Universidad de Sonora

Departamento de Física

Reporte PDE

Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales Parciales

Pacheco Rodriguez Sharon Estivalez

Expediente:

219221708

5 de mayo de 2021

Índice

1. Introducción

En esta reporte se mostrará y profundizará la información vista en las actividades 10, 11 y 12 del curso de física computacional, las cuales tuvieron como tema principal la resolución numérica de Ecuaciones Diferenciales Parciales.

Para poder tocar los temas siguientes, primero debemos saber que son las Ecuaciones Diferenciales Parciales. Una breve definición de estas es que se les llama así a las ecuaciones donde se encuentran derivadas parciales de una función desconocida con al menos dos variables independientes.

Las ecuaciones diferenciales parciales lineales de segundo orden pueden expresarse de la siguiente forma:

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D = 0$$

2. Las tres grandes familias de Ecuaciones Diferenciales Parciales: Parabólica, Hiperbólicas y Elípticas

2.1. Parabólica

A estas ecuaciones se les clasifica en parabólicas cuando el determinante es igual a cero, es decir, cuando $B^2 - 4AC = 0$.

Un ejemplo es la Ecuación del Calor en un medio unidimensional x:

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

2.2. Hiperbólicas

A estas ecuaciones se les clasifica como hiperbólicas cuando el determinante es mayor a cero, es decir, cuando $B^2 - 4AC > 0$.

Un ejemplo es la Ecuación de Onda (en una dimensión):

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

2.3. Elípticas

A estas ecuaciones se les clasifica como elípticas cuando el determinante es menor a cero, es decir, cuando $B^2 - 4AC < 0$.

Un ejemplo es la ecuación de Poisson.

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

3. Los tres tipos de Condiciones a la Frontera: Dirichlet, Neumann y Robin (mixto)

Las condiciones de frontera son ciertas restricciones que debe cumplir la ecuación (solución) a la hora de evaluarla en dichos puntos de frontera. Y estas nos proporcionan información para lograr encontrar la solución.

3.1. Condición de frontera de Dirichlet

Este tipo de condición de frontera es donde se especifica los valores de solución que se toma sobre la frontera del dominio.

Para las ecuaciones diferenciales ordinarias, sobre el intervalo [a,b], las condiciones de frontera de Dirichlet tienen la forma:

$$y(a) = \alpha_1, y(b) = \beta$$

donde α y β son números.

Mientras que, para las ecuaciones diferenciales parciales, tienen la forma:

$$y(x) = f(x) \forall x \in \partial\Omega$$

Entre sus aplicaciones están:

- En ingeniería mecánica y civil (curva elástica).
- En termodinámica, donde una superficie tiene una temperatura fija.

- En electrostática, donde un nodo de un circuito tiene un voltaje fijo o constante.

3.2. Condición de frontera de Neumann

Este tipo de condición de frontera es donde se especifican los valores de la derivada de una solución sobre la frontera.

Para las ecuaciones diferenciales ordinarias, sobre el intervalo [a,b], las condiciones de frontera de Neumann tienen la forma:

$$\frac{dy}{dx}(a) = \alpha, \frac{dy}{dx}(b) = \beta$$

donde α y β son números.

Mientras que, para las ecuaciones diferenciales parciales, tienen la forma:

$$\frac{\partial y}{\partial n} = f(x) \forall x \in \partial\Omega$$

Donde n es la normal a la frontera $\partial\Omega$ y f es una función escalar.

3.3. Condición de frontera de Robin (mixto)

Este tipo de condición de frontera es donde se especifica una combinación lineal de los valores de una función y y los valores de su derivada sobre la frontera del dominio.

Son una combinación de las condiciones de frontera anteriores.

Si Ω es el dominio y $\partial\Omega$ es su frontera, la condición estaría dada por:

$$au + b\frac{\partial u}{\partial n} = g$$

Sobre $\partial\Omega$.

Entre sus aplicaciones está resolver problemas de Sturm-Liouville.

4. Descripción del Método de Diferencias Finitas

El Método de Diferencias Finitas utiliza Series de Taylor para aproximar derivadas. Y es utilizado para calcular numéricamente las soluciones a las ecuaciones diferenciales usando ecuaciones diferenciales finitas para aproximar 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, utilizando 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.

