Universidad De Sonora

División de Ciencias Exactas y Naturales
Licenciatura En Física

Física Computacional I

Actividad XIII

"ReportePDEs"

Gabriel Alberto López Monge

Profr. Carlos Lizárraga Celaya

Mayo 1 del 2021

Solución Numérica de la Ecuación del Calor

La ecuación del calor es de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

donde la constante κ es el coefficiente de difusividad.

La Ecuación del Calor describe el flujo de calor en una región mediante los cambios de la Temperatura $u(x, t)$.

En un medio unidimensional x, la ecuación se simplifica

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)$$

Resolviendo la Ecuación de Calor mediante Diferencias Finitas.

El **método de diferencias finitas** utiliza Series de Taylor para aproximar las derivadas.

Aproximación de la primer derivada.

Si se conoce el valor de una función $f(x)$ en un punto x_0, se puede conocer el valor en una vecindad $x_0 + h$, con h pequeño, utilzando una Serie de Taylor

$$f(x_0 + h) \approx f(x_0) + \frac{h}{1!} f'(x_0) + \mathcal{O}(h^2)$$

de la ecuación anterior, obtenemos el valor aproximado de la primer derivada

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \mathcal{O}(h^2)$$

El término $\mathcal{O}(h^2)$ denota términos de orden h^2 y superior.

Esta aproximación de la primera derivada, se le conoce como *diferencias finitas de $f'(x_0)$ hacia enfrente*, porque involucra un punto hacia enfrente en la derivada.

De la misma forma se obtiene el término de diferencias finitas hacia atrás

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Podemos promediar las dos ecuaciones anteriores y se obtiene una *diferencia finita centrada* de orden superior

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^3)$$

Aproximación de la segunda derivada

Podemos utilizar esta última ecuación para calcular la aproximación de la segunda derivada

$$f''(x_0) \approx \frac{f'(x_0+h) - f'(x_0)}{h} + \mathcal{O}(h^2)$$

y substituimos $f(x_0+h)$ por una *diferencia finita hacia atrás*

$$f'(x_0+h) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + \mathcal{O}(h^2)$$

y la derivada $f'(x_0)$ por una *diferencia finita hacia atrás*

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Finalmente obtenemos la *diferencia finita centrada de segundo orden* para $f''(x_0)$ que involucra los valores en 3 puntos.

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^3)$$

Solución de la Ecuación de Calor por un método híbrido (EDP > EDO).

Podemos escribir la ecuación del calor como

$$\begin{aligned}\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} &= \kappa \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \\ &\approx \kappa \frac{u(x+h,t) - 2u(x,t) + u(x-h,t)}{h^2}\end{aligned}$$

y luego integrar en el tiempo como si tuviéramos una ecuación diferencial ordinaria.

Formalmente, para un determinado punto (jh, t), tendremos la ecuación diferencial ordinaria $u(jh, t) = u_j(t)$

$$\frac{du_j(t)}{dt} = \kappa \frac{u_{j+1}(t) - 2u_j(t) + u_{j-1}(t)}{h^2}$$

para la cual requerimos proporcionar la condición inicial al tiempo $t = 0$

$$u(0) = f(x)$$

Y condiciones a la frontera:

- $u_0 = c_1, u_N = c_2$, para el tipo de Dirichlet
- Del tipo Neumann, $du_0/dx = 0$ ó $dx_N/dx = 0$, para casos de equilibrio térmico.

Condiciones a la frontera tipo Neumann

Tenemos que definir cómo estimar la derivada en la frontera, digamos en la frontera $x = L$. Recordando que estamos usando un aproximación de segundo orden para $\partial^2 u/\partial x^2$, debemos encontrar una aproximación para la primer derivada también de orden h^2

$$\frac{du}{dx} = \frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2h} = 0$$
$$u_{N+1} = u_{N-1}$$

aunque formalmente u_{N+1} esta "fuera" de nuestro dominio, pero utilizamos esto para determinar la ecuación que se satisface en la frontera, reemplazando $u_{N+1} = u_{N-1}$ en la ecuación del calor obteniendo

$$\frac{du_N(t)}{dt} = \kappa \frac{2u_{N-1}(t) - 2u_N(t)}{h^2}$$

Solución Numérica de la Ecuación de Onda

La ecuación de onda es una ecuación diferencial parcial de segundo orden en el tiempo y las coordenadas espaciales y tiene la forma

