Métodos numéricos para solución ecuaciones diferenciales parciales

Giovanni Ramírez García, PhD

Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de San Carlos de Guatemala

Guatemala, 16 de abril de 2021

Ecuaciones diferenciales lineales

Ecuaciones diferenciales no lineales

Soluciones numéricas para ecuaciones diferenciales parciales
- Ecuaciones diferenciales parciales elípticas
- Ecuaciones diferenciales parciales parabólicas
- Ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas

Método de diferencias finitas (I)

- Muchos problemas en física que dependen de la posición más que del tiempo se describen generalmente en términos de ecuaciones diferenciales con condiciones que dependen de más de un punto.
- Uno de los métodos usados para resolver estos problemas es el de diferencias finitas.
- Para la ecuación lineal de segundo orden de un problema de condiciones de frontera

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \quad \text{para } a \leq x \leq b,$$

con $y(a) = \alpha$ y $y(b) = \beta$, el método de diferencias finitas requiere aproximaciones tanto para y' como para y''.
- Se toman $N+1$ subintervalos de $[a, b]$, con los puntos de malla $x_i = a + ih$, para $i = 0, 1, \ldots, N+1$ con $h = (b-a)/(N+1)$.

Método de diferencias finitas (II)

- Los puntos *internos*, x_i para $i = 1, \ldots, N$, permiten aproximar la ecuación diferencial a

$$y''(x_i) = p(x_i)y'(x_i) + q(x_i)y(x_i) + r(x_i), \tag{1}$$

donde se puede usar un polinomio de Taylor alrededor de x_i, primero evaluado en x_{i+1}

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(\xi_i^+),$$

para $\xi_i^+ \in (x_i, x_{i+1})$; ahora evaluado en x_{i-1}

$$y(x_{i-1}) = y(x_i) - hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) - \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + \frac{h^4}{24}y^{(4)}(\xi_i^-),$$

para $\xi_i^- \in (x_{i-1}, x_i)$.

Método de diferencias finitas (III)

- Ahora con $y(x_{i+1}) + y(x_{i-1})$ se puede resolver para

$$y''(x_i) = \frac{1}{h^2}\left[y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})\right] - \frac{h^2}{12}y^{(4)}(\xi_i),$$

que es la fórmula de la diferencia centrada, donde se ha usado el Teorema del valor intermedio (de las definiciones básicas de la unidad 2) para tomar un solo valor $\xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$.

- De la misma forma se encuentra una fórmula para la diferencia centrada para

$$y'(x_i) = \frac{1}{2h}\left[y(x_{i+1} - y(x_{i-1}))\right] - \frac{h^2}{6}y'''(\eta_i),$$

con $\eta_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$.

Método de diferencias finitas (IV)

- Con estas dos fórmulas para $y'(x_i)$ y para $y''(x_i)$, la ecuación (1) se convierte en

$$\begin{aligned}\frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} =& p(x_i)\left[\frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h}\right] + q(x_i)y(x_i)\\ &+ r(x_i) - \frac{h^2}{12}\left[2p(x_i)y'''(\eta_i) - y^{(4)}(\xi_i)\right],\end{aligned}$$

- Finalmente, el método de diferencias finitas con un error de truncamiento del orden $O(h^2)$ se obtiene al usar las condiciones de la frontera $w_0 = y(a) = \alpha$, y $w_{N+1} = y(b) = \beta$. Y con $w_i = y(x_i)$

$$\left(\frac{-w_{i+1} + 2w_i - w_{i-1}}{h^2}\right) + p(x_i)\left(\frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2h}\right) + q(x_i)w_i = -r(x_i),$$

que para $i = 1, 2, \ldots, N$, forma un sistema de ecuaciones.

Método de diferencias finitas (V)

- La ecuación anterior se puede reordenar como

$$-\left(1+\frac{h}{2}p(x_i)\right)w_{i-1}+\left(2+h^2q(x_i)\right)w_i-\left(1-\frac{h}{2}p(x_i)\right)w_{i+1}= -h^2r(x_i).$$

- Esto ayuda a representar el sistema como $A\vec{w}=\vec{b}$, donde se tiene una matriz tridagonal

$$A=\begin{bmatrix} 2+h^2q(x_1) & -1+\frac{h}{2}p(x_1) & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -1-\frac{h}{2}p(x_2) & 2+h^2q(x_2) & -1+\frac{h}{2}p(x_2) & \ddots & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & -1+\frac{h}{2}p(x_{N-1}) \\ 0 & \cdots & 0 & & -1-\frac{h}{2}p(x_N) & 2+h^2q(x_N) \end{bmatrix},$$

Método de diferencias finitas (VI)

- y dos vectores columna

$$\vec{w}=\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{N-1} \\ w_N \end{bmatrix},$$

y

$$\vec{b}=\begin{bmatrix} -h^2r(x_1)+\left(1+\frac{h}{2}p(x_1)\right)w_0 \\ -h^2r(x_2) \\ \vdots \\ -h^2r(x_{N-1}) \\ -h^2r(x_n)+\left(1-\frac{h}{2}p(x_N)\right)w_{N+1} \end{bmatrix}.$$

- Se puede probar que el sistema tiene una única solución suponiendo que p, q y r son continuas en $[a,b]$ y que $q(x)\geq 0$ en $[a,b]$, si $h<2/L$ donde $L=\text{máx}_{a\leq x\leq b}|p(x)|$.

Algoritmo: diferencias finitas para problemas lineales (I)

Entrada: Las funciones $p(x)$, $q(x)$ y $r(x)$ que se toman del módulo funciones; el intervalo $[a, b]$, los valores de la frontera α, β y un número entero $N \geq 2$ que se leen del archivo de configuraciones.
Salida: Los valores aproximados $w_i \approx y(x_i)$, para $i = 0, 1, \dots, N+1$, con un error de aproximación $O(h^2)$. **Requiere:** el módulo donde se definen las funciones.

1. Inicio.
2. Leer a, b, α, β y N.
3. Reservar memoria para $j(N)$, $k(N)$, $\ell(N)$, $m(N)$, $L(N)$, $u(N)$, $z(N)$ y $w(0 : N+1)$.
4. Definir $h = (b-a)/(N+1)$.
5. Definir $x = a + h$.
6. Definir $j(1) = 2 + h^2 q(x)$.
7. Definir $k(1) = -1 + (h/2)p(x)$.
8. Definir $m(1) = -h^2 r(x) + (1 + (h/2)p(x))\alpha$.
9. Hacer para $i = 2, \dots, N-1$:
   - 9.1 $x = a + ih$.
   - 9.2 $j(i) = 2 + h^2 q(x)$.
   - 9.3 $k(i) = -1 + (h/2)p(x)$.
   - 9.4 $\ell(i) = -1 - (h/2)p(x)$.
   - 9.5 $m(i) = -h^2 r(x)$.
10. $x = b - h$.
11. $j(N) = 2 + h^2 q(x)$.

