



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Matemàtiques
i Informàtica

GRAU DE MATEMÀTIQUES

Treball final de grau

SOBRE L'EQUACIÓ DE LA
CALOR

Autor: Maria Cidoncha Torvisco

Director: Dr. Àngel Jorba Monte
Realitzat a: Departament de
matemàtiques i informàtica

Barcelona, 24 de gener de 2023

Abstract

The heat equation, developed during the XIX century, is one of the most important and well known partial derivative equations. In this final degree work you will find firstly the derivation of this formula, then a second part where you will find all the most relevant properties and results, and finally the treatment of the equation with numerical methods, which have a relevant role in the EDPs, since we will not always be able to find the solution of these, but we can find an approximation using the numerical methods.

Resum

L'equació de la calor, començada a estudiar durant el segle XIX, és una de les equacions en derivades parcials més important i conegudes. En aquest treball de final de grau trobareu primerament la deducció d'aquesta fórmula, després una part on hi seran totes les propietats i resultats més rellevants, i per últim el tractament de l'equació amb mètodes numèrics, que tenen un paper rellevant en les EDPs, ja que no sempre podrem trobar la solució d'aquestes, però sí una aproximació fent servir mètodes numèrics.

*A la família i als amics,
en especial a qui no va deixar que abandonés el difícil camí de les matemàtiques.*

Índex

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introducció | 1 |
| 2 | Preliminars | 3 |
| 2.1 | Problema ben plantejat | 3 |
| 2.2 | Problema de la calor en \mathbb{R}^n | 4 |
| 2.3 | Passeig aleatori ($n = 1$) | 5 |
| 2.4 | Passeig aleatori amb deriva ($n = 1$) | 7 |
| 2.5 | Passeig aleatori ($n > 1$) | 8 |
| 3 | Resultats bàsics sobre l'equació de la calor | 10 |
| 3.1 | Solució per separació de variables ($n = 1$) | 10 |
| 3.1.1 | Plantejament del problema | 10 |
| 3.2 | Unicitat i principi del màxim | 13 |
| 3.3 | Solució fonamental ($n > 1$) | 16 |
| 3.3.1 | Delta de Dirac | 18 |
| 3.4 | El problema global de Cauchy ($n = 1$) | 19 |
| 4 | Mètodes numèrics per l'equació de la calor | 23 |
| 4.1 | Mètodes de semidiscretització | 23 |
| 4.2 | Mètodes numèrics per EDOs | 27 |
| 4.2.1 | Euler explícit | 27 |
| 4.2.2 | Euler implícit | 28 |
| 4.2.3 | Crank-Nicolson | 30 |
| 4.2.4 | Mètode del gradient conjugat | 33 |
| 5 | Problema contextualitzat | 37 |

1 Introducció

La *modelització matemàtica* és un procés en el qual s'utilitzen conceptes i tècniques matemàtiques per a representar i analitzar fenòmens o sistemes del món real. La modelització matemàtica es fa servir en una àmplia varietat de camps, com ara l'enginyeria, l'economia, la medicina i la psicologia, entre d'altres.

Per dur a terme la modelització matemàtica, primer s'identifiquen els aspectes rellevants del fenomen o sistema que es vol modelar. A continuació, se seleccionen i s'utilitzen conceptes i tècniques matemàtiques adequades per a representar i analitzar aquests aspectes. Per exemple, en el camp de l'enginyeria, es poden fer servir equacions diferencials per a modelar el comportament dels sistemes que evolucionen amb el temps, com els sistemes de control en un cotxe. En el camp de l'economia, es pot fer ús dels models matemàtics per a predir el comportament dels mercats i prendre decisions d'inversió.

La modelització matemàtica és una eina poderosa per a entendre i predir el comportament dels fenòmens i sistemes en el món real. No obstant això, és important tenir en compte que les modelitzacions matemàtiques són simplificacions del món real i, per tant, poden no ser completament precises. Cal avaluar i validar les modelitzacions matemàtiques per assegurar que siguin útils i precises en la predicció del comportament dels fenòmens o sistemes que s'estan estudiant.

Entenem per *model matemàtic* un conjunt d'equacions i altres relacions matemàtiques capaces de plasmar les característiques d'un fenomen natural o artificial amb l'objectiu de descriure, preveure i controlar el comportament i l'evolució. Als models matemàtics sovint hi apareixen equacions diferencials ordinàries (EDO) i equacions diferencials en derivades parcials (EDP).