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + f(x, y, z, t)$$

donde c^2 es la velocidad de propagación de la información. La función $u(x, y, z, t)$ representa la presión en una onda acústica, la intensidad de un campo electromagnético, el desplazamiento respecto a un nivel de referencia como lo puede ser la amplitud de una onda superficial en la superficie del agua o el desplazamiento respecto a la horizontal de una cuerda vibrante.

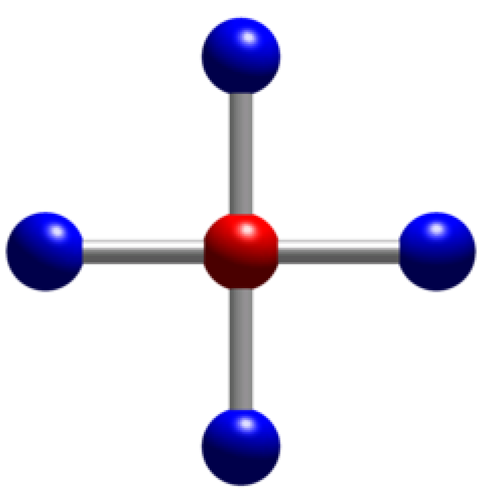
En una dimensión, por ejemplo el caso de una cuerda vibrante, la Ecuación de Onda se simplifica a

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + f(x, t) \qquad x \in (0, L], t \in (0, T]$$

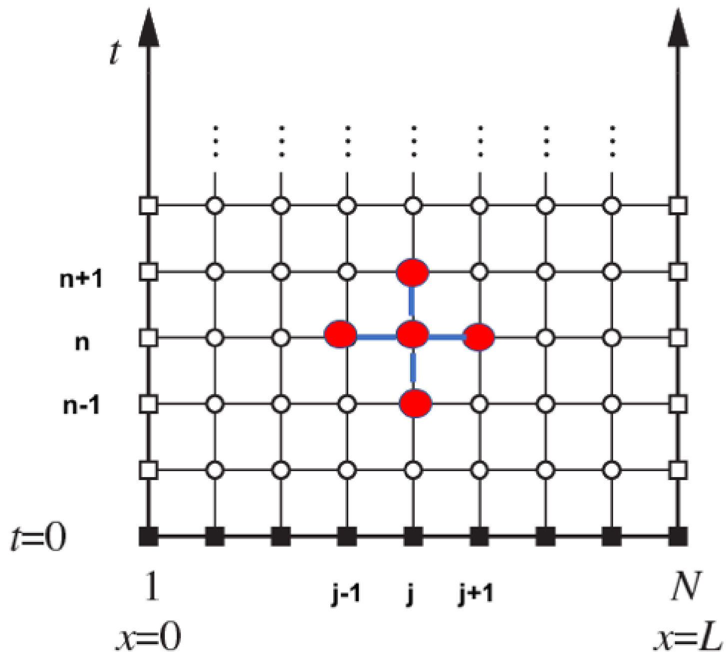
Requerimos definir 4 condiciones: 2 iniciales (derivada de segundo orden en t) y 2 a la frontera (segundo orden en el espacio), para encontrar la solución.

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= I(x) \\ \frac{\partial}{\partial t} u(x, 0) &= 0 \\ u(0, t) &= 0 \\ u(L, t) &= 0 \end{aligned}$$

Se requiere también especificar el valor de la constante c y la función $I(x)$.



El cual nos permite calcular los valores de $u(x,t)$ en el espacio discretizado: $x_0 = 0, x_1, x_2, \ldots, x_M = L$, $t_0 = 0, t_1, t_2, \ldots, t_N = T$, espaciados uniformamente por $h = \Delta x$ y $k = \Delta t$.



Para inicial el algoritmo tendremos que calcular el primer nivel de $u(x,k)$ en $t = k$, usando sólo la información de la condición inicial, con otro esténcil de 4 puntos similar al que utilizamos en la Ecuación de Calor.