Algoritmo: diferencias finitas para problemas lineales (II)

12. $\ell(N) = -1 - (h/2)p(x)$.
13. $m(N) = -h^2 r(x) + (1 - (h/2)p(x))\beta$.
14. Definir $L(1) = j(1)$.
15. Definir $u(1) = k(1)/L(1)$.
16. Definir $z(1) = m(1)/L(1)$.
17. Hacer para $i = 2, \dots, N-1$:
    - 17.1 $L(i) = j(i) - \ell(i)u(i-1)$.
    - 17.2 $u(i) = k(i)/L(i)$.
    - 17.3 $z(i) = (m(i) - \ell(i)z(i-1))/L(i)$.
18. $L(N) = j(N) - \ell(N)u(N-1)$.
19. $z(N) = (m(N) - \ell(N)z(N-1)/L(N)$.
20. Definir $w(0) = \alpha$.
21. Definir $w(N+1) = \beta$.
22. Definir $w(N) = z(N)$.
23. Hacer para $i = N-1, \dots, 1$: $w(i) = z(i) - u(i)w(i+1)$.
24. Hacer para $i = 0, \dots, N+1$:
    - 24.1 $x = a + ih$.
    - 24.2 Imprimir $x, w(i)$
25. Fin.

- **Nota:** los pasos 6-13 están llenando las matrices y vectores.
- **Nota:** los pasos 14-23 resuelven el sistema tridiagonal.
- ¿Y si se usan diferencias adelantadas o atrasadas?

Método de diferencias finitas (I)

- Para el caso general, con $y(a) = \alpha$, $y(b) = \beta$ y

$$y'' = f(x, y, y'), \ \text{ para } a \leq x \leq b,$$

  también se aplica el método de diferencias de la misma forma que para el problema lineal.
- Sin embargo el sistema de ecuaciones no es lineal y una de las mejores formas de resolverlo es usar un método iterativo.
- Hay que considerar varias condiciones para f
  1. f y sus derivadas parciales f_y, $f_{y'}$ son continuas en

$$D = \{(x, y, y') | a \leq x \leq b \wedge -\infty < y < \infty \wedge -\infty < y' < \infty\}.$$

  2. $f_y(x, y, y') \geq \delta$ en D, para $\delta > 0$.
  3. Existen k y L tal que

$$k = \max_{(x,y,y') \in D} |f_y(x, y, y')|, \quad \text{y} \quad L = \max_{(x,y,y') \in D} |f_{y'}(x, y, y')|.$$

Método de diferencias finitas (II)

- Igual que antes, dividimos el intervalo $[a, b]$ en $(N + 1)$ subintervalos, con $x_i = a + ih$, para $i = 0, 1, \ldots, N + 1$.
- Asumiendo que la solución exacta tiene una cuarta derivada que está acotada podemos reemplazar $y''(x_i) = f(x_i, y(x_i), y'(x_i))$ por sus diferencias centradas, de modo que

$$\frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2} =$$

$$f\left(x_i, y(x_i), \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{6} y'''(\eta_i)\right) + \frac{h^2}{12} y^{(4)}(\xi_i),$$

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

Método de diferencias finitas (III)

- Ahora con las condiciones de frontera $w_0 = \alpha$ y $w_{N+1} = \beta$ se obtiene

$$-\frac{w_{i+1} - 2w_i + w_{i-1}}{h^2} + f\left(x_i, w_i, \frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2h}\right) = 0,$$

para los puntos internos $i = 1, 2, \ldots, N$.

- Esta ecuación forma un sistema de ecuaciones no lineales de dimensión $N \times N$

$$\begin{aligned}
2w_1 - w_2 + h^2 f\left(x_1, w_1, \frac{w_2 - \alpha}{2h}\right) - \alpha &= 0,\\
-w_1 + 2w_2 - w_3 + h^2 f\left(x_2, w_2, \frac{w_3 - w_1}{2h}\right) &= 0,\\
&\vdots
\end{aligned}$$

Método de diferencias finitas (IV)

$$\begin{aligned}
-w_{N-2} + 2w_{N-1} - w_N + h^2 f\left(x_{N-1}, w_{N-1}, \frac{w_N - w_{N-2}}{2h}\right) &= 0,\\
-w_{N-1} + 2w_N + h^2 f\left(x_N, w_N, \frac{\beta - w_{N-1}}{2h}\right) - \beta &= 0.
\end{aligned}$$

- El sistema tiene una única solución si $h < 2/L$, [Keller, H. B., *Numerical methods for two-point boundary-value problems*, Blaisdell, Waltham, MA, 1968] y se puede usar el Método de Newton para iteraciones aplicado a sistemas no lineales para aproximar una solución.
- El método genera una secuencia $\{(w_1^{(k)}, w_2^{(k)}, \ldots, w_N^{(k)})^t\}$ que converge a la solución del sistema de ecuaciones siempre que una aproximación inicial, $(w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \ldots, w_N^{(0)})^t$, esté lo suficientemente cerca de la solución $(w_1, w_2, \ldots, w_N)^t$ y que la matriz jacobiana del sistema no sea singular.

Método de diferencias finitas (V)

- La matriz jacobiana es tridiagonal y sus elementos están dados por

$$J(w_1,\ldots,w_N)_{ij} = \begin{cases} -1+\frac{h}{2}f_{y'}\left(x_i,w_i,\frac{w_{i+1}-w_{i-1}}{2h}\right), & i=j-1 \wedge j=2,\ldots,N,\\ 2+h^2 f_y\left(x_i,w_i,\frac{w_{i+1}-w_{i-1}}{2h}\right), & i=j \wedge j=1,\ldots,N,\\ -1-\frac{h}{2}f_{y'}\left(x_i,w_i,\frac{w_{i+1}-w_{i-1}}{2h}\right), & i=j+1 \wedge j=1,\ldots,N-1,\end{cases}$$

donde $w_0=\alpha$ y $w_{N+1}=\beta$.

Método de diferencias finitas (VI)

- El método de Newton requiere que para cada iteración, el sistema lineal de dimensión $N\times N$ dado por

$$\begin{aligned} J(w_1,\ldots,w_N)(v_1,\ldots,v_N)^t &= \\ -\Bigg(2w_1-w_2-\alpha+h^2 f\left(x_1,w_1,\frac{w_2-\alpha}{2h}\right), \\ -w_1+2w_2-w_3+h^2 f\left(x_2,w_2,\frac{w_3-w_1}{2h}\right),\ldots, \\ -w_{N-2}+2w_{N-1}-w_N+h^2 f\left(x_{N-1},w_{N-1},\frac{w_N-w_{N-2}}{2h}\right), \\ -w_{N-1}+2w_N+h^2 f\left(x_N,w_N,\frac{\beta-w_{N-1}}{2h}\right)-\beta\Bigg)^t, \end{aligned}$$

se resuelva para $v_1,v_2,\ldots,v_N$ ya que

$$w_i^{(k)} = w_i^{(k-1)} + v_i,$$

para $i=1,2,\ldots,N$.

Algoritmo: diferencias finitas para problemas no lineales (I)

Entrada: La función $f(x, y, y')$ que se toma del módulo funciones; el intervalo $[a, b]$, los valores de la frontera α, β, un número entero $N \geq 2$, un valor de tolerancia TOL y un número máximo de iteraciones M que se leen del archivo de configuraciones. **Salida:** Los valores aproximados $w_i \approx y(x_i)$, para $i = 0, 1, \ldots, N+1$, con un error de aproximación TOL. **Requiere:** el módulo donde se definen las funciones.