Una equació diferencial ordinària (EDO) és una equació matemàtica que descriu com canvia una quantitat, anomenada variable independent, en relació amb una altra quantitat, anomenada variable dependent.

Una EDO es pot escriure en la forma:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y),$$

on y és la variable dependent, x és la variable independent i $f(x, y)$ és una funció que descriu la relació entre x i y .

Per resoldre una EDO, és necessari trobar una funció $y(x)$ que satisfaci l'equació i que compleix qualsevol condició inicial o condicions de frontera especificades. Això, a vegades, es pot fer utilitzant tècniques matemàtiques com el mètode d'integració o el mètode de separació de variables, però no sempre es pot trobar una solució fent servir aquests mètodes. En canvi, sempre podrem trobar una aproximació de la solució fent servir mètodes numèrics.

Una equació diferencial en derivades parcials (EDP) és una equació matemàtica que involucra una o més funcions de varies variables i les seves derivades parcials respecte a cada una d'elles. Les EDPs es fan servir per a modelar el comportament dels sistemes que depenen de més d'una variable, com el flux de calor en un material o la propagació d'ones en un mitjà continu. Una EDP es pot escriure en la forma:

$$F(x_1, \dots, x_n, u, u_{x_1}, \dots, u_{x_n}, u_{x_1x_1}, u_{x_1x_2}, \dots, u_{x_nx_n}, u_{x_1x_1x_1}, \dots) = 0, \quad (1.1)$$

on F és una funció que involucra les variables x_1, x_2, x_3, \dots i les seves derivades parcials. La solució d'una EDP és una funció o conjunt de funcions que satisfan l'equació i qualsevol

condició inicial o condicions de frontera especificades. Les EDPs es poden classificar segons la funció que relaciona la funció incògnita i les seves derivades. Resoldre una EDP pot ser un repte matemàtic i pot requerir l'ús de tècniques especialitzades i eines matemàtiques i tot i així la majoria de vegades no és possible trobar la solució. Per la majoria d'EDPs hem de recórrer als mètodes numèrics per trobar una aproximació de la solució. Malgrat això, una vegada resolta, una EDP pot proporcionar informació valuosa sobre el comportament d'un sistema que depèn de més d'una variable.

L'equació de la calor és una de les equacions diferencials més importants en la física i l'enginyeria. El seu origen es remunta a la teoria de la calor del segle XVIII, desenvolupada per científics com Benjamin Franklin, Joseph Black i Antoine Lavoisier. Aquests científics van estudiar el comportament de la calor en diferents materials i van descobrir que la calor es propaga per conducció, convecció i radiació. La conducció és el procés pel qual la calor es transmet a través d'un material sòlid o líquid a causa de les col·lisions de les partícules properes. La convecció és el procés pel qual la calor es transmet a través d'un fluid, com l'aire o l'aigua, a causa del moviment de les partícules del fluid. La radiació és el procés pel qual la calor es transmet a través de l'espai sense necessitat d'un mitjà material.

Al segle XIX, els científics Joseph Fourier i Pierre-Simon Laplace van desenvolupar l'equació de la calor en la seva forma actual, que descriu com la temperatura es propaga en un cos o sistema en el temps i en l'espai. Aquesta equació es basa en la llei de conservació de l'energia, que estableix que l'energia total d'un sistema es manté constant a menys que s'afegeixi o es tregui energia del sistema.

Des d'aleshores, l'equació de la calor ha estat àmpliament utilitzada en molts àmbits de la ciència i l'enginyeria, com ara la termodinàmica, la mecànica de fluids i l'enginyeria tèrmica. També ha estat feta servir per a modelar el comportament de la calor en diferents sistemes, com ara la calor en materials conductors o la propagació de la calor en fluids.

A causa de la importància d'aquesta equació centrarem aquest treball en l'estudi i les aplicacions d'aquesta. La primera part d'aquest treball estarà centrada en l'estudi teòric de l'equació de la calor. Ens farem preguntes com per exemple, d'on sorgeix, com es resol i, fins i tot, com s'aplica. És una equació que es pot resoldre utilitzant mètodes matemàtics, com per exemple el mètode dels elements finits o el mètode de les diferències finites com veurem al final d'aquest treball.

2 Preliminars

En aquesta secció primer recordarem i definirem els conceptes bàsics que més tard farem servir per estudiar i entendre l'origen de l'equació de la calor. Definirem el problema de l'equació de la calor així com totes aquelles condicions que faran d'aquest un problema ben plantejat. Per últim, veurem com es pot obtenir l'equació de la calor com a límit d'un model discret i aleatori de difusió.