Una vez hecho esto, ya podremos calcular todos los valores futuros de $u(x, t+k)$ ya que se conocen los valores de $u(x,t)$ y $u(x,t-k)$.

Ecuación de Onda en diferencias finitas

Si definimos $u(x,t) = u(jh, nk) = u_j^n$, la ecuación de onde la podemos expresar

$$\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{k^2} = c^2 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}$$

y despejamos para el valor desconocido u_j^{n+1}

$$u_j^{n+1} = 2u_j^n - u_j^{n-1} + C^2(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

donde hemos introducido la constante $C^2 = c^2k^2/h^2$, conocida como la constante de Courant.

Iniciando el algoritmo

Como no se puede aplicar el esténcil de 5 puntos pata calcular el primer nivel usaremos un esténcil similar de 4 puntos con la información de la condición inicial para calcular $u(x, t=k)$.

Remplazamos la condición inicial por diferencias finitas centradas de segundo orden

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j^0 = \frac{u_j^1 - u_j^{-1}}{2k} = 0$$

lo que indica que $u_j^1 = u_j^{-1}$.

Sustituimos la igualdad anterior en la ecuación de onda y nos queda que

$$u_j^1 = u_j^0 + \frac{C^2}{2}(u_{j+1}^0 - 2u_j^0 + u_{j-1}^0)$$

Y ya tendremos dos niveles de valores para $u(x,t)$ para calcular los valores de u_j^{n+1} usando el

Ejercicio 1:

Modifique el algoritmo de diferencias finitas empleado anteriormente y resuelva la ecuación de onda amortiguada en una dimensión, dada por la ecuación

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + b\frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \qquad x \in (0, L], t \in (0, T]$$

donde $b \geq 0$ y c son constantes.

Se proporcionan las condiciones iniciales y a la frontera para encontrar la solución.

$$\begin{aligned} u(x,0) &= I(x) \\ \frac{\partial}{\partial t} u(x,0) &= 0 \\ u(0,t) &= 0 \\ u(L,t) &= 0 \end{aligned}$$

Utilice diferencias finitas centradas de segundo orden para aproximar la primer derivada $\partial u/\partial t$.

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x,t) \approx \frac{u(x,t+k) - u(x,t-k)}{2k}$$

Suponga las mismas características del ejemplo presentado anteriormente $L = 10$, $c = 100$m/s, $t = (0, 0.25)$, y coeficiente de amortiguamiento $b = 0.5$ con condiciones iniciales $u(x,0) = x(1-x)$ y $\partial u(x,0)/\partial t = 0$ y condiciones a la frontera $u(0,t) = u(L,t) = 0$.

Ejercicio 2:

Haga el desarrollo del algoritmo de diferencias finitas centradas para resolver la ecuación de onda en 1 dimensión si se tiene un término de forzamiento $f(x,t)$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) + f(x,t) \qquad x \in (0, L], t \in (0, T]$$

Con las condiciones iniciales y a la frontera para encontrar la solución.

$$
\begin{aligned}
u(x,0) &= I(x) \\
\frac{\partial}{\partial t} u(x,0) &= 0 \\
u(0,t) &= 0 \\
u(L,t) &= 0
\end{aligned}
$$

Solución de Ecuaciones Diferenciales Parciales de tipo Elíptico

Veremos en esta semana la solución de la Ecuación de Poisson

$$-\nabla^2 u(x,y,z) = f(x,y,z)$$

con distintas condiciones a la frontera:

- Condiciones de Dirichlet (especificando valores de la función u)
- Condiciones de Neumann (especificando valores de la derivada de la función u perpendicular a la frontera $\partial u/\partial n$).

La Ecuación de Poisson aparece en problemas de campos gravitatorios, campos eléctricos y otros problemas en la Física.

La Ecuación de Poisson es la generalización de la Ecuación de Laplace.

$$\nabla^2 u = 0$$

Solución Numérica de la Ecuación de Poisson por diferencias finitas en 2-D con condiciones a la frontera de tipo Dirichlet.