1. Inicio.
2. Leer a, b, α, β, N, M, TOL.
3. Reservar memoria para $j(N)$, $m(N)$, $p(N)$, $q(N)$, $L(N)$, $u(N)$, $v(N)$, $z(N)$, $w(0 : N+1)$.
4. Definir $h = (b-a)/(N+1)$.
5. Definir $w(0) = \alpha$.
6. Definir $w(N+1) = \beta$.
7. Hacer para $i = 1, \ldots, N$:
   - 7.1 $w(i) = \alpha + ih(\beta - \alpha)/(b-a)$
8. Definir $k = 1$.
9. Hacer mientras que $k \leq M$:
   - 9.1 Definir $x = a + h$.
   - 9.2 Definir $t = (w_2 - \alpha)/(2h)$.
   - 9.3 Definir $j(1) = 2 + h^2 f_y(x, w_1, t)$.
   - 9.4 Definir $m(1) = -1 + (h/2)f_{y'}(x, w_1, t)$.

Algoritmo: diferencias finitas para problemas no lineales (II)

9. *continuación de 9*
   - 9.5 Definir $p(1) = -(2w_1 - w_2 - \alpha + h^2 f(x, w_1, t))$
   - 9.6 Hacer para $i = 2, \ldots, N-1$
     - 9.6.1 $x = a + ih$.
     - 9.6.2 $t = (w_{i+1} - w_{i-1})/(2h)$.
     - 9.6.3 $j(i) = 2 + h^2 f_y(x, w_i, t)$.
     - 9.6.4 $m(i) = -1 + (h/2)f_{y'}(x, w_i, t)$.
     - 9.6.5 $p(i) = -1 - (h/2)f_{y'}(x, w_i, t)$.
     - 9.6.6 $q(i) = -(2w_i - w_{i+1} - w_{i-1} + h^2 f(x, w_i, t))$.
   - 9.7 $x = b - h$.
   - 9.8 $t = (\beta - w_{N-1})/(2h)$.
   - 9.9 $j(N) = 2 + h^2 f_y(x, w_N, t)$.
   - 9.10 $p(N) = -1 - (h/2)f_{y'}(x, w_N, t)$.

9. *continuación de 9*
   - 9.11 $q(N) = -(2w_N - w_{N-1} - \beta + h^2 f(x, w_N, t))$.
   - 9.12 Definir $L(1) = j(1)$.
   - 9.13 Definir $u(1) = m(1)/L(1)$.
   - 9.14 Definir $z(1) = q(1)/L(1)$.
   - 9.15 Hacer para $i = 2, \ldots, N-1$:
     - 9.15.1 $L(i) = j(i) - p(i)u(i-1)$.
     - 9.15.2 $u(i) = m(i)/L(i)$.
     - 9.15.3 $z(i) = (q(i) - p(i)z(i-1))/L(i)$.
   - 9.16 $L(N) = j(N) - p(N)u(N-1)$.
   - 9.17 $z(N) = (q(N) - p(N)z(N-1))/L(N)$.
   - 9.18 Definir $v(N) = z(N)$.
   - 9.19 Definir $w(N) = w(N) + v(N)$.

Algoritmo: diferencias finitas para problemas no lineales (III)

9. *continuación de 9*
   - 9.20 Hacer para $i = N - 1, \dots, 1$:
     - 9.20.1 $v(i) = z(i) - u(i)v(i+1)$.
     - 9.20.2 $w(i) = w(i) + v(i)$.
   - 9.21 Si $||v|| \leq TOL$ entonces:
     - 9.21.1 Hacer para $i = 0, \dots, N+1$:
       - (a) $x = a + ih$.
       - (b) Imprimir $x, w(i)$.
     - 9.21.2 Fin.
   - 9.22 $k = k + 1$
10. Imprimir "No se ha encontrado solución".
11. Imprimir "Con",M,"iteraciones se obtiene un error", $||v||$.
12. Hacer para $i = 0, \dots, N+1$:
    - 12.1 $x = a + ih$.
    - 12.2 Imprimir $x, w(i)$.
13. Fin.

Otros métodos: método de elementos finitos

- Otro método para resolver ecuaciones diferenciales parciales es el de Elementos Finitos.
- Los elementos finitos o subdivisiones se hacen con una discretización espacial que genera una malla.
- Finalmente, el método de elementos finitos se convierte en un problema de valores en la frontera cuyas soluciones se reúnen en un sistema de ecuaciones mayor que es la solución del problema.
- El método de elementos finitos usa métodos variacionales para aproximar la solución minimizando la función de error asociado.
- Una ventaja del método de elementos finitos es la simplidad con la que se pueden manejar las condiciones de frontera.

Introducción (I)

- Las ecuaciones diferenciales parciales se separan en categorías de una forma similar a la de las secciones cónicas: elípticas, parabólicas e hiperbólicas.
- Consideremos que κ, c y ρ son funciones de (x, y, z) y representan la conductividad térmica, el calor específico y la densidad de un cuerpo en el punto (x, y, z). Entonces la temperatura, $u \equiv u(x, y, z, t)$ satisface la ecuación de calor

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa \frac{\partial u}{\partial z}\right) = c\rho \frac{\partial u}{\partial t}.$$

- Si κ, c y ρ son constantes, el problema se puede reducir a la ecuación de calor simple

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{c\rho}{\kappa}\frac{\partial u}{\partial t},$$

  y cuando la frontera es simple, la solución se puede encontrar usando Series de Fourier.

Introducción (II)

- Sin embargo, en muchos casos κ, c y ρ no son constantes o la frontera es irregular.
- Si la temperatura sólo involucra $u_{xx}(x, y)$ y $u_{yy}(x, y)$ se obtiene una ecuación elíptica.
- La ecuación de Poisson es una ecuación elíptica que describe la variación de temperatura de una región R en el tiempo usando

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = f(x, y).$$

- Para obtener soluciones únicas de la ecuacón de Poisson hay que imponer ciertas restricciones. Por ejemplo, para el estudio de distribuciones estacionarias de calor en una región plana se toma

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = 0,$$

  que se conoce como la ecuación de Laplace.

Introducción (III)

- Además, si la temperatura dentro de la región está determinada por la distribución de la temperatura en la frontera, las restricciones se conocen como *las condiciones de frontera de Dirichlet* y están dadas por
$$u(x, y) = g(x, y),$$
para $(x, y) \in S$, la frontera de R.
- Las ecuaciones elípticas también aparecen en otros fenómenos como la energía potencial de un punto en un plano, debido a fuercas gravitacionales o también en problemas de fluidos incompresibles.

Introducción (IV)

- Las ecuaciones parabólicas tienen la forma
$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - \alpha^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0.$$
- Esta ecuación puede describir el flujo de calor a lo largo de una varilla de longitud ℓ, si tiene una temperatura uniforme en cada elemento de área transversal y está perfectamente aislada en su superficie lateral. Entonces, α es determinada por las propiedades de condutividad de térmica del material de la varilla.
- Unas restricciones que se pueden poner son la distribución inicial de calor de la varilla, $u(x, 0) = f(x)$; o si los extremos se mantienen a temperaturas constantes U_1 y U_2 entonces se impone $u(0, t) = U_1$ y $u(\ell, t) = U_2$. Por otro lado, si los extremos están aislados no habrá flujo así que $\partial u(0, t)/\partial x = \partial u(\ell, t)/\partial x = 0$.
- Otra aplicación de las ecuaciones parabólicas es la ecuación de difusión.

