Universidad De Sonora

División de Ciencias Exactas y Naturales
Licenciatura en Física

Física Computacional

"Actividades Finales"

Paul Maximiliano Rivera Medina

Profesor Carlos Lizárraga Celaya

Hermosillo, Sonora 30 de Abril de 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.

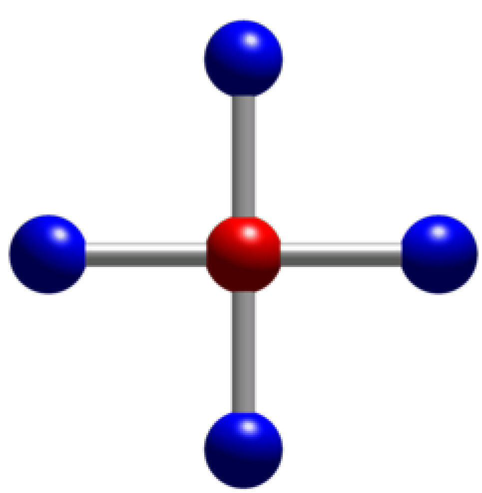
En una dimensión, por ejemplo el caso de una cuerda vibrante, la Ecuación de Onda se simplifica a

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

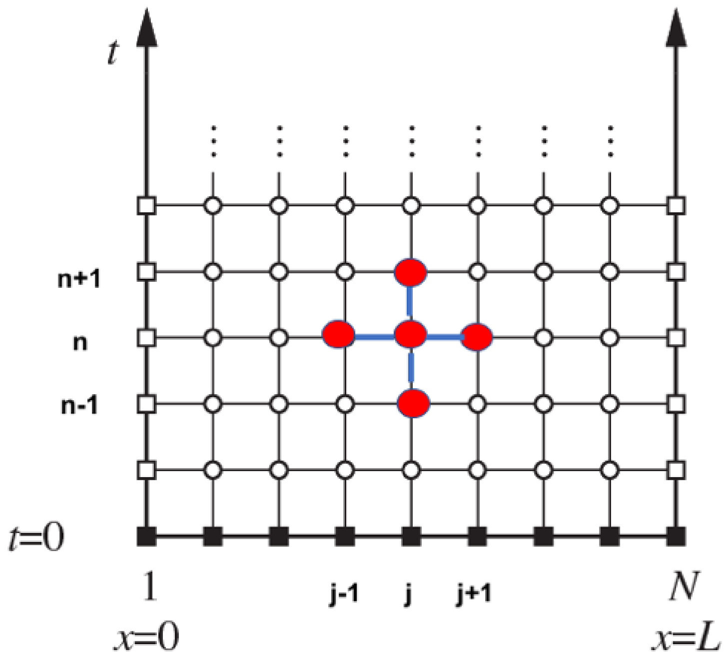
Requerimos definir 4 condiciones: 2 iniciales (derivada de segundo orden en t) y 2 a la frontera (segundo orden en el espacio), para encontrar la solución.