Se busca la solución de la ecuación

$$-\nabla^2 u = f$$

dadas las condiciones en la frontera Γ

$$u(x,y)_\Gamma = g(x,y)$$

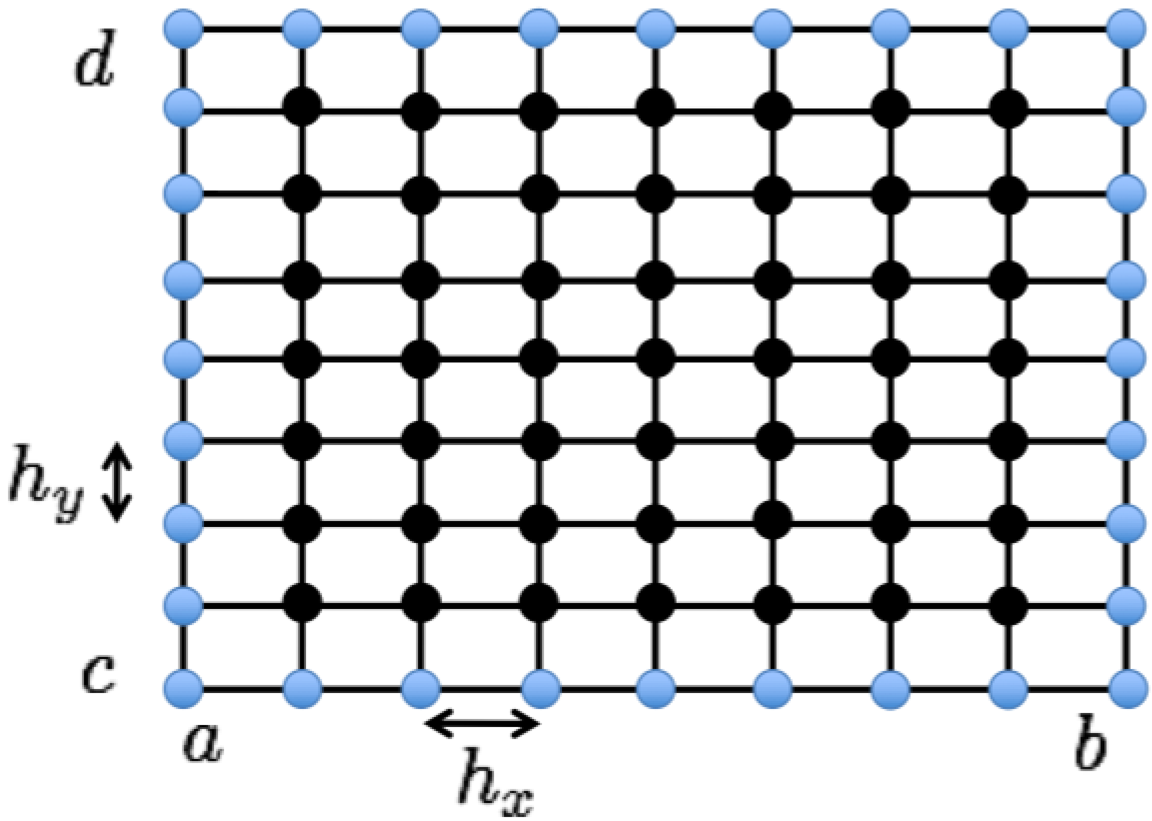
No requerimos una condición inicial, pues no hay dependencia en el tiempo. Sólo requerimos conocer los valores a la frontera.

Supongamos que tenemos un dominio rectangular cartesiano $\Gamma = (a,b) \times (c,d)$, sobre el cual generamos una malla

$$\begin{aligned} x_i &= a + ih_x \quad & i = 0,1,2,\ldots,M \\ y_k &= c + kh_y \quad & k = 0,1,2,\ldots,N \end{aligned}$$

donde los incrementos h_x y h_y estan definidos como

$$h_x = \frac{(b-a)}{M}$$
$$h_y = \frac{(d-c)}{N}$$



Si aproximamos las derivadas parciales de segundo orden de la ecuación de Poisson por diferencias finitas centradas de segundo orden

$$\frac{\partial^2 u(x_i,y_k)}{\partial x^2} = \frac{u(x_{i+1},y_k) - 2u(x_i,y_k) + u(x_{i-1},y_k)}{h_x^2} + \mathcal{O}(h_x^3)$$
$$\frac{\partial^2 u(x_i,y_k)}{\partial y^2} = \frac{u(x_i,y_{k+1}) - 2u(x_i,y_k) + u(x_i,y_{k-1}}{h_y^2} + \mathcal{O}(h_y^3)$$