Introducción (V)

- Un ejemplo de las ecuaciones hiperbólicas es el de una ecuación de onda 1D donde una cuerda de longitud ℓ se sujeta entre dos puntos a la misma altura.
- Si la cuerda vibra en un plano vertical con un desplazamiento $u(x,t)$, entonces

$$\alpha^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = 0, 0 < x < \ell, t > 0$$

  despreciando efectos de amortiguamiento.
- Algunas de las condiciones que se imponen a estos problemas son la posición inicial y la velocidad

$$u(x,0) = f(x), \text{ y, } \frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = g(x)$$

  para $0 \le x \le \ell$. O, si los puntos están fijos también se tiene $u(0,t) = u(\ell,t) = 0$.

Ecuación de Poisson

- La ecuación diferencial parcial elíptica que vamos a estudiar es la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 u(x,y) \equiv \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = f(x,y),$$

  en la región $R = \{(x,y)|a < x < b, c < y < d\}$, con $u(x,y) = g(x,y)$ para $(x,y) \in S$, donde S es la frontera de R.
- La ecuación de Poisson describe un proceso estacionario o una distribución en equilibrio de temperatura en la región R.
- Si f y g son continuas en sus respectivos dominios, entonces hay una única solución para la ecuación de Poisson.
- Para resolver este problema 2D se puede aplicar el método de diferencias finitas usando una grilla o cuadrícula equiespaciada.
- ¿Se podría usar una grilla no equiespaciada? ¿Cómo se aborda un problema donde R es irregular?

Método de diferencias finitas en la ecuación de Poisson (I)

- Es importante elegir adecuadamente la grilla para adaptar el método de diferencias finitas al problema 2D.
- Hay que tomar dos pasos: un paso horizontal, $h = (b - a)/n$, y un paso vertical $k = (d - c)/m$.
- Con m, n enteros, se tienen los puntos

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n,$$
$$y_j = c + jk, \quad j = 0, 1, \ldots, m.$$

- Las líneas $x = x_i$ y $y = y_i$ se llaman líneas de rejilla y sus intersectos son los puntos de red.
- Para cada punto interior, (x_i, y_i) para $i = 1, 2, \ldots, n-1$ y $j = 1, 2, \ldots, m-1$ se puede obtener la diferencia centrada para x, usando la serie de Taylor alrededor de x_i

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_j)}{\partial x^2} = \frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i-1}, y_j)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u(\xi_i, y_j)}{\partial x^4},$$

Método de diferencias finitas en la ecuación de Poisson (II)

- y la diferencia centrada para y, usando la serie de Taylor alrededor de y_i

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_i)}{\partial y^2} = \frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1})}{k^2} - \frac{k^2}{12}\frac{\partial^4 u(x_i, \eta_j)}{\partial y^4},$$

para $\xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$ y $\eta_j \in (y_{j-1}, y_{j+1})$.

- Ahora la ecuación de Poisson en el punto (x_i, y_j) es

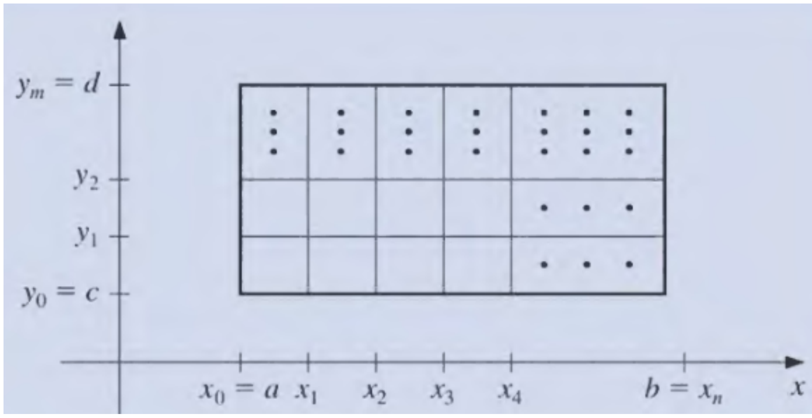
$$\frac{u(x_{i+1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i-1}, y_j)}{h^2} +$$
$$\frac{u(x_i, y_{j+1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j-1})}{k^2} =$$
$$f(x_i, y_j) + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u(\xi_i, y_j)}{\partial x^4} + \frac{k^2}{12}\frac{\partial^4 u(x_i, \eta_j)}{\partial y^4},$$

para $i = 1, 2, \ldots, n-1$ y $j = 1, 2, \ldots, m-1$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de Poisson (III)

- Las condiciones de frontera están dadas por

$$u(x_0, y_j) = g(x_0, y_j), \;\; u(x_n, y_j) = g(x_n, y_j), \qquad j = 0, 1, \ldots, m,$$
$$u(x_i, y_0) = g(x_i, y_0), \;\; u(x_i, y_m) = g(x_i, y_m), \quad i = 1, 2, \ldots, n-1.$$



[Burden, Faires y Burden. *Numerical Analysis*. 10th Ed.]

Método de diferencias finitas en la ecuación de Poisson (IV)

- La ecuación en diferencias, tomando $w_{ij} \approx u(x_i, y_j)$, es

$$2\left[\left(\frac{h}{k}\right)^2 + 1\right] w_{ij} - (w_{i+1,j} + w_{i-1,j}) - \left(\frac{h}{k}\right)^2 (w_{i,j+1} + w_{i,j-1}) = -h^2 f(x_i, y_j),$$

para $i = 1, 2, \ldots, n-1$ y $j = 1, 2, \ldots, m-1$.

- Las condiciones de frontera son

$$w_{0j} = g(x_0, y_j), \;\; w_{nj} = g(x_n, y_j), \qquad j = 0, 1, \ldots, m,$$
$$w_{i0} = g(x_i, y_0), \;\; w_{im} = g(x_i, y_m), \qquad i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

- La ecuación en diferencias da una aproximación de $u(x, y)$ en los puntos

$$(x_{i-1}, y_j), \; (x_i, y_j), \; (x_{i+1}, y_j), \;\; \text{y} \; (x_i, y_{j+1}),$$

con un error de truncamiento local del orden $O(h^2 + k^2)$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de Poisson (V)

- Ahora la ecuación en diferencias produce un sistema lineal de $(n-1)(m-1) \times (n-1)(m-1)$.
- Los cálculos matriciales se simplifican etiquetando cada punto con

$$P_\ell = (x_i, y_j), \text{ y } w_\ell = w_{i,j},$$

donde $\ell = i + (m-1-j)(n-1)$, para $i = 1, 2, \ldots, n-1$ y $j = 1, 2, \ldots, m-1$. Es decir, las etiquetas van de izquierda a derecha y de arriba a abajo.
- Estas nuevas etiquetas hacen que la matriz $w_{i,j}$ sea una matriz banda[1].
- Vamos a usar el método de Gauss-Seidel iterativo para resolver el sistema de ecuaciones.

