

# Soluzione numerica delle equazioni alle derivate parziali (PDE)

Laboratorio di Metodi Computazionali e statistici (2022/23)

Fabrizio Parodi

Dipartimento di Fisica

October 17, 2022

# Equazioni differenziali alle derivate parziali

- Quantità come temperatura, pressione, campi em, etc.. variano in maniera continua nello spazio e nel tempo.
- Chiamiamo  $U(x, y, z, t)$  un campo generico. Al variare del tempo il valore del campo  $U(x, y, z, t)$  in una posizione influenza il campo nei punti vicini. Questo vuol dire che le equazioni dinamiche che descrivono la dipendenza di  $U$  dalle quattro variabili deve essere scritta in termini di derivate parziali (Partial Derivative Equation).
- Avendo definito

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \equiv U_{xx} \quad \frac{\partial U}{\partial x} \equiv U_x$$

l'equazione più generale è (nelle variabili  $x$  e  $y$ ):

$$AU_{xx} + 2BU_{xy} + CU_{yy} + DU_x + EU_y = F$$

# Equazioni differenziali alle derivate parziali

Equazione generale

$$AU_{xx} + 2BU_{xy} + CU_{yy} + DU_x + EU_y = F$$

<i>Ellittiche</i>	<i>Paraboliche</i>	<i>Iperboliche</i>
$d = B^2 - AC < 0$	$d = B^2 - AC = 0$	$d = B^2 - AC > 0$
Poisson	Calore/Schrodinger	Onde
$\nabla^2 U = U_{xx} + U_{yy} = f(x, y)$	$U_{xx} = \alpha U_t$	$U_{xx} - U_{tt} = 0$
	$-U_{xx} + VU = U_t$	

# Equazioni differenziali alle derivate parziali (più variabili)

- Forma generale

$$\mathcal{L}u = \sum_i \sum_j a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \text{termini di ordine minore} = 0$$

- Ellittiche: tutti gli autovalori sono positivi o negativi
- Paraboliche: tutti gli autovalori sono positivi o negativi, salvo uno che è nullo
- Iperboliche: c'è un solo autovalore negativo (o positivo)

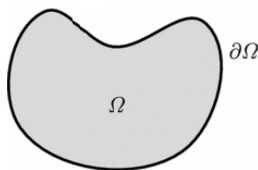
# Condizioni al contorno

Differenze tra ODE e PDE:

- Molte variabili indipendenti correlate in maniera non banale, non si può applicare un metodo per ogni problema (vedi RK per ODE)
- Le condizioni al contorno sono più complesse (rispetto a ODE)

Condizioni al contorno:

- Dirichlet: le condizioni sono specificate come valore della soluzione sul contorno del dominio.
- Neumann: le condizioni sono specificate come valore della derivata normale della soluzione sul contorno del dominio.
- Cauchy: le condizioni sia sulla soluzione che sulla sua derivata normale.



# Equazione di Laplace: soluzioni con serie di funzioni

Equazione di Laplace:

$$\nabla^2 V = V_{xx} + V_{yy} = 0$$

Assumo  $V(x, y) = A(x)B(y)$

$$B(y)A_{xx}(x) + A(x)B_{yy}(y) = 0$$

Divido per  $V$

$$\frac{A_{xx}(x)}{A(x)} + \frac{B_{yy}(y)}{B(y)} = 0$$

che è risolta dal sistema di equazioni

$$\begin{cases} A_{xx}(x) = -k^2 \\ B_{yy}(y) = k^2 \end{cases}$$

e quindi

$$A(x) = A_0 \cos(kx + \phi)$$

$$B(y) = B_0 e^{-ky}$$

La soluzione generale è data dalla sovrapposizione di infinite funzioni con vettore d'onda  $k_i$  eventualmente vincolato dalla condizioni al contorno

$$V(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \cos(k_i x + \phi_i) e^{-k_i y}$$