Començarem definint el que entenem per equació diferencial en derivades parcials i parlarem de les seves característiques.

Definició 2.1 (Equació diferencial en derivades parcials). *S'anomena equació diferencial en derivades parcials (EDP) a l'equació de la forma:*

$$F(x_1, \dots, x_n, u, u_{x_1}, \dots, u_{x_n}, u_{x_1x_1}, u_{x_1x_2}, \dots, u_{x_nx_n}, u_{x_1x_1x_1}, \dots) = 0, \quad (2.1)$$

on $u = u(x_1, \dots, x_n)$ és una funció de n variables i $u_{x_j}, \dots, u_{x_ix_j}, \dots$ són les seves derivades parcials.

Definició 2.2 (Ordre). *S'anomena ordre d'una EDP l'ordre més alt de les derivades parcials que apareixen a l'equació.*

Definició 2.3 (Linearitat). *Direm que l'equació (2.1) és lineal si F és lineal respecte u i les seves derivades, altrament direm que és no lineal.*

Hi ha altres tipus d'EDP segons la relació entre F , u i les seves derivades. Les podem classificar de la següent manera:

- *Semilineal.* Si F és no lineal respecte u , però si respecte les seves derivades.
- *Quasi lineal.* Si F és lineal respecte la derivada d'ordre major d' u i els coeficients només depenen de x , u , i derivades d'ordre menor.
- *Completament no lineal.* Si F és no lineal respecte la derivada d'ordre major d' u .

L'objectiu d'aquest treball és l'estudi de l'equació de la calor,

$$u_t - D\Delta u = 0, \quad (2.2)$$

que és un exemple d'equació diferencial en derivades parcials lineal.

2.1 Problema ben plantejat

Per assegurar que estem treballant amb un model matemàtic coherent, únic i estable hem de treballar amb problemes ben plantejats.

Treballar amb un problema ben plantejat és important ja que permet obtenir resultats precisos i fiables. Al contrari, un problema mal plantejat pot tenir múltiples solucions o no tenir solució en absolut.

Definició 2.4 (Problema ben plantejat). *Diem que un problema és ben plantejat si compleix:*

- 1) *Existeix una única solució.*
- 2) *La solució depèn continuament de les dades, és a dir, un petit canvi en les dades provocarà un petit canvi a la solució.*

2.2 Problema de la calor en \mathbb{R}^n

Tot seguit enunciarem el problema de la calor i, per a que sigui un problema ben plantejat, inicialment ens cal tenir:

- 1) L'equació que compleix la funció de la calor $u = u(x, t)$, $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ obert, $t \in (0, T]$:

$$u_t - D\Delta u = 0,$$

on D és l'anomenat terme de difusió.

- 2) La condició inicial

$$u(x, 0) = g(x), \quad x \in \overline{\Omega},$$

on $g(x)$ és una funció que descriu el model inicial de la temperatura.

- 3) I, per últim, les condicions de frontera. En parlarem de les quatre més comuns:

- Condicions Dirichlet:

$$u(\phi, t) = h(\phi, t), \quad \phi \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T].$$

- Condicions de Radiació o Robin:

Sigui \vec{n} el vector normal unitari,

$$\partial_n u(\phi, t) + \alpha u(\phi, t) = h(\phi, t), \quad \alpha > 0, \quad \phi \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T].$$

- Condicions Neumann:

$$\partial_n u(\phi, t) = h(\phi, t), \quad \phi \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T].$$

- Condicions mixtes:

Suposem $\partial\Omega = \overline{A_1} \cup \overline{A_2}$ tal que $\overline{A_1} \cap \overline{A_2} = \emptyset$, amb A_1, A_2 conjunts oberts. Aleshores:

$$\begin{aligned} u(\phi, t) &= h_1(\phi, t) && \text{si } (\phi, t) \in A_1 \times (0, T) \\ \partial_n u(\phi, t) &= h_2(\phi, t) && \text{si } (\phi, t) \in A_2 \times (0, T). \end{aligned}$$

2.3 Passeig aleatori ($n = 1$)

El *mètode del passeig aleatori*, també conegut com el *mètode de difusió Montecarlo*, és una tècnica numèrica per obtenir l'equació de la calor. És una forma de simulació que es basa en la idea que la calor es propaga a través d'un material com si fos la calor transportada per partícules que es mouen a l'atzar. Això es fa mitjançant la simulació de moltes partícules fictícies que es mouen a l'atzar a través del material. Cada partícula porta un petit paquet de calor, i el seu moviment a l'atzar simula la calor es propaga d'un lloc a un altre.

