

MÈTODES NUMÈRICS II

Equacions diferencials amb derivades parcials

Solució de l'equació de Laplace en dues dimensions sota condicions de contorn

GENÍS LÁINEZ MORENO 1420606
ORIOL TEIXIDÓ GARCIA 1426827

Abstract: En el present *report*, s'exposa i s'estudia la resolució de l'equació diferencial amb derivades parcials, que n'és l'equació de Laplace en dues dimensions, amb unes condicions arbitràries de contorn conegeudes. Aquestes condicions són tals que requereixen mètodes numèrics, ja que ens impedeixen resoldre el problema analíticament. Els mètodes emprats són el *sistema de factorització LU* per a un sistema d'equacions lineals, discretització del pla domini i del pla imatge i discretització de l'equació diferencial entre altres.

*”Nature laughs at the difficulties
of integration”*

PIERRE-SIMON LAPLACE

Índex

1	Introducció	3
2	Mètode numèric i implementació	4
2.1	Implementació	5
3	Resultats i discussió	7
3.1	Estudi dels resultats en funció del paràmetre L	7
3.2	Estudi del temps de càlcul necessari en funció del paràmetre L	8
4	Conclusions	9

1 Introducció

L'equació de Laplace* apareix en nombrosos camps de la física, la matemàtica i l'enginyeria modelitzant fenòmens estacionaris, és a dir, independents del temps. Escrivim l'equació de Laplace en dues dimensions com

$$\Delta f(x, y) = \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = 0 \quad . \quad (1)$$

La solució general per aquest tipus d'equació és coneguda i resulta de la superposició de funcions harmòniques. No obstant això, quan afegim condicions de contorn, la morfologia abrupta que impossem a la funció dificulta la resolució analítica i, en alguns casos, l'impossibilitat.

L'objectiu principal d'aquest *report* és, doncs, observar el comportament d'una funció $f(x, y)$, que representarà un potencial[†], en funció de les coordenades x i y , que ens representaran la posició espacial i unes condicions de contorn tals que facin necessaris mètodes numèrics.

El domini de sortida està confinat en un espai $L \times L$ [‡]. L'esquema visual del nostre problema consisteix en un quadrat de costat a , que presenta un valor A constant de potencial, envoltat per l'espai buit del qual en volem conèixer el valor de la funció $f(x, y)$.

Les unitats tant d' a com de L són unitats de longitud, mentre que les d' A són de potencial.

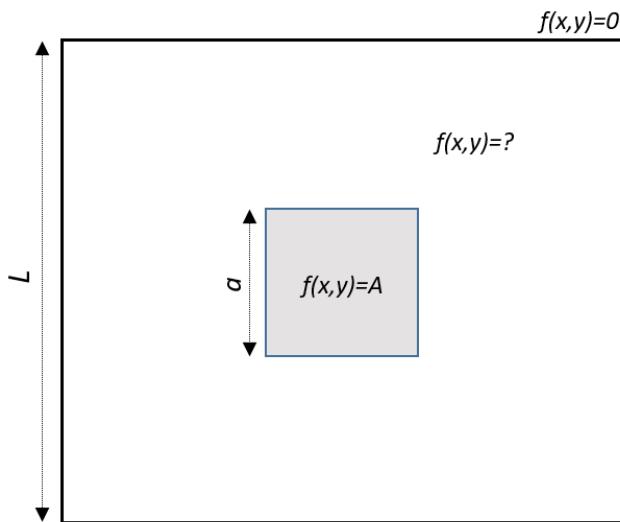


Figura 1: Esquema del problema a resoldre amb les condicions de contorn i paràmetres L i a

També cal dir que hem fixat la longitud del costat del quadrat a 3, i.e., $a = 3$ i el valor de potencial A a 10, ja que canviant arbitràriament el valor d'aquests obtindríem resultats anàlegs en diferents escales. Per tant, les diferents solucions que trobem dependran només del paràmetre L .