# Equazione di Laplace: soluzioni usando serie di funzioni

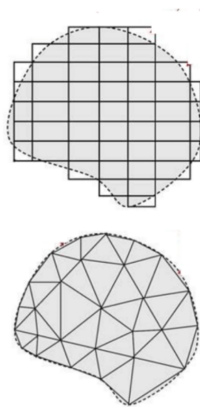
- Approccio non ottimale:
  - Le somme sono esatte se infinite, spesso la convergenza non è veloce
  - La somma troncata può essere imprecisa o instabile.
- Spesso per ottenere funzioni “liscie” occorre sommare un numero molto alto di termini, che spesso richiedono più tempo di soluzioni iterative

# Metodo alle differenze finite

L'approccio numerico alle PDE è basato su diversi tipi di rappresentazioni o discretizzazioni.

Si può discretizzare per:

- **differenze finite**, cioè su griglie con direzioni di solito mutuamente ortogonali, con spacing opportuni nelle diverse dimensioni (è quel che faremo noi, usando di norma griglie quadrate in 2D con spacing uguali);
- **elementi finiti**, cioè suddividendo il dominio in elementi di forma e numero che variano localmente adattandosi al tipo di problema e di dominio.





# Metodo alle differenze finite

- Supponiamo che il problema sia trovare  $V(x,y)$ , noto  $\rho(x,y)$  su un dominio rettangolare con condizioni note su  $V$  al contorno (Dirichlet).

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

- Divido il rettangolo in un reticolo con spaziatura  $\Delta$
- Definisco una griglia di  $(n_x + 1) \times (n_y + 1)$  punti (di ampiezza  $n_x\Delta$  e  $n_y\Delta$ )<sup>1</sup>:

$$x_i = x_0 + (i - 1)\Delta \quad y_j = y_0 + (j - 1)\Delta$$

$$V(i,j) \equiv V(x_i, y_j) \quad V(i \pm 1, j) \equiv V(x_i \pm \Delta, y_j) \quad V(i, j \pm 1) \equiv V(x_i, y_j \pm \Delta)$$

- Allora, riprendendo la definizione di derivata seconda:

$$V_{xx}(i,j) = \frac{V(i+1,j) + V(i-1,j) - 2V(i,j)}{\Delta^2}$$

$$V_{yy}(i,j) = \frac{V(i,j+1) + V(i,j-1) - 2V(i,j)}{\Delta^2}$$

$$V_{xx}(i,j) + V_{yy}(i,j) = -\frac{\rho(i,j)}{\varepsilon_0}$$

<sup>1</sup>Gli indici, per coerenza con il software che useremo (Matlab), vanno da 1 a n.

# Metodo alle differenze finite

- Raccogliendo i termini

$$V(i, j) = \frac{1}{4} [V(i+1, j) + V(i-1, j) + V(i, j+1) + V(i, j-1)] + \frac{1}{4\epsilon_0} \rho(i, j) \Delta^2$$

- Potenziale in un punto come media su primi vicini
- Non è la soluzione ma un relazione iterativa. Si parte da una stima iniziale e si itera finchè il potenziale non cambia più
- Si dice che la stima iniziale si è “rilassata” nella soluzione
- È facile verificare che in 3D si ottiene:

$$V(i, j, k) = \frac{1}{6} [V(i+1, j, k) + V(i-1, j, k) + \\ V(i, j+1, k) + V(i, j-1, k) + \\ V(i, j, k+1) + V(i, j, k-1)] + \frac{1}{6\epsilon_0} \rho(i, j, k) \Delta^2$$

# Metodo alle differenze finite

- Converge ? Questo non è un vero problema..
- Con che velocità ? Su questo aspetto si può lavorare..
- Il problema è partito dall'espressione del  $\nabla$  in coordinate cartesiane. In caso di soluzione di problemi a simmetria sferica o cilindrica è opportuno scrivere prima il Laplaciano nelle rispettive coordinate.