[1] Los valores no nulos son confinados entorno a la diagonal principal, formando una banda de valores no nulos que completan la diagonal principal y más diagonales en cada uno de sus costados.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Poisson (I)

Entrada: Las funciones $f(x,y)$ y $g(x,y)$ se toman del módulo funciones; los intervalos $[a,b]$, $[c,d]$ y dos números enteros $m \geq 3$ y $n \geq 3$, los valores de tolerancia TOL y el máximo número de iteraciones *MaxIter* se leen del archivo de configuraciones. **Salida:** los valores de $u(x_i, y_j) \approx w_{i,j}$ para $i = 1, \ldots, n-1$ y $j = 1, \ldots, m$ -1 o el valor que se haya obtenido después de *MaxIter*. **Requiere:** el módulo donde se definen las funciones $f(x,y)$ y $g(x,y)$.

1. Inicio.
2. Leer a, b, c, d, m, n, TOL y *MaxIter*.
3. Reservar memoria para $x(n-1)$, $y(m-1)$, $w(n-1, m-1)$.
4. Definir $h = (b-a)/n$.
5. Definir $k = (d-c)/m$.
6. Hacer para $i = 1, \ldots, n-1$:
   6.1 Definir $x(i) = a + ih$.
7. Hacer para $j = 1, \ldots, m-1$:
   7.1 Definir $y(j) = c + jk$.
8. Definir $w = 0$.
9. Definir $\lambda = h^2/k^2$.
10. Definir $\mu = 2(1+\lambda)$.
11. Definir $\ell = 1$.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Poisson (II)

12. Hacer mientras que $\ell \leq$ *MaxIter*:
    - 12.1 Definir $z = (-h^2 f(x_1, y_{m-1}) + g(a, y_{m-1}) + \lambda g(x_1, d) + \lambda w_{1,m-2} + w_{2,m-1})/\mu$.
    - 12.2 Definir $NORM = |z - w_{1,m-1}|$.
    - 12.3 Definir $w_{1,m-1} = z$.
    - 12.4 Hacer para $i = 2, \ldots, n-2$:
        - 12.4.1 $z = (-h^2 f(x_i, y_{m-1}) + \lambda g(x_i, d) + w_{i-1,m-1} + w_{i+1,m-1} + \lambda w_{i,m-2})/\mu$.
        - 12.4.2 Si $|w_{i,m-1} - z| > NORM$: $NORM = |w_{i,m-1} - z|$.
        - 12.4.3 $w_{i,m-1} = z$.
    - 12.5 $z = (-h^2 f(x_{n-1}, y_{m-1}) + g(b, y_{m-1}) + \lambda g(x_{n-1}, d) + w_{n-2,m-1} + \lambda w_{n-1,m-2})/\mu$.

12. *continuación de 12*
    - 12.6 Si $|w_{n-1,m-1} - z| > NORM$: $NORM = |w_{n-1,m-1} - z|$.
    - 12.7 $w_{n-1,m-1} = z$.
    - 12.8 Hacer para $j = m-2, \ldots, 2$:
        - 12.8.1 $z = (-h^2 f(x_1, y_j) + g(a, y_j) + \lambda w_{1,j+1} + \lambda w_{1,j-1} + w_{2,j})/\mu$.
        - 12.8.2 Si $|w_{1,j} - z| > NORM$: $NORM = |w_{1,j} - z|$.
        - 12.8.3 $w_{1,j} = z$.
        - 12.8.4 Hacer para $i = 2, \ldots, n-2$:
            - 13.8.4.1 $z = (-h^2 f(x_i, y_i) + w_{i-1,j} + \lambda w_{i,j+1} + w_{i+1,j} + \lambda w_{i,j-1})/\mu$.
            - 13.8.4.2 Si $|w_{i,j} - z| > NORM$: $NORM = |w_{i,j} - z|$.
            - 13.8.4.3 $w_{i,j} = z$.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Poisson (III)

12. *continuación de 12*
    - 12.8 *continuación de 12.8*
        - 12.8.5 $z = (-h^2 f(x_{n-1}, y_j) + g(b, y_j) + w_{n-2,j} + \lambda w_{n-1,j+1} + \lambda w_{n-1,j-1})/\mu$.
        - 12.8.6 Si $|w_{n-1,j} - z| > NORM$: $NORM = |w_{n-1,j} - z|$.
        - 12.8.7 $w_{n-1,j} = z$.
    - 12.9 $z = (-h^2 f(x_1, y_1) + g(a, y_1) + \lambda g(x_1, c) + \lambda w_{1,2} + w_{2,1})/\mu$.
    - 12.10 Si $|w_{1,1} - z| > NORM$: $NORM = |w_{1,1} - z|$.
    - 12.11 $w_{1,1} = z$.
    - 12.12 Hacer para $i = 2, \ldots, n-2$:
        - 12.12.1 $z = (-h^2 f(x_i, y_1) + \lambda g(x_i, c) + w_{i-1,1} + \lambda w_{i,2} + w_{i+1,1})/\mu$.
        - 12.12.2 Si $|w_{i,1} - z| > NORM$: $NORM = |w_{i,1} - z|$.
        - 12.12.3 $w_{i,1} = z$.

12. *continuación de 12*
    - 12.13 $z = (-h^2 f(x_{n-1}, y_1) + g(b, y_1) + \lambda g(x_{n-1}, c) + w_{n-2,1} + \lambda w_{n-1,2})/\mu$
    - 12.14 Si $|w_{n-1,1} - z| > NORM$: $NORM = |w_{n-1,1} - z|$.
    - 12.15 $w_{n-1,1} = z$.
    - 12.16 Si $NORM \leq TOL$:
        - 12.16.1 Hacer para $i = 1, \ldots, n-1$:
            - 13.16.1.1 Hacer para $j = 1, \ldots, m-1$:
                - 13.16.1.1.1 Imprimir x_i, y_j, w_{ij}.
            - 13.16.1.2 Fin.
    - 12.17 $\ell = \ell + 1$.
13. Imprimir "Con", *MaxIter*, "se obtuvo una norma", *NORM*.
14. Imprimir $w_{i,j}$.
15. Fin.

Ecuación de calor o ecuación de difusión

- La ecuación diferencial parcial parabólica que vamos a estudiar es la ecuación de calor o la ecuación de difusión
$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2},$$
para $0 < x < \ell$ y $t > 0$. Con las condiciones
$$u(0,t) = u(\ell,t) = 0, \text{ para } t > 0,$$
$$u(x,0) = f(x), \text{ para } 0 \leq x \leq \ell.$$
- Hay que notar que, si esta ecuación describe la variación de temperatura en el tiempo para una barra de longitud ℓ, por los extremos no hay flujo de calor.
- Además, se considera que la barra está perfectamente aislada, de modo que no hay radiación térmica por la superficie lateral.
- Vamos a usar los métodos de diferencias adelantadas, diferencias atrasadas y diferencias centradas.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (I)