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

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

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

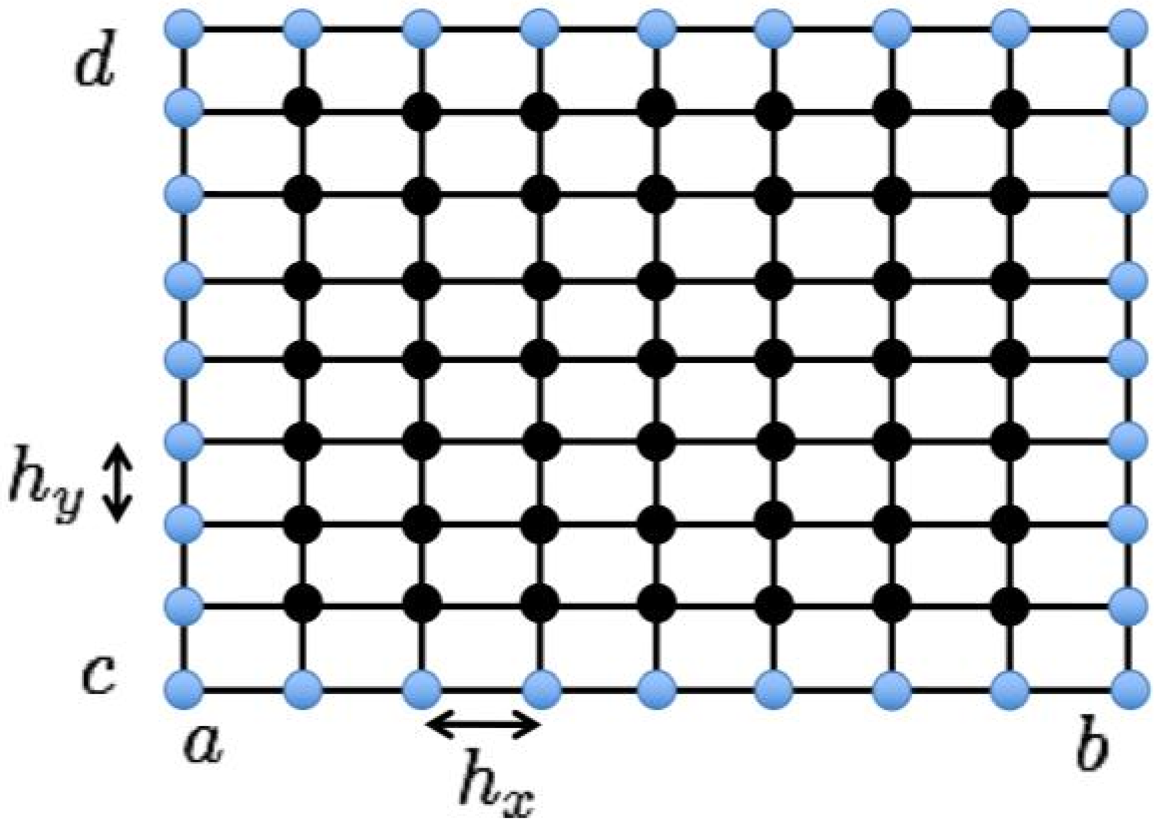
No requerimos una condición inicial, pues no hay dependencia en el tiempo. Sólo requerimos conocer los valores a la frontera.

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

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



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

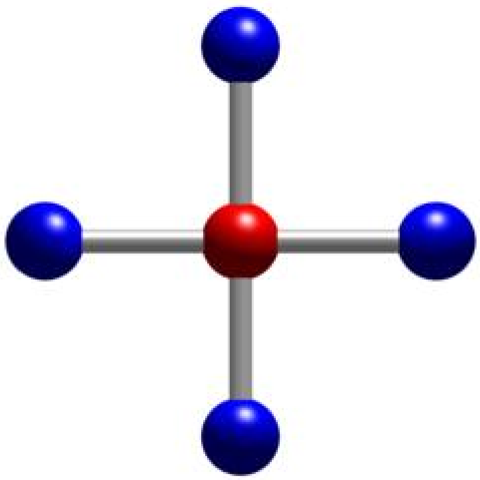
$$-\frac{U_{i+1,k} - 2U_{i,k} + U_{i-1,k}}{h_x^2} - \frac{U_{i,k+1} - 2U_{i,k} + U_{i,k-1}}{h_y^2} = f_{i,k} + \mathcal{O}(h_x^3, h_y^3)$$

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.

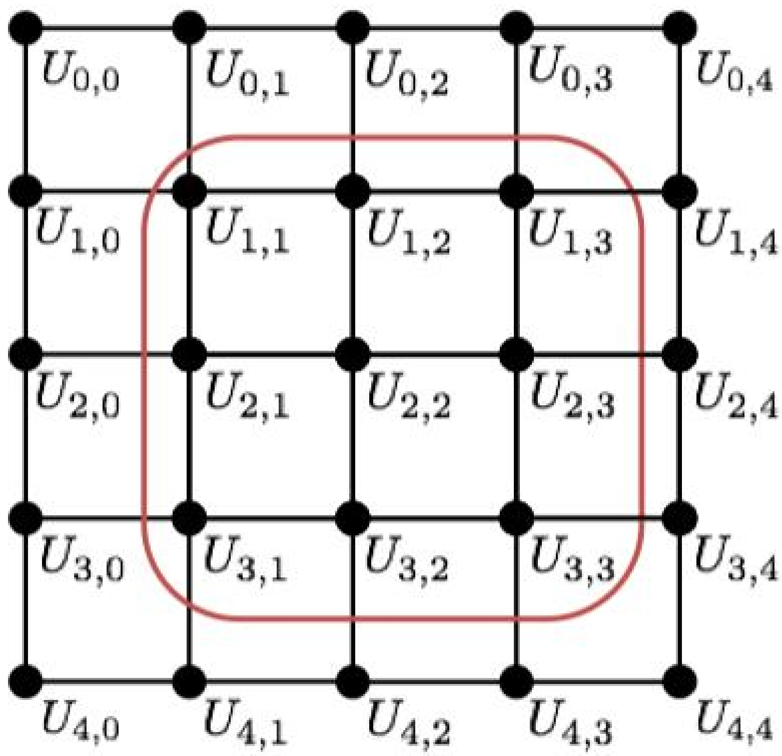
La ecuación anterior requiere un esténcil de 5 puntos como el que ya hemos utilizado con anterioridad