*Pierre-Simon Laplace, (1749-1827) matemàtic i físic francès. Ja amb 24 anys se l'anomenava "el Newton de França" per alguns dels seus descobriments

[†]Podria representar altres magnituds conegudes però per simplicitat en el llenguatge i analogia amb aquestes escollim arbitràriament el potencial elèctric

[‡]També l'anomenarem finestra de càcul

2 Mètode numèric i implementació

Discretització de l'equació de Laplace i el domini de sortida

Per a resoldre el problema presentat i utilitzar els mètodes numèrics necessaris urgeix la necessitat de discretitzar l'equació de Laplace,

$$\Delta f(x, y) = \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = 0 \quad . \quad (2)$$

Per a tal procediment, utilitzem la discretització de les derivades coneguda

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x, y) \approx \frac{f(x + \delta x, y) - f(x, y)}{\delta x} \quad , \quad (3)$$

La discretització que utilitzem, com es veu en l'equació anterior, convida a adoptar una notació més còmoda que emprarem d'ara endavant i definim com $f_{i,j} \equiv f(x_0 + i \cdot \delta x, y_0 + j \cdot \delta y)$. Podem reescriure, per tant, l'equació 3 com

$$\frac{\partial}{\partial x} f_{i,j} \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\delta x} \quad , \quad (4)$$

i la segona derivada com

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_{i,j} \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j} - f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\delta x^2} \quad . \quad (5)$$

Donat el procés anàleg per la variable y i agafant arbitràriament la discretització del pla de sortida tal que $\delta y = \delta x$ trobem també l'expressió 4 per aquesta component.

Substituint convenientment $\frac{\partial^2}{\partial x^2} f_{i,j}$ i $\frac{\partial^2}{\partial y^2} f_{i,j}$ a l'equació de Laplace obtenim l'expressió

$$-4f_{i,j} + f_{i+1,j} + f_{i-1,j} + f_{i,j+1} + f_{i,j-1} = 0 \quad . \quad (6)$$

Per cada parell de valors i, j se satisfarà l'equació anterior a excepció d'aquells parells pels quals ja tinguem definit un valor concret que deduirem a partir de les condicions de contorn. Tindrem, doncs, un sistema d' n equacions amb n incògnites (incloent-hi les condicions de contorn com a equacions) on $n \equiv L^2$.

Construcció matricial del sistema d'equacions a resoldre

Si volem escriure tal sistema matricialment de la forma

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b} \quad , \quad (7)$$

necessitarem escriure les nostres incògnites $f_{i,j}$ en forma vectorial doncs faran el paper de \vec{x} a la representació anterior. Per simplicitat establirem la relació d'equivalència

$$x_n = f_{i,j} \quad \text{on} \quad n \equiv j + Li \quad , \quad L \equiv j_{\max} - i_{\min} \quad . \quad (8)$$

Deduïm, a més, de la relació d'equivalència i el sistema plantejat, que el vector \vec{x} tindrà L^2 components i la matriu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_{[L^2, L^2]}$.

Un cop disposem del vector \vec{x} construïm la matriu \mathbf{A} per files (tal que cada fila es correspongui a una de les equacions). Tindrem, doncs,

$$A_{n,m} = \begin{cases} \delta_{n,m} & \text{si per } n \ x_n = f_0 \ (\text{condició de contorn}) \\ A_{n,n} = -4, \quad A_{n,n\pm 1} = 1, \quad A_{n,n\pm L} = 1 & \text{(i la resta d'}A_{n,m} = 0\text{). Otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

sempre que n i m resultin, com és evident, positius.

Per últim, per a construir el nostre sistema d'equacions de la forma $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ ens falta conèixer el vector \vec{b} que podem deduir trivialment a partir de la definició d' \mathbf{A} i \vec{x} i serà

$$b_n = \begin{cases} f_0 & \text{si pel punt } x_n \text{ tenim } x_n = f_n \text{ (condició de contorn)} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

Les condicions de contorn que hem esmentat fins ara $f_{i,j} = f_0$ les podem redefinir de forma explícita de la forma següent:

$$f_0 = \begin{cases} A & \text{si pel punt } f_{i,j} \text{ és dins o adjacent al quadrat interior} \\ 0 & \text{per } f_{i,j} \text{ tal que } |i - i_a|, |j - j_a| >> a \text{ (allunyada del quadrat)} \end{cases} \quad (11)$$

Solució del sistema d'equacions pel mètode de factorització LU

Per aíllar \vec{x} del sistema d'equacions construït en l'apartat anterior podem trobar la matriu \mathbf{A}^{-1} . Aquest exercici però, seria un mètode llarg i difícil pel que fa al càlcul necessari. Per això, utilitzarem el sistema de factorització LU pel qual la matriu A quedarà descomposta en el producte de dues matrius de la forma[§]

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & L_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ L_{n1} & \dots & \dots & L_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & U_{12} & \dots & U_{1n} \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & U_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} = LU \quad (12)$$

Donada la morfologia esglaonada de les matrius L i U serà molt més fàcil trobar les matrius L^{-1} i U^{-1} corresponents i per tant resoldre primer el sistema d'equacions

$$L\vec{y} = \vec{b} \quad \text{pel } \vec{y} \quad \text{i, posteriorment,} \quad U\vec{x} = \vec{y} \quad \text{per } \vec{x}. \quad (13)$$