- Necesitamos definir un paso espacial, $h = \ell/m$ para $m > 0$, y un paso temporal, k.
- Los puntos de red serán (x_i, t_i), donde $x_i = ih$ con $i = 0, 1, \ldots, m$ y $t_j = jk$ con $j = 0, 1, \ldots$.
- Con la serie de Taylor en t se obtiene la diferencia adelantada
$$\frac{\partial u(x_i,t_j)}{\partial t} = \frac{u(x_i, t_j + k) - u(x_i, t_j)}{k} - \frac{k}{2}\frac{\partial^2 u(x_i, \mu_j)}{\partial t^2},$$
para $\mu_j \in (t_j, t_{j+1})$, y también con la serie de Taylor se obtiene la diferencia centrada para x
$$\frac{\partial^2 u(x_i,t_j)}{\partial x^2} = \frac{u(x_i + h, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(u_i - h, t_j)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\frac{\partial^2 u(\xi_i, t_j)}{\partial x^2}$$
para $\xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (II)

- Ahora, la ecuación de calor en el punto (x_i, t_j), para cada $i = 1, 2, \ldots, m-1$ y $j = 1, 2, \ldots$, es

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

- La ecuación en diferencias es

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

  donde $u(x_i, t_j) \approx w_{ij}$.
- El error de truncamiento local está dado por

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

  es decir, es un error de orden $O(k + h^2)$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (III)

- Ahora, de la ecuación en diferencias se obtiene

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

  para cada $i = 1, 2, \ldots, m-1$ y $j = 1, 2, \ldots$.
- Entonces podemos generar la primera *imagen* para t_0

$$w_{0,0} = f(x_0), \quad w_{1,0} = f(x_1), \ldots, w_{m,0} = f(x_m).$$

- Para el tiempo t_1 se tiene

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

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (IV)

$$w_{2,1} = \left(1 - \frac{2\alpha^2 k}{h^2}\right) w_{2,0} + \alpha^2 \frac{k}{h^2}(w_{3,0} + w_{1,0}),$$
$$\vdots$$
$$w_{m-1,1} = \left(1 - \frac{2\alpha^2 k}{h^2}\right) w_{m-1,0} + \alpha^2 \frac{k}{h^2}(w_{m,0} + w_{m-2,0}),$$
$$w_{m,1} = u(m, t_1) = 0.$$

- Con estos valores $w_{i,1}$, generamos los valores de $w_{i,2}$ y así hasta el tiempo que interese.
- Esto genera un sistema de $(m-1) \times (m-1)$ ecuaciones que, al analizarlo de forma matricial, se puede escribir $\vec{w}^{(j)} = A\vec{w}^{(j-1)}$, donde A es una matriz tridiagonal con elementos en la diagonal principal $(1-2\lambda)$ y en las otras dos diagonales $\lambda = \alpha^2 k h^{-2}$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (V)

- Un problema del método de diferencias finitas basado en las diferencias adelantadas es la estabilidad, que requiere que en el n-ésimo paso $||A^n|| \leq 1$.
- Si se puede calcular el radio espectral de A, con $\rho(A) = \text{máx}\{\phi_i\}$ donde $\{\phi_i\}$ son los autovalores de A. Entonces la condición de estabilidad se puede estimar ya que

$$\rho(A) \leq ||A||.$$

- Para obtener un método que es *incondicionalmente* estable hay que usar las diferencias atrasadas tomando

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

donde $\mu_j \in (t_{j-1}, t_j)$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (VI)

- La debilidad del método basado en diferencias atrasadas es que el error de truncamiento local tiene uno término de orden $O(h^2)$ y el otro de orden $O(k)$.
- Esto quiere decir que los intervalos de tiempo deben ser mucho más pequeños que los intervalos en x
- Usando la ecuación para $\partial u/\partial t$ en diferencias atrasadas y la ecuación que obtuvimos para $\partial^2 u/\partial x^2$ en el método de diferencias adelantadas, la ecuación de calor queda

$$\frac{u(x_i,t_j)-u(x_i,t_{j-1})}{k}-\alpha^2\frac{u(x_{i+1},t_j)-2u(x_i,t_j)+u(x_{i-1},t_j)}{h^2}=$$
$$-\frac{k}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,\mu_j)}{\partial t^2}-\alpha^2\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u(\xi_i,t_j)}{\partial x^2},$$

para $\mu_j \in (t_{j-1},t_j)$ y $\xi_i \in (x_{i-1},x_{x+1})$.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (VII)

- Ahora, la ecuación en diferencias es

$$\frac{w_{ij}-w_{i,j-1}}{k}-\alpha^2\frac{w_{i+1,j}-2w_{ij}+w_{i-1,j}}{h^2}=0,$$

para cada $i=1,2,\ldots,m-1$ y $j=1,2,\ldots$.
- Si se usa $\lambda=\alpha^2kh^{-2}$, el método de diferencias atrasadas se convierte en

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

para cada $i=1,2,\ldots,m-1$ y $j=1,2,\ldots$.
- Usando las condiciones de frontera $w_{i,0}=f(x_i)$ para cada $i=1,2,\ldots,m-1$, y $w_{m,j}=w_{0,j}=0$ para cada $j=1,2,\ldots$, se obtiene un sistema de ecuaciones $A\vec{w}^{(j)}=\vec{w}^{(j-1)}$
- La matriz A es tridiagonal, con los elementos en la diagonal $1+2\lambda$ y las otras diagonales con elementos $-\lambda$. Además, es definida positiva puesto que $\lambda>0$ y de diagonal *estrictamente dominante*, por lo que se puede usar el método de factorización de Crout.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (VIII)

- Para poder tener un error de truncamiento local del orden $O(k^2 + h^2)$ se puede usar la serie de Taylor para t para $u(x,t)$ en el punto (x_i, t_j) y evaluarlo en (x_i, t_{j+1}) y (x_i, t_{j-1}) para obtener la fórmula de la diferencia centrada

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

donde $\mu_j \in (t_{j-1}, t_{j+1})$.

- La ecuación en diferencias es

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{i,j-1}}{2k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{ij} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

que se conoce como el método de Richardson.

- Aunque se mejora el error, el método también tiene problemas de estabilidad.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (IX)

- También existe el método de Crank-Nicolson que tiene un error de truncamiento local del orden $O(k^2 + h^2)$ y que satisface las condiciones de estabilidad.
- El método consiste en promediar el método de diferencias adelantadas en el j-ésimo paso de t

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{i,j}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

- con el $(j+1)$-ésimo paso en t del método de diferencias atrasadas

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{i,j}}{k} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{h^2} = 0.$$

- Los errores de truncamiento local para las diferencias adelantadas y atrasadas es

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

respectivamente.

Método de diferencias finitas en la ecuación de calor (X)

- Si se asume que

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

entonces la diferencia promediada es

$$\frac{w_{i,j+1} - w_{ij}}{k} - \frac{\alpha^2}{2}\left[\frac{w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}}{h^2}\right.$$
$$\left.\frac{w_{i+1,j+1} - 2w_{i,j+1} + w_{i-1,j+1}}{h^2}\right] = 0.$$

- El método de Crank-Nicolson en forma matricial es $A\vec{w}^{(j+1)} = B\vec{w}^{(j)}$, para cada $j = 0, 1, 2, \ldots$. La matriz A definida positiva, estrictamente dominante diagonal y es tridiagonal, la diagonal tiene elementos $1 + \lambda$ y las otras diagonales tienen elementos $-\lambda/2$. La matriz B también es tridiagonal, la diagonal tiene elementos $1 - \lambda$ y las otras diagonales tienen elementos $\lambda/2$.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Calor (I)

con diferencias atrasadas y el método de factorización de Crout **Entrada:** La función $f(x)$ se toma del módulo funciones; la longitud de la barra ℓ, el tiempo máximo T, la constante α, el número de segmentos de la barra $m \geq 3$ y el número de pasos temporales $N \geq 1$ se leen del archivo de configuraciones. **Salida:** los valores de $u(x_i, t_j) \approx w_{i,j}$ para cada $i = 1, \ldots, m-1$ y $j = 1, \ldots, N$. **Requiere:** el módulo donde se define la función $f(x)$.