Si denotamos por $U_{i,k}$ el valor aproximado de $u(x_i,y_k)$, la ecuación de Poisson se puede aproximar por

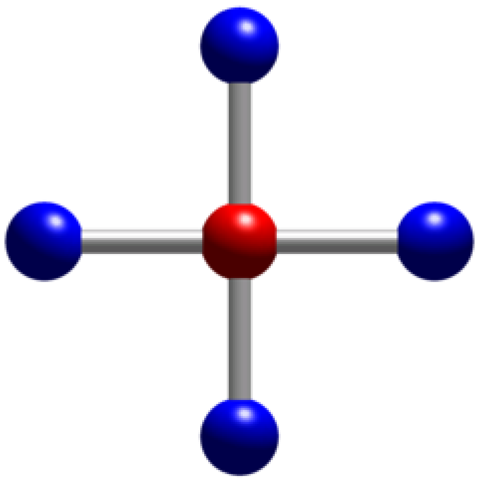
$$-\frac{U_{i+1,k} - 2U_{i,k} + U_{i-1,k}}{h_x^2} - \frac{U_{i,k+1} - 2U_{i,k} + U_{i,k-1}}{h_y^2} = f_{i,k} + \mathcal{O}(h_x^3, h_y^3)$$

Simplificando la expresión anterior y eliminando errores de orden superior, tendremos

$$\begin{aligned} &-\left(\frac{U_{i+1,k} + U_{i-1,k}}{h_x^2} + \frac{U_{i,k+1} + U_{i,k-1}}{h_y^2}\right) \\ &+ 2\left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2}\right) U_{i,k} = f_{i,k} \end{aligned}$$

donde los valores de $i = 1, 2, \ldots, M-1$ y $k = 1, 2, \ldots, N-1$ representan los puntos del interior del dominio. Los valores en la frontera ya han sido determinados en la definición del problema.

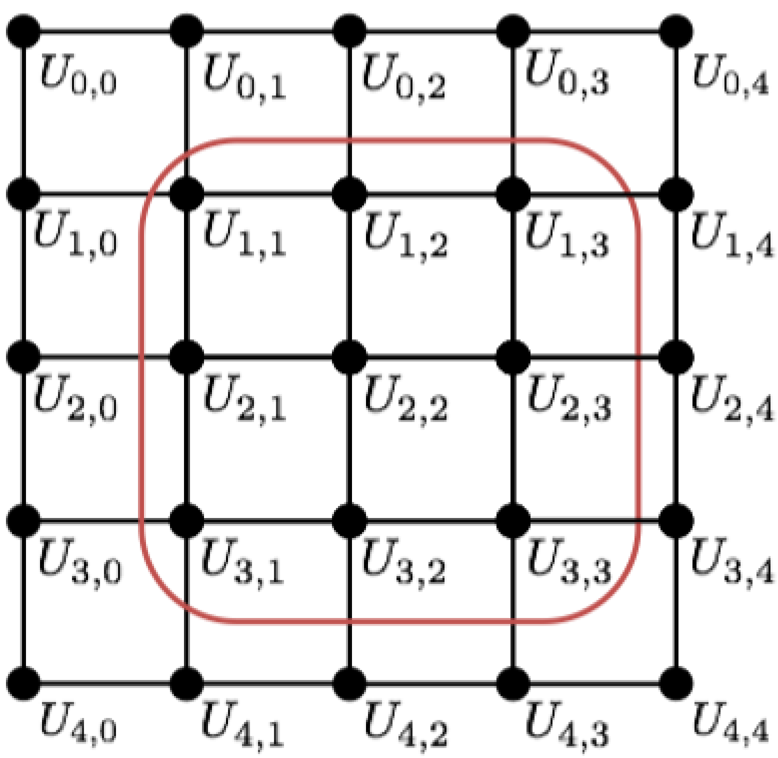
La ecuación anterior requiere un esténcil de 5 puntos como el que ya hemos utilizado con anterioridad



Supongamos por conveniencia que $h_x = h_y = h$, entonces el algoritmo para resolver la ecuación de Poisson se simplifica

$$4U_{i,k} - U_{i-1,k} - U_{i,k-1} - U_{i+1,k} - U_{i,k+1} = h^2 f_{i,k}$$

Resolvamos el caso $M = N = 5$.



