;
310         b[1] = b[1] + d;
311
312         w1 = Solve_Tridiagonal_Crout(n, L, b);
313
314         hv_aux = hv[1];
315         hv[1] = Find_h(n, l, beta, h, k, hv, w0, w1, xi_i, t);
316         hv_err = fabs(hv[1] - hv_aux);
317     }
318
319     if(l==1){
320         w[0] = 1.;

```

```

321     }
322     else {
323         w[0] = y - w[0];
324     }
325     w[n] = 0.;
326     for(i=1; i<n; i++){
327         w[i] = w1[i];
328     }
329
330     h_num[1] = hv[1];
331     fprintf(out1, "%16.8e %16.8e\n", t[1], h_num[1]);
332     h_anal = lambda*t[1];
333     fprintf(out1_anal, "%16.8e %16.8e\n", t[1], h_anal);
334     fprintf(out1_err, "%16.8e %16.8e\n", t[1], fabs(h_num[1]-h_anal));
335
336     sum=0.;
337     for(i=0; i<n+1; i++){
338         u_num = t[1]*w[i];
339         fprintf(out2, "%16.8e %16.8e\n", xi_i[i]*h_num[1], u_num);
340         u_anal = exp(t[1]-xi_i[i]*h_anal)-1.;
341         fprintf(out2_anal, "%16.8e %16.8e\n", xi_i[i]*h_num[1], u_anal);
342         sum += pow(u_anal - u_num, 2);
343     }
344     fprintf(out2, "\n");
345     fprintf(out2_anal, "\n");
346     fprintf(out2_err, "%16.8e %16.8e\n", t[1], sqrt(h*sum));
347
348     w0 = w1;
349     hv[0] = hv[1];
350     hv[1] = hv[1];
351 }
352
353 /*Tanquem els fitzers de sortida*/
354 fclose(out1); fclose(out2);
355 fclose(out1_anal); fclose(out1_err);
356 fclose(out2_anal); fclose(out2_err);
357 }
358
359 double Find_z(int n, double beta, double h, double k, double z[], double *w0, double *w1, double *xi_i){
360     double a, b, c;
361     double z1, z2;
362     double r, v;
363
364     r = k/(h*h);
365     v = k/h;
366
367     /*Coeficients de l'equació quadràtica per a z_{j+1}*/
368     a = beta*xi_i[n]/(2*k);
369     b = -beta*(xi_i[n]/k)*z[0]+2*beta*r/v;
370     c = beta*(xi_i[n]/(2*k))*(z[0]*z[0])-2*(beta*r/v)*z[0]-2*r*(w1[n-1]+w0[n-1]);
371
372     /*Arrels de z[1]*/
373     z1 = (-b+sqrt(b*b-4*a*c))/(2*a);
374     z2 = (-b-sqrt(b*b-4*a*c))/(2*a);
375
376     /*Agafem la solució positiva*/
377     if(z1 > z2) z[1] = z1;
378     else z[1] = z2;
379
380     return z[1];
381 }
382
383 double Find_h(int n, int l, double beta, double h, double k, double hv[], double *w0, double *w1, double *
    xi_i, double t[]){
384     double r, v;
385
386     r = k/(h*h);
387     v = k/h;

```

```

388
389     double a[4];
390     a[0] = 2*r*(t[1]+t[1-1])*(w1[n-1]+w0[n-1]);
391     a[1] = 4*beta*v;
392     a[2] = r;
393     a[3] = xi_i[n]/(4.*h);
394
395     return newton(hv[1], a, hv);
396 }
397
398 double f(double x, double a[], double hv[]){
399     return a[0] - a[1]*(a[2]+a[3]*(pow(x,2)-pow(hv[0],2)))*(pow(x,2)-pow(hv[0],2));
400 }
401
402 double df(double x, double a[], double hv[]){
403     double h=1.e-5;
404     return (f(x+h,a,hv)-f(x,a,hv))/h;
405 }
406
407 double newton(double x0, double a[], double hv[]){
408     double temp = -1.;
409     double x1;
410     while (fabs(temp-x0)>1e-10) {
411         x1 = x0 - f(x0, a, hv)/df(x0, a, hv);
412         temp = x0;
413         x0 = x1;
414     };
415     return x1;
416 }
417
418 /*Resolució sistema tridiagonal Aw=b*/
419 double *Solve_Tridiagonal_Crout(int n, double **A, double *b){
420     int i;
421     double *aux, *w;
422     double **L, **U;
423
424     w = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
425     aux = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
426     if(aux == NULL || w == NULL){
427         printf("No hi ha prou memòria\n");
428         exit (1);
429     }
430
431     L = (double **) calloc(2, sizeof(double *));
432     U = (double **) calloc(2, sizeof(double *));
433     if (L == NULL || U == NULL){
434         printf("Error de memòria.\n");
435         exit(1);
436     }
437     for(i=0; i<2; i++){
438         L[i] = (double *) calloc(n+2, sizeof(double));
439         U[i] = (double *) calloc(n+2, sizeof(double));
440         if (L[i] == NULL || U[i] == NULL){
441             printf("Error de memòria.\n");
442             exit(1);
443         }
444     }
445
446     /*Descomposició LU*/
447     Omplir_U(n,U,A);
448     Omplir_L(n,L,U,A);
449
450     /*Resolem sistema Lx=b i Uy=z*/
451     aux = triang_inf(n,L,b);
452     w = triang_sup(n,U,aux);
453
454     /*Alliberem memòria*/
455     free(aux);

```