1. Inicio.
2. Leer los valores ℓ, T, α, m y N.
3. Reservar memoria para $w(m-1)$, $u(m-1)$ $v(m-1)$, $z(m-1)$.
4. Definir $h = \ell/m$.
5. Definir $k = T/N$.
6. Definir $\lambda = \alpha^2 k h^{-2}$.
7. Hacer para $i = 1, \ldots, m-1$:
   7.1 Definir $w(i) = f(ih)$.
8. Definir $v(1) = 1 + 2\lambda$.
9. Definir $u(1) = -\lambda/v(1)$.
10. Hacer para $i = 2, \ldots, m-2$:
    10.1 $v(i) = 1 + 2\lambda + \lambda u(i-1)$.
    10.2 $u(i) = -\lambda/v(i)$.
11. $v(m-1) = 1 + 2\lambda + \lambda u(m-2)$.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Calor (II)

con diferencias atrasadas y el método de factorización de Crout

12. Hacer para $j = 1, \ldots, N$:
    - 12.1 Definir $t = jk$.
    - 12.2 Definir $z(i) = w(1)/v(1)$.
    - 12.3 Hacer para $i = 2, \ldots, m-1$:
        - 12.3.1 $z(i) = (w(i) + \lambda z(i-1))/v(i)$.
    - 12.4 $w(m-1) = z(m-1)$
    - 12.5 Hacer para $i = m-2, \ldots, 1$:
        - 12.5.1 $w(i) = z(i) - u(i)w(i+1)$.
    - 12.6 Imprimir t
    - 12.7 Hacer para $i = 1, \ldots, m-1$:
        - 12.7.1 Definir $x = ih$.
        - 12.7.2 Imprimir $x, w(i)$.
13. Fin.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Calor (I)

con diferencias centradas (Método de Crank-Nicolson)
Entrada: La función $f(x)$ se toma del módulo funciones; la longitud de la barra ℓ, el tiempo máximo T, la constante α, el número de segmentos de la barra $m \geq 3$ y el número de pasos temporales $N \geq 1$ se leen del archivo de configuraciones. **Salida:** los valores de $u(x_i, t_j) \approx w_{i,j}$ para cada $i = 1, \ldots, m-1$ y $j = 1, \ldots, N$. **Requiere:** el módulo donde se define la función $f(x)$.

1. Inicio.
2. Leer los valores ℓ, T, α, m y N.
3. Reservar memoria para $w(m-1)$, $u(m-1)$ $v(m-1)$, $z(m-1)$.
4. Definir $h = \ell/m$.
5. Definir $k = T/N$.
6. Definir $\lambda = \alpha^2 k h^{-2}$.
7. Definir $w(m) = 0$.
8. Hacer para $i = 1, \ldots, m-1$:
    - 8.1 $w(i) = f(ih)$.
9. Definir $v(1) = 1 + \lambda$.
10. Definir $u(1) = -\lambda/(2v(1))$.
11. Hacer para $i = 2, \ldots, m-2$:
    - 11.1 $v(i) = 1 + \lambda + \lambda u(i-1)/2$.
    - 11.2 $u(i) = -\lambda/(2v(i))$.
12. $v(m-1) = 1 + \lambda + \lambda u(m-2)/2$.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de Calor (II)

con diferencias centradas (Método de Crank-Nicolson)

13. Hacer para $j = 1, \ldots, N$:
    - 13.1 Definir $t = jk$.
    - 13.2 Definir $z(1) = [(1-\lambda)w(1) + \lambda w(2)/2]/v(1)$.
    - 13.3 Hacer para $i = 2, \ldots, m-1$:
        - 13.3.1 $z(i) = [(1-\lambda)w(i) + \lambda(w(i+1) + w(i-1) + z(i-1)/2)]/v(i)$
    - 13.4 $w(m-1) = z(m-1)$.
    - 13.5 Hacer para $i = m-2, \ldots, 1$:
        - 13.5.1 $w(i) = z(i) - u(i)w(i+1)$.
    - 13.6 Imprimir t
    - 13.7 Hacer para $i = 1, \ldots, m-1$:
        - 13.7.1 Imprimir $x, w(i)$.
14. Fin.

Ecuación de onda

- La ecuación diferencial parcial hiperbólica que vamos a estudiar es la ecuación de onda para una cuerda de longitud ℓ es

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

  para $0 < x < \ell$ y $t > 0$, donde $u(x,t)$ es el posición en el punto x de la cuerda en el instante t y α es una constante que depende de las condiciones físicas del problema.
- Vamos a considerar las condiciones iniciales

$$u(0,t) = u(\ell,t) = 0, \quad \text{para } t > 0,$$

$$u(x,0) = f(x), \quad \text{y} \quad \frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = g(x), \quad \text{para } 0 \le x \le \ell,$$

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (I)

- Tomando un número entero $m > 0$ se define el paso espacial $h = \ell/m$, también se debe definir un paso temporal de tamaño $k > 0$, de modo que los puntos de la malla están dados por

$$\begin{aligned} x_i &= ih, \quad i = 0, 1, \ldots, m, \\ t_j &= jk, \quad j = 0, 1, \ldots . \end{aligned}$$

- En cada punto interior (x_i, t_j) la ecuación de onda es

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

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (II)

- El método de diferencias finitas se aplica con las diferencias centrales para el tiempo

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial t^2} = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i, t_{j-1})}{k^2} - \frac{k^2}{12} \frac{\partial^4 u(x_i, \mu_j)}{\partial t^4},$$

donde $\mu_j \in (t_{j-1}, t_{j+1})$. Y para el espacio

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2} = \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{h^2} - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u(\xi_i, t_j)}{\partial x^4},$$

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

- Los errores que aparecen son errores locales

$$\tau_{i,j} = \frac{1}{12} \left[k^2 \frac{\partial^4 u(x_i, \mu_j)}{\partial t^4} - \alpha^2 h^2 \frac{\partial^4 u(\xi_i, t_j)}{\partial x^4} \right].$$

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (III)

- Ahora, la ecuación de onda para los puntos internos queda

$$\frac{u(x_i, t_{j+1}) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i, t_{j-1})}{k^2}$$
$$-\alpha^2 \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{h^2} = \tau_{i,j}.$$

- Por lo que se puede obtener la ecuación en diferencias

$$\frac{w_{i,j+1} - 2w_{i,j} + w_{i,j-1}}{k^2} - \alpha^2 \frac{w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}}{h^2} = 0,$$

- ahora si $\lambda = \alpha k/h$, se puede obtener

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

  para cada $i = 1, 2, \ldots, m-1$ y $j = 1, 2, \ldots$, y con la condición inicial

$$w_{i,0} = f(x_i), \forall i = 1, 2, \ldots, m-1.$$

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (IV)

- Para el instante $j+1$ se debe resolver el sistema de ecuaciones $\vec{w}_{i,j+1} = A\vec{w}_{i,j} - \vec{w}_{i,j-1}$, donde

$$\vec{w}_{i,j} = \begin{pmatrix} w_{1,j} \\ w_{2,j} \\ \vdots \\ w_{m-1,j} \end{pmatrix},$$

  y A es una matriz tridiagonal cuyos elementos diagonales son $2(1-\lambda^2)$ y los elementos de las otras dos diagonales son λ^2.
- Aquí surge un problema ya que, según el sistema de ecuaciones, la $(j+1)$-ésima aproximación depende de las dos aproximaciones anteriores, la j-ésima y la $(j-1)$-ésima y sólo conocemos las condiciones iniciales, $j = 0$.