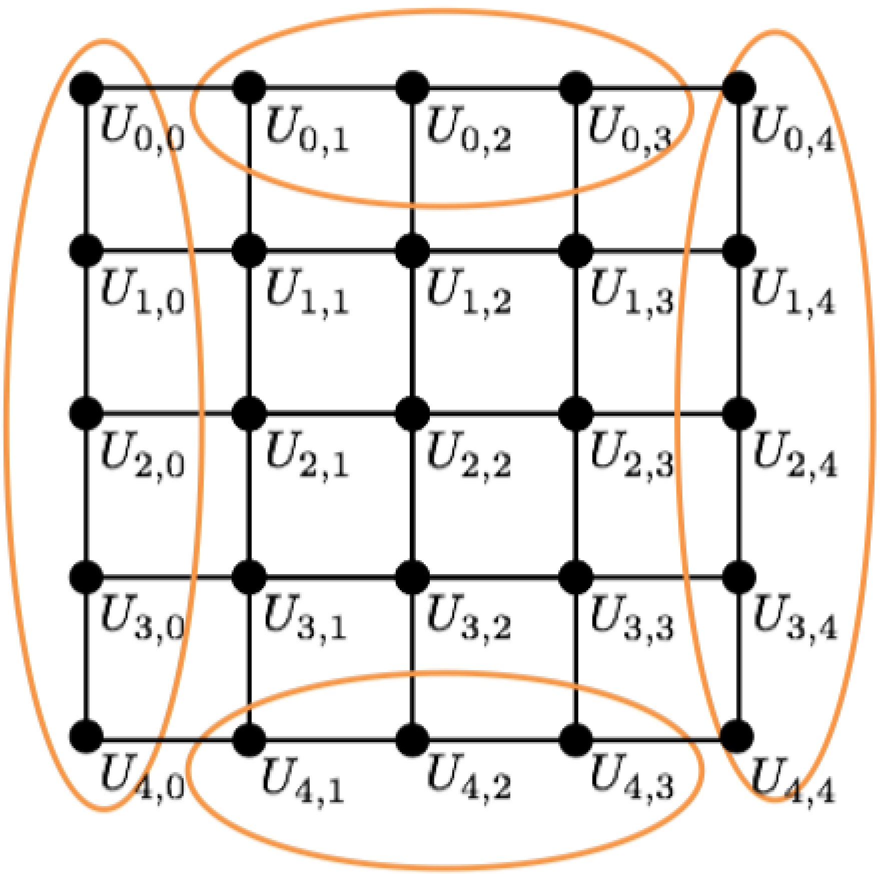
Y definamos las siguientes matrices de los puntos internos

$$\mathbf{U_1} = \begin{bmatrix} U_{1,1} \\ U_{2,1} \\ U_{3,1} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{U_2} = \begin{bmatrix} U_{1,2} \\ U_{2,2} \\ U_{3,2} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{U_3} = \begin{bmatrix} U_{1,3} \\ U_{2,3} \\ U_{3,3} \end{bmatrix};$$

las cuales las integramos en un vector $\mathbf{U}$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{U_1} \\ \mathbf{U_2} \\ \mathbf{U_3} \end{bmatrix}$$

Los puntos de la frontera se encuentran definidos por las condiciones de Dirichlet



Trabajamos sobre el **primer grupo** de valores internos:

$$\begin{aligned} i = 1, k = 1 &: 4U_{1,1} - U_{1,2} - U_{2,1} = h^2 f_{1,1} + U_{1,0} + U_{0,1} \\ i = 2, k = 1 &: 4U_{2,1} - U_{1,1} - U_{3,1} - U_{2,2} = h^2 f_{2,1} + U_{2,0} \\ i = 3, k = 1 &: 4U_{3,1} - U_{2,1} - U_{3,2} = h^2 f_{3,1} + U_{3,0} + U_{4,1} \end{aligned}$$