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 $M = N = 5$.



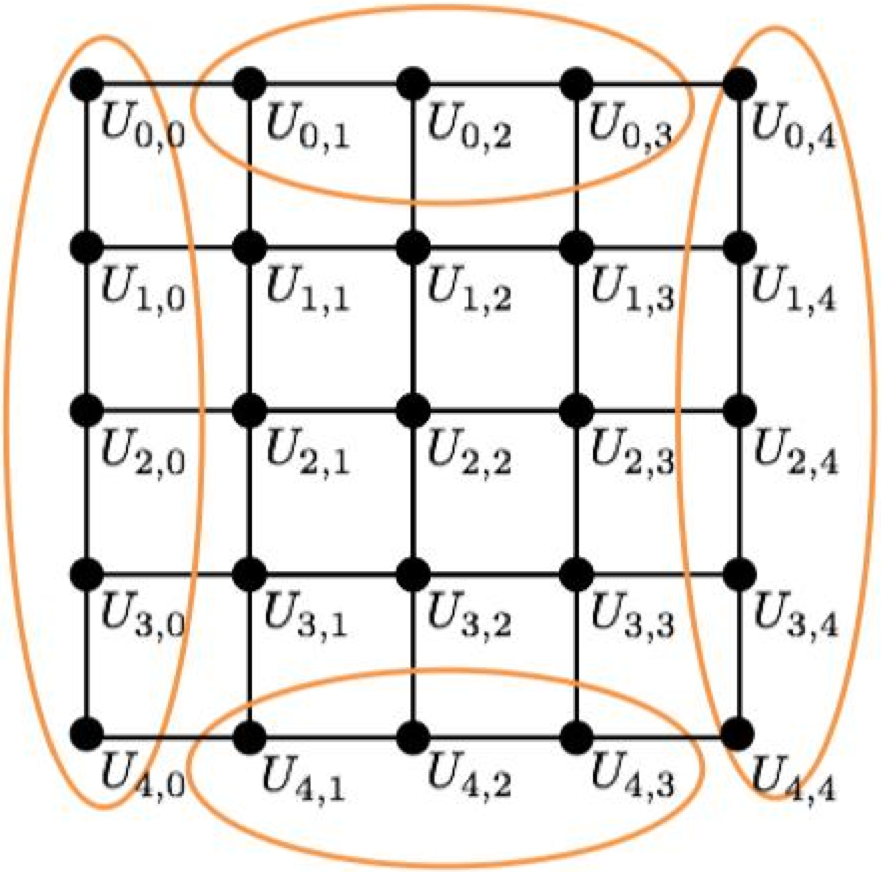
Y definamos las siguientes matrices de los puntos internos

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

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

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

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

Ejemplo resuelto de Condiciones de Dirichlet:

Resuelva la ecuación de Poisson sobre un cuadrado unitario

$$-\nabla^2 u(x,y) = 20\cos(3\pi x)\sin(2\pi y)$$

$$\text{dadas las condiciones}$$

$$\begin{aligned} u(0,y) &= y^2 \\ u(1,y) &= 1 \\ u(x,0) &= x^3 \\ u(x,1) &= 1 \end{aligned}$$

Para poder aceder las actividades en las cuales se trataron estos temas, para asi un mejor entendimiento

enlace: https://github.com/PaulMRivera/Computational_physics