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (V)

- Los valores para $j = 1$, necesarios para calcular $\vec{w}_{i,2}$ se deben aproximar usando la condición de velocidad inicial

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = g(x), 0 \leq x \leq \ell.$$

- Usando aproximación con una diferencia adelantada

$$\frac{u(x_i,0)}{\partial t} = \frac{u(x_i,t_1) - u(x_i,0)}{k} - \frac{k}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,\tilde{\mu}_i)}{\partial t^2},$$

para $\tilde{\mu}_i \in (0, t_1)$.

- Resolviendo para $u(x_i, t_1)$ y usando la función de velocidad inicial en x_i se tiene

$$u(x_i,t_1) = u(x_i,0) + kg(x_i) + \frac{k^2}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,\tilde{\mu}_i)}{\partial t^2}.$$

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (V)

- Esto permite hacer la aproximación

$$w_{i,1} = w_{i,0} + kg(x_i), \forall i = 1, \ldots, m-1,$$

con un error de truncamiento del orden $O(k)$.

- Para obtener una mejor aproximación de $u(x_i, 0)$ se puede expandir $u(x_i, t_i)$ con un polinomio de Maclaurin en t

$$u(x_i,t_1) = u(x_i,0) + k\frac{\partial u(x_i,0)}{\partial t} + \frac{k^2}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,0)}{\partial t^2} + \frac{k^3}{6}\frac{\partial^3 u(x_i,\hat{\mu}_i)}{\partial t^3},$$

para $\hat{\mu}_i \in (0, t_1)$.

- Si existe f'' y se puede calcular, entonces

$$\frac{\partial^2 u(x_i,0)}{\partial t^2} = \alpha^2\frac{\partial^2 u(x_i,0)}{\partial x^2} = \alpha^2\frac{\partial^2 f(x_i)}{\partial x^2} = \alpha^2 f''(x_i),$$

además,

$$u(x_i,t_1) = u(x_i,0) + kg(x_i) + \frac{\alpha^2 k^2}{2}f''(x_i) + \frac{k^3}{6}\frac{\partial^3 u(x_i,\hat{\mu}_i)}{\partial t^3}.$$

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (VI)

- Entonces se hace una aproximación con un error del orden $O(k^3)$

$$w_{i,1} = w_{i,0} + kg(x_i) + \frac{\alpha^2 k^2}{2} f''(x_i).$$

- En el caso de que $f''(x_i)$ no se pueda obtener fácilmente, se puede hacer una aproximación

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1} - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\tilde{\xi}_i),$$

para $\xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$.
- De modo que

$$\begin{aligned} u(x_i, t_1) =& u(x_i, 0) + kg(x_i) + \frac{k^2\alpha^2}{2h^2}\left[f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})\right] \\ &+ O(k^3 + h^2 k^2), \end{aligned}$$

Método de diferencias finitas para la ecuación de onda (VII)

- o, usando $\lambda = k\alpha/h$, se tiene

$$u(x_i, t_1) = (1-\lambda^2) f(x_i) + \frac{\lambda^2}{2} f(x_{i+1}) + \frac{\lambda^2}{2} f(x_{i-1}) + kg(x_i) + O(k^3 + h^2 k^2).$$

- Ahora, la ecuación en diferencias para $j = 1$ es

$$w_{i,1} = (1 - \lambda^2) f(x_i) + \frac{\lambda^2}{2} f(x_{i+1}) + \frac{\lambda^2}{2} f(x_{i-1}) + kg(x_i),$$

para $i = 1, 2, \ldots, m-1$. Con lo cual, ya se pueden calcular las aproximaciones $w_{i,j}$ para $j \geq 2$.
- Este método sólo es estable cuando $\lambda = \alpha k/h \leq 1$. Además, el algoritmo que se describirá converge con un orden $O(h^2 + k^2)$ si f y g son diferenciables.
- Existen otros métodos que son *incondicionalmente estables* [Ames, W.F. *Numerical methods for partial differential equations*. Academic Press, 1992].

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de onda (I)

Entrada: Las funciones $f(x)$ y $g(x)$ se toman del módulo funciones; la longitud de la cuerda ℓ, el tiempo máximo T, la constante α, el número de subdiviciones de la cuerda $m \geq 2$ y el número de pasos temporales $N \geq 2$ se leen del archivo de configuraciones. **Salida:** los valores de $u(x_i, t_j) \approx w_{i,j}$ para cada $i = 0, \ldots, m$ y $j = 0, \ldots, N$. **Requiere:** el módulo donde se definen las funciones $f(x)$ y $g(x)$.

1. Inicio.
2. Leer los valores ℓ, T, α, m y N.
3. Reservar memoria para $w(0 : m, 0 : N)$.
4. Definir $h = \ell/m$.
5. Definir $k = T/N$.
6. Definir $\lambda = k\alpha/h$.
7. Hacer para $j = 1, \ldots, N$:
   - 7.1 Definir $w(0, j) = 0$.
   - 7.2 Definir $w(m, j) = 0$.
8. $w(0, 0) = f(0)$
9. $w(m, 0) = f(\ell)$
10. Hacer para $i = 1, \ldots, m-1$:
    - 10.1 $w(i, 0) = f(ih)$.
    - 10.2 $w(i, 1) = (1 - \lambda^2)f(ih) + \lambda^2[f((i+1)h) + f((i-1)h)]/2 + kg(ih)$.

Algoritmo de diferencias finitas para la ec. de onda (II)

11. Hacer para $j = 1, \ldots, N-1$:
    - 11.1 Hacer para $i = 1, \ldots, m-1$:
      - 11.1.1 $w(i, j+1) = 2(1-\lambda^2)w(i, j) + \lambda^2(w(i+1, j) + w(i-1, j)) - w(i, j-1)$.
12. Hacer para $j = 0, \ldots, N$:
    - 12.1 Definir $t = jk$.
    - 12.2 Hacer para $i = 0, \ldots, m$:
      - 12.2.1 Definir $x = ih$.
      - 12.2.2 Imprimir $(x, t, w(i, j))$.
13. Fin.

¡Muchas gracias!

Contacto:
Giovanni Ramírez García, PhD
ramirez@ecfm.usac.edu.gt
http://ecfm.usac.edu.gt/ramirez