Trobant doncs les matrius L i U corresponents podrem trobar la solució al problema plantegat. Resolent les equacions que resulten del producte entre L i U i igualant aquest producte a la matriu \mathbf{A} podem veure que podem trobar els elements de les matrius L i U de la següent manera:

$$l_{i,j} = \begin{cases} A_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i,k} u_{k,j} & \text{per } i \geq j \\ 0 & \text{per } i < j \end{cases} \quad u_{i,j} = \begin{cases} \frac{A_{i,j} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k} u_{k,j}}{l_{i,i}} & \text{per } i < j \\ \delta_{ij} & \text{per } i \geq j \end{cases} \quad (14)$$

Ara, doncs, podem trobar la nostra solució \vec{x} amb la fórmula recurrent següent:

$$y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k} b_k}{l_{i,i}} \quad i = 2 \dots n \quad x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{i,k} x_k \quad i = (n-1) \dots 1 \quad (15)$$

2.1 Implementació

Les diferents eines que ens proporciona el programa C++ per fer sumatoris, nombroses iteracions i operacions matemàtiques, entre altres, ens seran de gran ajuda per a tractar i dur a terme els mètodes mencionats i trobar, per tant, solucions satisfactòries al sistema d'equacions plantegat.[¶]

Per tal d'implementar la nostra matriu \mathbf{A} utilitzem la funció **for** que ens permet fer un nombre arbitrari d'iteracions per tal d'introduir la funció 9.

[§]També s'anomena mètode de factorització de LU al que descompon \mathbf{A} en dues matrius L i U tals que L és triangular inferior i U triangular superior però és, per en contra de l'exposat, la matriu L la que té per diagonal termes iguals a 1.

[¶]Per tal de visualitzar la declaració de variables i el programa complet, recomanem veure's al fitxer adjunt

```

int L,L2; cin>>L; L2=L*L;
int A[L2+1][L2]= {{0}}, ai=1, aj=1, r, a=3, n, T=((L-a)*(L+1))/2+1;

for (ai=1; ai<=L2; ai++){
    r=ai%L;
    else {A[ ai ][ ai-1]=1; A[ ai ][ ai]=-4; A[ ai ][ ai+1]=1;
    A[ ai ][ ai+L]=1; A[ ai ][ ai-L]=1; }

for (n=0; n<a; n++){
for (ai=T+n*L; ai<=T+a-1+n*L; ai++){
for (aj=1; aj<=L2; aj++){
    A[ ai ][ aj]=0; A[ ai ][ ai]=1; } }

for (ai=2; ai<=L; ai++){
    A[ ai ][ ai-L]=0; A[ ai+L2-L+1-2 ][ ai+L2-L+1-2+L]=0; }

```

Per a definir el vector \vec{b} procedim de manera similar afegint l'equació 10

```

for (n=0; n<a; n++){
for (ai=T+n*L; ai<=T+a-1+n*L; ai++){
    b[ ai ]=10; }
}

```

Per a les construccions de les matrius L i U a partir del procediment 14 obtenim

```

for (k=1;k<=L2;k++)
{
    u[ k ][ k ]=1;

    for (i=k; i<=L2; i++)
    {
        sum=0;
        for (p=1;p<=k-1;p++)
            sum=l[ i ][ p ]*u[ p ][ k ]+sum;
        l[ i ][ k ]=A[ i ][ k ]-sum; }

    for (j=k+1;j<=L2; j++)
    {
        sum=0;
        for (p=1;p<=k-1;p++)
            sum=l[ k ][ p ]*u[ p ][ j ]+sum;
        u[ k ][ j ]=(A[ k ][ j ]-sum)/l[ k ][ k ]; }
}

```

I, finalment, per a resoldre el sistema i trobar \vec{x} implementem la fórmula 15,

```

for (i=1;i<=L2; i++)
{
    sum=0;
    for (p=1;p<i ;p++)
        sum+=l[ i ][ p ]*z[ p ];
    z[ i ]=(b[ i ]-sum)/l[ i ][ i ]; }

    for (i=L2; i>0; i--)
    {
        sum=0;
        for (p=L2;p>i ;p--)
            sum+=u[ i ][ p ]*x[ p ];
        x[ i ]=(z[ i ]-sum)/u[ i ][ i ]; }

```

3 Resultats i discussió

Un cop explicat el mètode per a la resolució del nostre problema, procedirem a la part d'obtenció de resultats i la seva anàlisi.