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

5. Solución de la Ecuación del Calor: Descripción del algoritmo de solución y condiciones de solución

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

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

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

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

Actividad 10

6. Solución de la Ecuación de Onda: Descripción del algoritmo de solución y condiciones de solución

Solución de la Ecuación de Onda en una dimensión por el Método de Diferencias Finitas.

Podemos comenzar aproximando las segundas derivadas por diferencias finitas centradas de segundo orden.

Si h es el incremento en la dirección $x = \Delta x$ y $k = \Delta t$ es el incremento en el tiempo. Entonces en un punto de la malla discreta (x, t) tendremos

$$\frac{u(x, t+k) - 2u(x,t) + u(x, t-k)}{k^2} = c^2 \frac{u(x+h, t) - 2u(x,t) + u(x-h, t)}{h^2}$$

La ecuación anterior define un esténcil computacional de 5 puntos.

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 uniformemente por $h = \Delta x$ y $k = \Delta t$.

Para iniciar 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 onda 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 esténcil de 5 puntos.

Actividad 11

7. Solución de la Ecuación de Poisson: Descripción del algoritmo de solución y condiciones de solución

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 están 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

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial x^2} &= \frac{u(x_{i+1}, y_k) - 2u(x_i, y_k) + u(x_{i-1}, y_k)}{h_x^2} + \mathcal{O}(\langle^{\ni}_{\S}) \\
\frac{\partial^2 u(x_i, y_k)}{\partial y^2} &= \frac{u(x_i, y_{k+1}) - 2u(x_i, y_k) + u(x_i, y_{k-1}}{h_y^2} + \mathcal{O}(\langle^{\ni}_{\dagger})
\end{aligned}
$$

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

$$
-\frac{U_{i+1,k} - 2U_{i,k} + U_{i-1,k}}{h_x^2} - \frac{U_{i,k+1} - 2U_{i,k} + U_{i,k-1}}{h_y^2} = f_{i,k} + \mathcal{O}(\langle^{\ni}_{\S}, \langle^{\ni}_{\dagger})
$$

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:

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

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

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

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 fronteras 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 tridiagonal 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

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

Actividad 12

8. Resumen y conclusiones

A lo largo de las tres actividades realizadas (10, 11 y 12) tuvimos una introducción en la resolución numérica de Ecuaciones Diferenciales Parciales. Primeramente vimos el Método de Diferencias Finitas, con el cual ya habíamos trabajado anteriormente en análisis numérico. En cada una de las actividades elaboradas conocimos una de las tres grandes familias de PDE, así como se nos presentó el procedimiento para resolver las ecuaciones de Calor, Onda y Poisson. También conocimos las condiciones de frontera de Dirichlet y Neumann principalmente.

En este reporte pude comprender de mejor manera los temas que vimos, que en ocasiones no les dediqué tanto tiempo a estudiarlos, sino a elaborar los códigos para las actividades, así que me fue de gran utilidad tener la información sintetizada en un lugar.

9. Bibliografía empleada

https://en.wikipedia.org/wiki/Partial_differential_equation

https://www.ugr.es/~prodelas/ftp/ETSICCP/Resoluci%F3nNum%E9ricaEDPs.pdf

https://en.wikipedia.org/wiki/Parabolic_partial_differential_equation

https://en.wikipedia.org/wiki/Hyperbolic_partial_differential_equation

https://en.wikipedia.org/wiki/Elliptic_partial_differential_equation

https://en.wikipedia.org/wiki/Heat_equation

https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_equation

https://en.wikipedia.org/wiki/Poisson%27s_equation

https://en.wikipedia.org/wiki/Dirichlet_boundary_condition

https://en.wikipedia.org/wiki/Neumann_boundary_condition

https://en.wikipedia.org/wiki/Robin_boundary_condition

https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_method

https://github.com/carloslizarragac/FisicaComputacional1/blob/master/Actividad10.ipynb

https://github.com/carloslizarragac/FisicaComputacional1/blob/master/Actividad11.ipynb

https://github.com/carloslizarragac/FisicaComputacional1/blob/master/Actividad12.ipynb