Matricialmente el sistema anterior se puede escribir como

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,1} \\ U_{2,1} \\ U_{3,1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,2} \\ U_{2,2} \\ U_{3,2} \end{bmatrix} = h^2 \begin{bmatrix} f_{1,1} \\ f_{2,1} \\ f_{3,1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} U_{1,0} + U_{0,1} \\ U_{2,0} \\ U_{3,0} + U_{4,1} \end{bmatrix}$$

De forma similar, trabajando en la **segunda columna interior** se obtiene una ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,1} \\ U_{2,1} \\ U_{3,1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,2} \\ U_{2,2} \\ U_{3,2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,3} \\ U_{2,3} \\ U_{3,3} \end{bmatrix} = h^2$$

Y por último de la **tercera columna interior** se obtiene la ecuación matricial

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,2} \\ U_{2,2} \\ U_{3,2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1,3} \\ U_{2,3} \\ U_{3,3} \end{bmatrix} = h^2 \begin{bmatrix} f_{1,3} \\ f_{2,3} \\ f_{3,3} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} U_{0,3} + U_{1,4} \\ U_{2,4} \\ U_{4,3} + U_{3,4} \end{bmatrix}$$

En resumen, las expresiones anteriores se pueden expresar como

$$-\mathbf{U}_{i-1} + B\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_{i+1} = h^2 \mathbf{f}_i + \mathbf{g}_i$$

donde B es la matriz tridiagonal $(M-2) \times (M-2)$

$$B = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

El vector $\mathbf{g}$ surge de los valores de la frontera superior e inferior

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} g_{0,i} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ g_{M,i} \end{bmatrix}$$

Cuando $i = 1$ ó $i = M - 1$, los valores de las fornteras verticales se aplican

$$\mathbf{U}_0 = \mathbf{g}_0 = \begin{bmatrix} g_{0,1} \\ g_{0,2} \\ \vdots \\ g_{0,M-1} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{U}_M = \mathbf{g}_M = \begin{bmatrix} g_{M,1} \\ g_{M,2} \\ \vdots \\ g_{M,M-1} \end{bmatrix}$$

Finalmente, la ecuación matricial de diferencias se puede compactar como

$$A\mathbf{U} = \mathbf{F}$$

donde la matriz A es una matriz de estructura tridiaginal de $(M-2)^2 \times (M-2)^2$ de la forma

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} B & -I & & & \\ -I & B & -I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -I & B & -I \\ & & & -I & B \end{bmatrix}$$

y la matriz de valores desconocidos $\mathbf{U}$ y valores conocidos $\mathbf{F}$ son de dimensiones $R^{(M-2)^2}$.

La matriz I es la matriz identidad $(M-2) \times (M-2)$ y el vector $\mathbf{F}$ de la derecha de dimensiones $(M-2)^2 \times 1$, está dado por

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} f_1 + (g_0 + g_1)/h^2 \\ f_2 + g_2/h^2 \\ \vdots \\ f_{M-2} + g_{M-2}/h^2 \\ f_{M-1} + (g_{M-1} + g_M)/h^2 \end{bmatrix}$$

Es importante a la hora de crear las matrices A y B sólo guardar los valores distintos de cero (sparse matrix o matriz rala)

Ejemplo resuelto de Condiciones de Dirichlet:

Resuelva la ecuación de Poisson sobre un cuadrado unitario

$$-\nabla^2 u(x,y) = 20\cos(3\pi x)\sin(2\pi y)$$
$$\text{dadas las condiciones}$$
$$u(0,y) = y^2$$
$$u(1,y) = 1$$
$$u(x,0) = x^3$$
$$u(x,1) = 1$$

Desde este enlace se puede acceder a las 3 actividades anteriores para una mejor retroalimentación, cualquier duda, cuestión o pregunta puede ser resuelta hablando con el autor.

Link: https://github.com/Galm12/FisicaComputacional1