```

456     free(L[0]); free(L[1]);
457     free(U[0]); free(U[1]);
458
459     return w;
460 }
461
462 void Omplir_L(int n, double **L, double **U, double **A){
463     int i;
464     for(i=1; i<n; i++){
465         L[0][i] = 1.;
466         if(i>1) L[1][i] = A[2][i]/U[0][i-1];
467     }
468     return;
469 }
470
471 void Omplir_U(int n, double **U, double **A){
472     int i;
473     U[0][1] = A[0][1];
474     U[1][1] = A[1][1];
475     for(i=2; i<n; i++){
476         U[0][i] = A[0][i] - (A[1][i-1]*A[2][i])/U[0][i-1];
477         if(i<n-1) U[1][i] = A[1][i];
478     }
479     return;
480 }
481
482 /*Resol sistema triangular inferior, A matriu tridiagonal*/
483 double *triang_inf(int n, double **A, double *F){
484     int i;
485     double *x;
486     x = (double *) calloc(n+2, sizeof(double));
487     if (x==NULL){
488         printf("Error de memòria.\n");
489     }
490
491     x[1] = (1./A[0][1])*F[1];
492     for(i=2; i<n; i++){
493         x[i] = (1./A[0][i])*(F[i]-A[1][i]*x[i-1]);
494     }
495
496     return x;
497 }
498
499 /*Resol sistema triangular superior, A matriu tridiagonal*/
500 double *triang_sup(int n, double **A, double *F){
501     int i;
502     double *x;
503     x = (double *) calloc(n+2, sizeof(double));
504     if (x==NULL){
505         printf("Error de memòria.\n");
506     }
507
508     x[n-1] = (1./A[0][n-1])*F[n-1];
509     for(i=n-2; i>=1; i--){
510         x[i] = (1./A[0][i])*(F[i]-A[1][i]*x[i+1]);
511     }
512
513     return x;
514 }
515
516 /*Multiplicació matriu tridiagonal A per vector x: Ax=y*/
517 double *mult_MatVec_Tridiag(int n, double **A, double *x){
518     int i;
519     double *y;
520     y = (double *) calloc(n+1, sizeof(double));
521     if (y==NULL){
522         printf("Error de memòria.\n");
523     }

```



```

524 y[1] = A[0][1]*x[1] + A[1][1]*x[2];
525 for(i=2; i<n-1; i++){
526     y[i] = A[2][i]*x[i-1] + A[0][i]*x[i] + A[1][i]*x[i+1];
527 }
528 y[n-1] = A[2][n-1]*x[n-2] + A[0][n-1]*x[n-1];
529
530 return y;
531 }

```

B.2 Gràfiques de les solucions amb Gnuplot

Condicció a la frontera constant:

El següent *script* de Gnuplot calcula la solució analítica del problema de Stefan per a la condició a la frontera constant, i els errors comesos en les aproximacions, i en dibuixa les gràfiques.