3.1 Estudi dels resultats en funció del paràmetre L

Amb el valor del paràmetre L , es podrà fer més gran l'espai on representarem la funció $f(x,y)$. Ja que aquest paràmetre intenta representar l'infinít, és interessant que el valor de L sigui notablement més gran que la longitud del costat del quadrat. Per tant, representarem en la figura 2 els casos on L equival a 7, 11, 15 i 17. També cal dir que no s'ha pogut passar d'un valor de L superior a 17 pel gran nombre de dades que l'ordinador ha de gestionar.

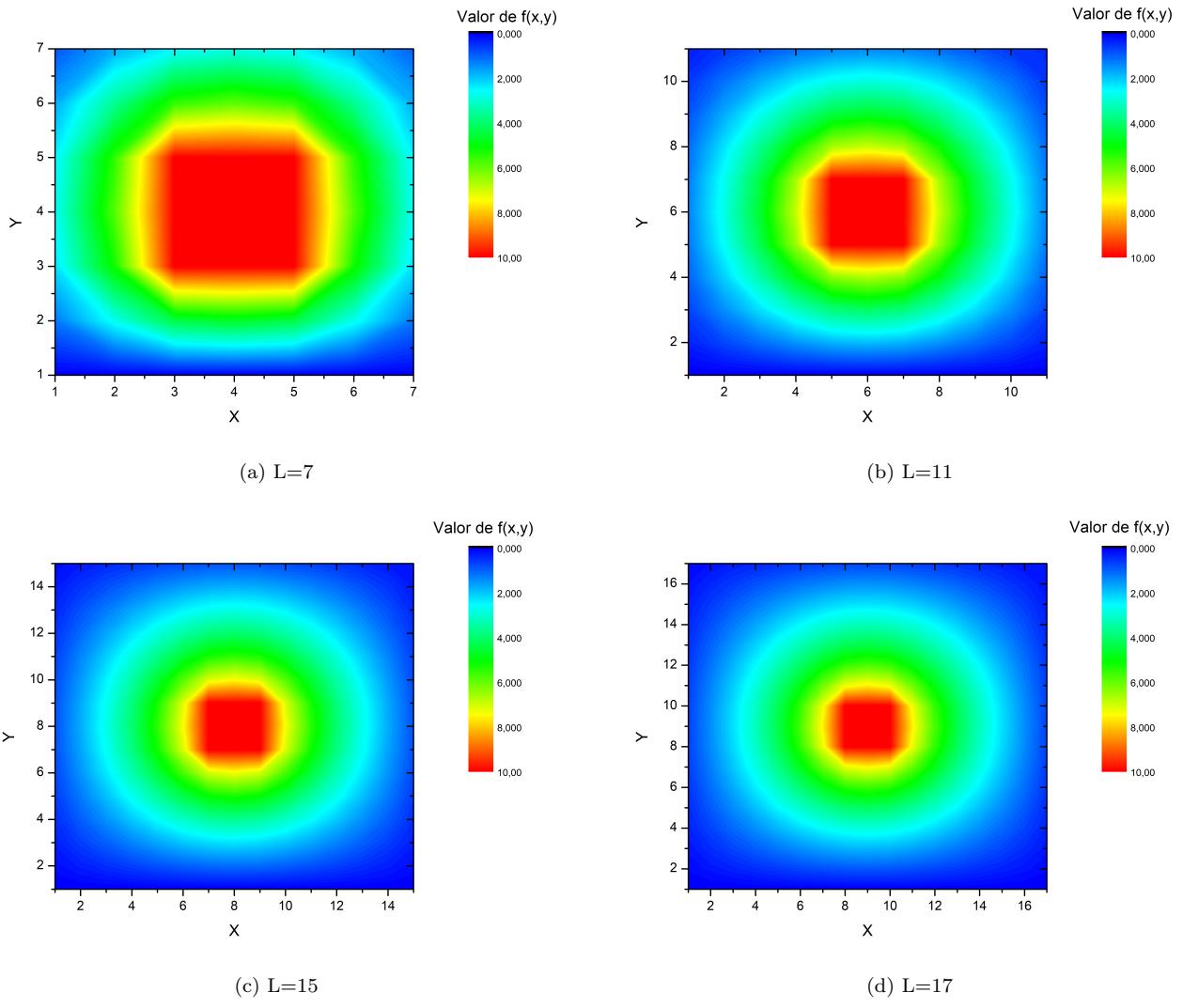


Figura 2: $f(x,y)$ en funció de L

Per una bona anàlisi, cal recordar que en el quadrat de 3×3 central, totes les figures han de presentar

un potencial constant. A més, aquest potencial ha de tenir el valor més alt (ha d'estar en color roig) en l'interior d'aquest. I com es pot veure en les figures, això es compleix.