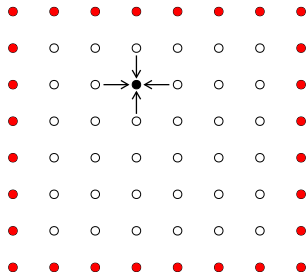
# Rilassamento

La soluzione può essere raggiunta in vari modi

- Metodo di Jacobi: il potenziale non è modificato finchè non si fa un giro completo su tutta la mappa

$$V(i,j)^{new} = \frac{1}{4} \left[ V(i+1,j)^{old} + V(i-1,j)^{old} + V(i,j+1)^{old} + V(i,j-1)^{old} \right] + \frac{1}{4\epsilon_0} \rho(i,j) \Delta^2$$

•  $\partial\Omega$     ○ n    • n+1

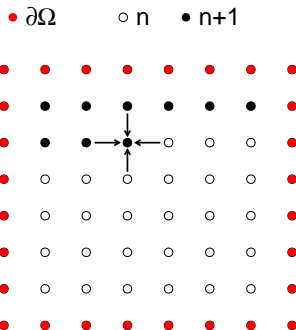


# Rilassamento

La soluzione può essere raggiunta in vari modi

- Metodo di Gauss-Seidel: il nuovo valore del potenziale è utilizzato non appena calcolato. Ad esempio partendo da sinistra in alto

$$V(i,j)^{new} = \frac{1}{4} \left[ V(i+1,j)^{old} + V(i-1,j)^{new} + V(i,j+1)^{old} + V(i,j-1)^{new} \right] + \frac{1}{4\epsilon_0} \rho(i,j) \Delta^2$$



Svantaggio: le condizioni iniziali non sono più trattate in maniera simmetrica.

# Rilassamento

La soluzione può essere raggiunta in vari modi

- Sopra-rilassamento iterativo (SOR). Si esprime il nuovo valor del campo in termini di residuo.

$$V^{new}(i,j) = V^{old}(i,j) + r(i,j)$$

$$r(i,j) = \frac{1}{4} \left[ V(i+1,j)^{old} + V(i-1,j)^{new} + V(i,j+1)^{old} + V(i,j-1)^{new} \right] + \frac{1}{4\varepsilon_0} \rho(i,j) \Delta^2 - V^{old}(i,j)$$

Convergenze più rapida può essere ottenuta imponendo

$$V^{new}(i,j) = V^{old}(i,j) + \omega r(i,j)$$

Provare vari  $\omega$  (normalmente  $\omega \in [1, 2]$  funziona bene)

# Criterio di convergenza

- Siccome non conosciamo la soluzione dobbiamo darci un criterio di convergenza.
- Possiamo calcolare la differenza tra un iterazione e l'altra

$$\Delta_{ij} = |V_{ij}^{n+1} - V_{ij}^n|$$

e chiedere che tutti i valori della matrice  $\Delta$  siano all'interno di una certa tolleranza.

- È conveniente chiedere che la tolleranza sia espressa in termini assoluti e relativi

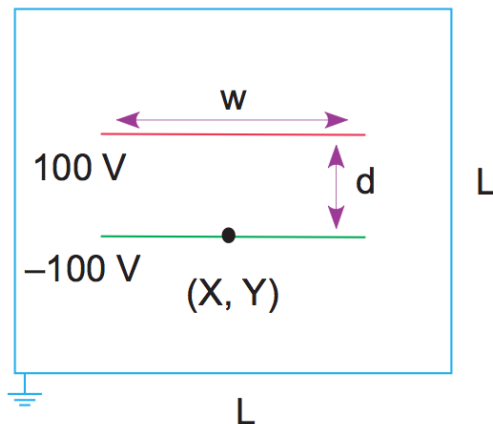
$$\Delta_{ij} < \varepsilon_a + |V_{ij}^n| \varepsilon_r$$

dove  $\varepsilon_a$  e  $\varepsilon_r$  rappresentano l'errore assoluto e relativo.

- In questo modo, ponendo ad esempio  $\varepsilon_r = \varepsilon_a = 0.01$  si impone errore assoluto di 0.01 dove  $V_{ij}$  è zero e un errore relativo leggermente maggiore di 0.01 per valore di  $V_{ij} > 10$ .