```

1 n=10;
2 k=1./n;
3 h=k;
4 array t[n+1];
5 array h_num[n+1];
6
7 set table "outfile.dat"
8 do for [i=0:n] {
9     plot 'freeBoundaryPos.out' u 0:($0==i?(h_num[i+1]=$2):$2)
10 };
11 plot 'lambda.in' u 0:($0==0?(lambda=$1):$1)
12 unset table
13
14 array h_err[n+1];
15 h_anal=0.;
16 set print "freeBoundaryPos_anal.out"
17 do for [i=0:n]{
18     t[i+1] = i*k;
19     h_anal = 2*lambda*sqrt(t[i+1]);
20     print sprintf("%16.8e %16.8e", t[i+1], h_anal);
21     h_err[i+1] = abs(h_num[i+1] - h_anal);
22 }
23
24 set print "freeBoundaryPos_err.out"
25 do for [i=0:n] {
26     print sprintf("%16.8e %16.8e", t[i+1], h_err[i+1]);
27 }
28
29 array u_num[(n+1)*(n+1)];
30 array u_err[n+1+1];
31 array a[(n+1)*(n+1)];
32
33 set table "outfile.dat"
34 do for [i=0:(n+1)*(n+1)] {
35     plot 'temperatureDistribution.out' every ::0::(n+1) u 0:($0==i?(u_num[i+1]=$2):$2),\
36     '' u 0:($0==i?(a[i+1]=$1):$1)
37 };
38 unset table
39
40 set print "temperatureDistribution_anal.out"
41 j=0;
42 l=1;
43 sum=0.;
44 count=0;
45 do for [i=0:(n+1)*(n+1)-1] {

```

```

46 u_anal = 1. - erf((j*h)*h_num[l+1]/(2*sqrt(t[l+1])))/erf(lambda);
47 sum = sum + (u_anal - u_num[i+1])**2;
48 print sprintf("%16.8e %16.8e", a[i+1], u_anal);
49 j=j+1;
50 if(j>n){
51     j=0;
52     print sprintf("");
53     if(count==0){
54         u_err[l] = sqrt(h*sum);
55         sum=0;
56     }else{
57         u_err[l+1] = sqrt(h*sum);
58         sum=0;
59     }
60     if(l==n){
61         count = 1;
62     }
63 }
64 if(j==0 && l<n){
65     l = l+1;
66 }
67 }
68
69 set print "temperatureDistribution_err.out"
70 do for [i=0:n]{
71     print sprintf("%16.8e %16.8e", t[i+1], u_err[i+1]);
72 }
73
74 set term png font "Helvetica,10"
75 set key spacing 1.5 font "Helvetica, 10"
76 set key box lt -1 lw 1
77
78 #Posició de la frontera mòbil
79 set output "freeBoundaryPos_TI.png"
80 set xrange [0:1]
81 set yrange [0:1.2]
82 set format y "%.2f"
83 set xlabel "t"
84 set ylabel "h(t)"
85 plot "freeBoundaryPos.out" title "Solució numèrica",\
86 "freeBoundaryPos_anal.out" title "Solució analítica";
87
88 #Error de la posició de la frontera mòbil
89 set output "freeBoundaryPos_TI_err.png"
90 set logscale y 10
91 set format y "%.2e"
92 set xrange [0:1.1]
93 set yrange [1.e-6:1.e-2]
94 set xlabel "t"
95 set ylabel "[h_{num}(t)-h_{anal}(t)]"
96 plot "freeBoundaryPos_err.out" w linespoints title "Error en h(t)";
97 unset yrange
98 unset logscale y
99
100 #Distribució de la temperatura
101 set output "temperatureDistribution_TI.png"
102 set autoscale
103 set format y "%.2f"
104 set xlabel "x"
105 set ylabel "u(x,t)"
106 set yrange [-1.5e-4:1]
107 plot "temperatureDistribution.out" title "Solució numèrica",\
108 "temperatureDistribution_anal.out" w linespoints title "Solució analítica";
109 unset autoscale
110
111 #Error distribució de la temperatura
112 set output "temperatureDistribution_TI_err.png"
113 set logscale y 10

```

```

114 set format y "%.2e"
115 set yrange [1.e-5:1.e-2]
116 set xrange [0:1]
117 set xlabel "t"
118 set ylabel "||u_{num}(x,t)-u_{anal}(x,t)||_{2,h}"
119 plot "temperatureDistribution_err.out" w linespoints title "Error en la temperatura";
120 unset logscale y
121
122 set term x11

```

Condicció a la frontera dependent del temps:

El següent *script* de Gnuplot dibuixa les gràfiques de la solució del problema de Stefan per a la condició a la frontera dependent del temps, i dels errors en la temperatura i la frontera mòbil.