Altrament, en el contorn de les gràfiques, el valor del potencial ha de ser el més baix (en color blau). Fet que també es compleix.

Considerant encara les coordenades properes al contorn de l'espai, veiem que per una $L=7$, que és comparable a $a=3$, el valor del potencial arriba ben just al potencial 0. Per tant, un valor de L igual a 7, no és un valor prou gran per considerar-lo un infinit.

D'altra banda, s'observa que per a valors de L igual a 11, 15 i 17, el valor del potencial arriba a 0 sense problemes. D'aquesta manera, es veu que a partir d'11, L ja es pot considerar qualitativament com a infinit.

De les gràfiques també s'ha de comentar la gran simetria que hi ha en tot l'espai que corroboren la bona obtenció de resultats doncs es corresponen amb l'esperat.

3.2 Estudi del temps de càlcul necessari en funció del paràmetre L

Com ja s'ha explicat, necessitem valors alts de L . En augmentar en una unitat el valor del paràmetre L , el programa haurà de resoldre $2L + 1$ equacions més i d'aquesta manera patim un augment del temps de compilació.

Per evidenciar aquest fet, es mostra la figura 3 on s'ha representat la mitjana del temps de compilació [¶] en funció del paràmetre L.

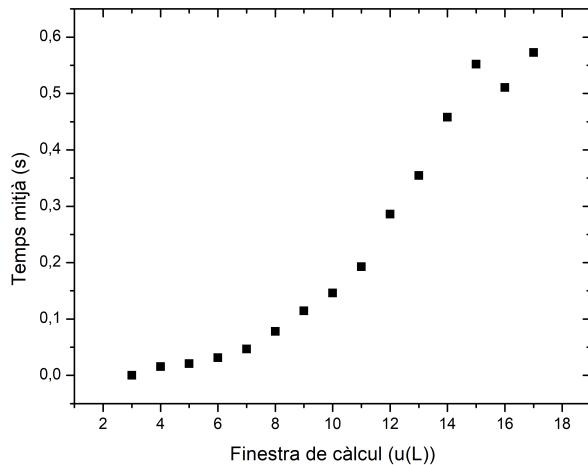


Figura 3: Temps mitjà en funció del paràmetre L

[¶]Per una mateixa L, tarda un valor de temps diferent a compilar. Així doncs, s'ha vist convenient fer-ne la mitjana

En una anàlisi qualitatiu de la figura, sembla que el temps de compilació augmenta exponencialment en augmentar el valor del paràmetre L . Per tant, és convenient no abusar del temps de càlcul atribuint-li un nombre elevat. No obstant això, per la nostra L màxima tarda encara menys d'un segon a efectuar els càlculs. És, doncs, un major problema en el nostre programa, la gestió del gran nombre de dades que no pas el nombre d'operacions que ha de realitzar.

4 Conclusions

Un cop trobades i discutides totes les dades desitjades, podem enumerar les conclusions que se n'ha tret.

- Les subfigures de la figura 2 compleixen que en el quadrat central s'hi observa un valor constant del potencial. A més, aquest valor de potencial és el més alt tal com esperàvem.
- Hem pogut comprovar que el valor de $L=7$ no era un valor prou gran per considerar-se infinit. En canvi, s'ha vist que per a valors de L més grans que 11, ja representen un bon infinit.
- També s'ha vist la simetria que presenten totes les subfigures de la figura 2.
- Com a conclusió també es pot mencionar que l'ordinador no podia manejar tantes dades per a L superior a 17.
- El temps de compilació augmenta exponencialment en funció del valor de L .

Future research

Una de les febleses notables dels mètodes numèrics emprats, sobretot a l'hora de computar-los, és la gestió del gran nombre de dades. Una possible millora per a tal problema seria aprofitar la gran simetria que presenta l'esquema i les condicions de contorn. Si estudiem aquesta, podem veure que resolent el problema per un vuitè de la finestra de càlcul queden ja tots els valors del potencial determinats. No obstant això, aquest procediment requeriria afegir noves condicions de contorn per aquells punts que quedessin al marge d'aquesta vuitena part de la finestra de càlcul.

Bibliografia

- [1]Quotations by Pierre-Simon Laplace <http://www-history.mcs.st-and.ac.uk/Quotations/Laplace.html>
- [2]Carles Navau *Lectures sobre mètodes numèrics II*. UAB
- [3]LU decomposition Method *LU_decomposition.pdf*
- [4]Genís Láinez i Oriol Teixidó *LáinezTeixidó.pdf*, *Equacions Diferencials*