# Differenze finite: elettrostatica

Prima applicazione: il condensatore 2D





# Propagazione del calore

- Come si propaga il calore o, se volete come cambia con il tempo il campo di temperature ?

$$J = -K \nabla T$$

$$- \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla J \quad \text{equazione di continuità} \quad dU = CdT$$

$$- C \frac{\partial T}{\partial t} = -K \nabla^2 T$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{K}{C} \nabla^2 T$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T$$

# Propagazione del calore

- Considero il caso di un impulso di calore al centro di una barra conduttrice con estremi  $(x_1, x_2)$

$$T(x, t = 0) = \delta(x - x_0) \quad T = 0 \text{ a } x_2 \text{ e } x_1$$

- La soluzione (nel caso  $x_1 = -\infty, x_2 = \infty$ ) è

$$T(x, t) = \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \right] \quad \sigma = \sqrt{2\kappa t}$$

- La “spike” si allarga con il tempo.
- Attenzione:
  - la soluzione si riferisce ad un picco di temperatura con integrale 1, con temperatura 0 agli estremi
  - se le condizioni sono diverse bisogna modificare la normalizzazione e/o la temperatura minima

# Propagazione del calore: soluzione con serie di funzioni

$$\partial_t T = \kappa \partial_{xx} T$$

Assumo  $T(x, t) = T_1(x) T_2(t)$

$$\frac{\partial_t T_2(t)}{T_2(t)} = \kappa \frac{\partial_{xx} T_1(x)}{T_1(x)}$$

che è risolta dal sistema di equazioni

$$\begin{cases} \partial_{xx} T_1(x) = -k^2 \\ \partial_t T_2(t) = -\kappa k^2 \end{cases}$$

e quindi

$$T_1(x) = T_1^0 \cos(kt + \phi)$$

$$T_2(t) = T_2^0 e^{-\kappa k^2 t}$$

La soluzione generale è data dalla sovrapposizione di infinite funzioni con vettore d'onda  $k_i$  eventualmente vincolato dalla condizioni al contorno

$$T(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} C_i \cos(k_i x + \phi_i) e^{-\kappa k_i^2 t}$$

# Propagazione del calore

- Potremmo impostare lo stesso metodo già usato per il potenziale. Ma in questo caso il sistema dell'aggiornamento del campo non funziona.. Il campo è noto solo per  $t < t_{\text{presente}}$
- Discretizzazione

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \simeq \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \simeq \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t} = \kappa \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \simeq \kappa \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2}$$

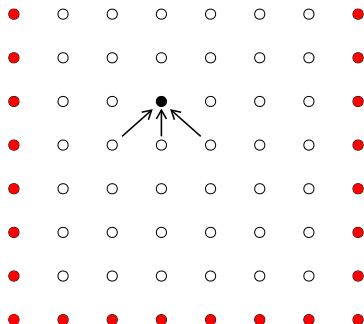
$$\begin{aligned} T(m, n + 1) &= T(m, n) + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2} [T(m + 1, n) + T(m - 1, n) - 2T(m, n)] \\ &= T(m, n) + \eta [T(m + 1, n) + T(m - 1, n) - 2T(m, n)] \end{aligned}$$

- Metodo esplicito: fornisce una soluzione in termini di valori della temperatura a istanti precedenti.

# Schema di soluzione

Metodo esplicito

•  $\partial\Omega$       ○  $n$       •  $n+1$



$$T(m, n+1) = T(m, n) + \eta [T(m+1, n) + T(m-1, n) - 2T(m, n)]$$

# Propagazione calore lungo una sbarra: condizioni di Cauchy

- La sbarra è isolata
- L'impulso di temperatura è applicato ad un'estremità
- La temperatura è campionata in uno/due punti lungo la sbarra. Misura:  $T(x, t)$  con  $x$  fissato.