```

1 set term png font "Helvetica,10"
2 set key spacing 1.5 font "Helvetica, 10"
3 set key box lt -1 lw 1
4
5 #Posició de la frontera mòbil
6 set output "freeBoundaryPos_TD.png"
7 set xlabel "t"
8 set ylabel "h(t)"
9 set autoscale
10 set format y "%.2f"
11 plot "freeBoundaryPosTD.out" title "Solució numèrica",\
12 "freeBoundaryPosTD_anal.out" title "Solució analítica";
13
14 #Error de la posició de la frontera mòbil
15 set output "freeBoundaryPos_TD_err.png"
16 set xlabel "t"
17 set ylabel "|h_{num}(t)-h_{anal}(t)|"
18 set logscale y 10
19 set format y "%.2e"
20 set xrange [0:1.1]
21 set yrange [1.e-6:1.e-2]
22 plot "freeBoundaryPosTD_err.out" w linespoints title "Error en h(t)";
23 unset logscale y
24
25 #Distribució de la temperatura
26 set output "temperatureDistribution_TD.png"
27 set xlabel "x"
28 set ylabel "u(x,t)"
29 set autoscale
30 set format y "%.2f"
31 plot "temperatureDistributionTD.out" title "Solució numèrica",\
32 "temperatureDistributionTD_anal.out" w linespoints title "Solució analítica";
33
34 #Error distribució de la temperatura
35 set output "temperatureDistribution_TD_err.png"
36 set logscale y 10
37 set format y "%.2e"
38 set xlabel "t"
39 set ylabel "||u_{num}(x,t)-u_{anal}(x,t)||_{2,h}"
40 plot "temperatureDistributionTD_err.out" w linespoints title "Error en la temperatura";
41 unset logscale y

```

Referències

- [1] BURDEN, R. L., AND FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*, ninth ed. The Prindle, Weber and Schmidt Series in Mathematics. Richard Stratton, Boston, 1989.
- [2] CALDWELL, J., AND KWAN, Y. On the perturbation method for the stefan problem with time-dependent boundary conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46, 8 (2003), 1497 – 1501.
- [3] FONT MARTÍNEZ, F. *Beyond the classical Stefan problem*. PhD thesis, UPC, Departament de Matemàtica Aplicada I, Juliol 2014.
- [4] GOODMAN, T. R. The Heat Balance Integral and its application to problems involving change of phase. *Trans. ASME, J. Heat Transf.* 80 (1958), 335.
- [5] JONSSON, T. *On the one dimensional Stefan problem with some numerical analysis*. Dissertation, Umeå University, Faculty of Science and Technology, Department of Mathematics and Mathematical Statistics, 2013.
- [6] LAMÉ, G., AND ÉMILE CLAPEYRON. Mémoire sur la solidification par refroidissement d'un globe solide. *Annales Chimie Physique* (1831), 250–256.
- [7] LOSONCZI, L. Eigenvalues and eigenvectors of some tridiagonal matrices. *Acta Mathematica Hungarica* 60, 3-4 (1992), 309–322.
- [8] MAGNUS, R. *Fundamental Mathematical Analysis*, 1 ed. Springer Undergraduate Mathematics Series. Springer International Publishing, 2020.
- [9] MITCHELL, S., AND MYERS, T. Application of Standard and Refined Heat Balance Integral Methods to One-dimensional Stefan Problems. *SIAM Review* 52 (Març 2010).
- [10] MITCHELL, S., AND VYNNYCKY, M. Finite-difference methods with increased accuracy and correct initialization for one-dimensional stefan problems. *Applied Mathematics and Computation* 215, 4 (2009), 1609 – 1621. Physics and Computation.
- [11] SALSA, S. *Partial Differential Equations in Action: From Modelling to Theory*, 2 ed., vol. 86 of *UNITEXT - La Matematica per il 3+2*. Springer Cham, 2015.
- [12] SAUVIGNY, F. *Partial Differential Equations 1: Foundations and Integral Representations*, 2 ed. Universitext. Springer-Verlag London, 01 2006.

- [13] STEFAN, J. Über die theorie der eisbildung, insbesondere über die eisbildung im polarmeere. *Annalen der Physik und Chemie*, 2 (1981), 269–286.
- [14] VUIK, C. Some historical notes on the stefan problem. *Nieuw Archief voor Wiskunde. Vierde Serie 11* (01 1993).
- [15] WEBER, H. *Die Partiellen Differential-Gleichungen der Mathematischen Physik*, second ed. Vieweg and sohn, 1901.
- [16] WOOD, A. A new look at the heat balance integral method. *Applied Mathematical Modelling 25*, 10 (2001), 815 – 824.