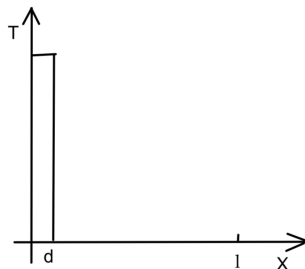
Condizioni:

$$T(x, t_0)$$

$$T(L, t) = T_0 \quad \forall t$$

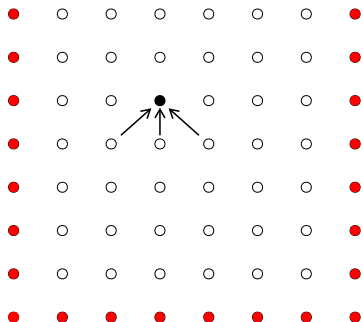
$$T_x(0, t) = 0 \quad \forall t$$

- La temperatura è campionata in uno/due punti lungo la sbarra. Misura:  $T(x, t)$  con  $x$  fissato.



# Come impostare condizioni di Cauchy ( $T(L, t)$ e $T_x(0, t)$ )

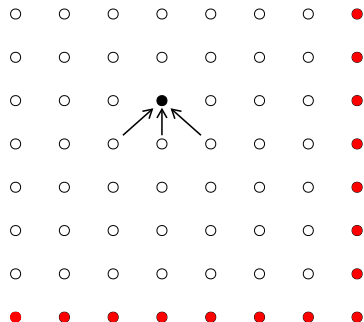
•  $\partial\Omega$       ○  $n$       •  $n+1$



•  $T(0, t)$  (cioè  $T_{1,n}$ ) non è nota

# Come impostare condizioni di Cauchy ( $T(L, t)$ e $T_x(0, t)$ )

•  $\partial\Omega$       ○  $n$       •  $n+1$



• Ma  $T_x(0, t) = 0$

$$T_x(0, t) = \frac{T(\Delta x, t) - T(-\Delta x, t)}{2\Delta x}$$

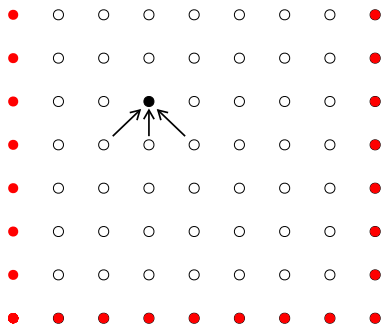
$$T(\Delta x, t) = T(-\Delta x, t) \rightarrow T_{2,n} = T_{1,n}$$

$T_{0,n}$  non esiste  
ma lo posso creare !



# Come impostare condizioni di Cauchy ( $T(L, t)$ e $T_x(0, t)$ )

•  $\partial\Omega$       ○  $n$       •  $n+1$



Quindi creo una nuova colonna a sinistra per  $x = -\Delta x$  (che viene ricalcolata ad ogni turno sulla base di  $x = \Delta x$ ) e la uso per iterare il metodo di risoluzione scelto.

# Criterio di stabilità di Von Neumann

Nella soluzione numerica delle equazioni alle derivate parziali è importante assicurarsi che la soluzione non diverga (a seguito dell'evoluzione temporale)

- Una qualsiasi soluzione può, a tempo fissato, essere sviluppata secondo Fourier:

$$T(m, n) = \sum_i \alpha(k_i) e^{ik_i m \Delta x}$$

- Inoltre, poiché le equazioni sono lineari, si ha, nel tempo:

$$T(m, n+1) = \xi T(m, n)$$

quindi, partendo da  $n=1$ , il fattore di amplificazione sarà,  $\xi^n$ . Lo sviluppo precedente si può quindi scrivere:

$$T(m, n) = \sum_i \xi^n(k_i) e^{ik_i m \Delta x}$$

- Criterio di Von Neumann: per verificare che la soluzione sia stabile basta verificare che lo sia una base generica con  $k$  qualsiasi

$$T^{test}(m, n) = \xi(k)^n e^{ikm \Delta x}$$

imponendo che  $\xi(k)^n$  non diverga cioè che  $|\xi(k)| < 1$ .

- Si noti che questo è sempre vero per la soluzione analitica. La soluzione numerica, pur avendo la stessa forma, può deviare e divergere, per problemi di approssimazione numerica, in funzione dei campionamenti  $\Delta x$  o  $\Delta t$  scelti.