La idea principal és que cada partícula es mourà de manera aleatòria des de la seva posició inicial cap a un veí qualsevol, i cada vegada que una partícula es mou, s'actualitza la temperatura en aquest punt. Ho hem d'entendre com si la calor fos transportada per un conjunt de partícules que es mouen més ràpidament contra més alta sigui la temperatura, i per tant amb aquest moviment va xocant contra les partícules veïnes transmetent energia, en aquest cas en forma de calor. Amb aquest moviment vibratori podem entendre que quan xoca amb la partícula de la dreta no ho pot fer amb la de l'esquerra, per això parlem de moure's cap a una banda o l'altra. D'aquesta manera, es simula com la calor es propaga a través d'un material.

Aquesta escena pot variar i també es podria entendre amb altres elements, per exemple la difusió d'un contaminant en una canonada d'aigua. En aquest cas pot ser una mica més intuïtiu entendre com s'escampa el contaminant en una canonada.

Suposem que la nostra partícula es mou a través de l'eix de les x amb un pas d'espai $h > 0$, cada interval de temps $\tau > 0$, d'acord amb:

- 1) La partícula comença en $x = 0$.
- 2) La partícula es mou a la dreta o a l'esquerra amb una probabilitat $p = \frac{1}{2}$ independentment dels passos anteriors.

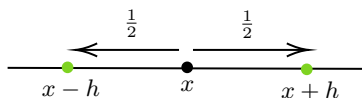


Figura 1

Denotem amb $p = p(x, t)$ la probabilitat de que la partícula es trobi en $x = mh$ a temps $t = N\tau$, on t és el temps després de $N \geq 0$ passos, per tant, $m \in \mathbb{Z}$, $-N \leq m \leq N$. Ara calculem la forma de la probabilitat $p = p(x, t)$. Cada moviment és independent respecte l'anterior. Si la partícula, a temps $t + \tau$, es troba en x , vol dir que a temps t es podia trobar en $x - h$ o $x + h$ amb la mateixa probabilitat.

La fórmula de probabilitats totals ens dona:

$$p(x, t + \tau) = \frac{1}{2}p(x - h, t) + \frac{1}{2}p(x + h, t), \quad (2.3)$$

amb les condicions inicials:

$$p(0, 0) = 1 \quad \text{i} \quad p(x, 0) = 0 \quad \text{si} \quad x \neq 0.$$

Anem a veure què succeeix quan $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ amb x i t fixes. Hem de pensar en p com una funció suau definida a $\mathbb{R} \times (0, +\infty)$, quan passem al límit trobem una distribució

continua de probabilitat i p l'hem d'interpretar com una densitat de probabilitat. Amb la fórmula de Taylor podem escriure:

$$\begin{aligned} p(x, t + \tau) &= p(x, t) + p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) \\ p(x \pm h, t) &= p(x, t) \pm p_x(x, t)h + \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned}$$

substituint en (2.3) obtenim:

$$\begin{aligned} p(x, t) + p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) &= \frac{1}{2}(p(x, t) - p_x(x, t)h + \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3)) \\ &\quad + \frac{1}{2}(p(x, t) + p_x(x, t)h + \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3)) \\ &= p(x, t) + \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned}$$

i finalment tenim la següent igualtat:

$$p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) = \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

Ara si dividim per τ :

$$p_t(x, t) + \mathcal{O}(\tau) = \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)\frac{h^2}{\tau} + \mathcal{O}\left(\frac{h^3}{\tau}\right). \quad (2.4)$$

Si volem obtenir una solució no trivial quan $h, t \rightarrow 0$, hem d'imposar que el quocient $\frac{h^2}{\tau}$ tingui un límit finit i positiu, l'opció més simple és considerar

$$\frac{h^2}{\tau} = 2D,$$

per algún $D > 0$ tal que les seves dimensions siguin $[D] = [longitud]^2 \times [temps]^{-1}$. Per tant, ara aplicant el límit quan $h, t \rightarrow 0$ a la igualtat (2.4), obtenim:

$$p_t(x, t) = Dp_{xx}(x, t), \quad (2.5)$$

i amb les condicions inicials s'obté:

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} p(x, t) = \delta(x),$$

on $\delta(x)$ és la coneguda Delta de Dirac de la que parlarem més endavant. Com veurem més endavant, aquesta condició junt amb (2.5) i tenint en compte $\int_{\mathbb{R}} p(x, t)dx = 1$ ens dona una única solució:

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{|x|^2}{4Dt}},$$

coneguda com la solució fonamental de la que també parlarem més endavant. La constant D de la que hem parlat abans, és precisament la constant de difusió. Tenint en compte:

$$h^2 = \frac{x^2}{h} \quad \tau = \frac{t}{N},$$

tenim

$$\frac{h^2}{\tau} = \frac{x^2}{t} = 2D,$$

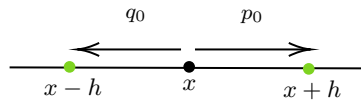
que vol dir que en una unitat de temps, la partícula recorre una distància de $\sqrt{2D}$ unitats.

2.4 Passeig aleatori amb deriva ($n = 1$)

Aquesta situació no és sempre simètrica. Imaginem que ara en comptes de difondre's la calor estem estudiant com s'escampa un contaminant en una canonada d'aigua, i aquesta canonada té una mica d'inclinació cap a una de les dues bandes, o en un riu amb un corrent suau. Aleshores el contaminant tindrà tendència a escampar-se cap a una de les dues direccions.

Suposem que la nostra partícula (de calor, o contaminant) es mou un espai $h > 0$ cada interval de temps $\tau > 0$, d'acord amb:

- La partícula comença en $x = 0$.
- Es mou cap a la dreta amb una probabilitat $p_0 \neq \frac{1}{2}$ i cap a l'esquerra amb probabilitat $q_0 = 1 - p_0$, independentment dels passos anteriors.



Naturalment, la segona regla trenca la simetria del cas anterior. Podem veure la tendència de la difusió en el signe $p_0 - q_0$, tindrà tendència cap a la dreta si és positiu o cap a l'esquerra si aquest és negatiu. Volem fer el mateix estudi que hem fet durant el cas anterior i veure les diferències que trobem i el seu significat.

Denotem amb $p = p(x, t)$ la probabilitat de que la partícula es trobi en $x = mh$ a temps $t = N\tau$, amb $N \in \mathbb{Z}$ on mh és la posició de la partícula després de N passos. Per la fórmula de les probabilitats totals:

$$p(x, t + \tau) = p_0 p(x - h, t) + q_0 p(x + h, t), \quad (2.6)$$

amb condicions inicials:

$$p(0, 0) = 1 \quad \text{i} \quad p(x, 0) = 0 \quad \text{si} \quad x \neq 0.$$

Ara volem estudiar el límit de la probabilitat quan $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$. De la fórmula de Taylor tenim:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2),$$

$$p(x \pm h, t) = p(x, t) \pm p_x(x, t)h + \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

Substituint en (2.6), acabem obtenint:

$$p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau^2) = \frac{1}{2}p_{xx}(x, t)h^2 + (q_0 - p_0)p_x(x, t)h + \mathcal{O}(h^3),$$

Notem que ens apareix un nou terme que no hi era al cas anterior $(q_0 - p_0)p_x(x, t)h$. Dividint per τ

$$p_t(x, t) + \mathcal{O}(\tau) = \frac{1}{2} \frac{h^2}{\tau} p_{xx}(x, t) + \frac{(q_0 - p_0)h}{\tau} p_x(x, t) + \mathcal{O}\left(\frac{h^2}{\tau}\right).$$

Con al cas anterior, volem que el terme $\frac{h^2}{\tau}$ tingui un límit finit i positiu per $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$, per tant imposem que aquest límit sigui

$$\frac{h^2}{\tau} = 2D,$$

on $D > 0$. Però encara no és suficient, per que tenim un nou terme, observem:

$$\frac{(q_0 - p_0)h}{\tau} \rightarrow \infty.$$

Per evitar això, primer notem que podem escriure aquest terme com:

$$\frac{(q_0 - p_0)h^2}{h \tau},$$

per tant ara cal que el terme $\frac{(q_0 - p_0)h^2}{h \tau}$ tingui un límit finit, i per això imposarem:

$$\frac{(q_0 - p_0)h^2}{h \tau} \rightarrow \beta,$$

amb β finita. Aquest límit existeix ja que, tenint en compte que es compleix $q_0 + p_0 = 1$, puc escollir els valors de tal manera que es compleixi:

$$p_0 = \frac{1}{2} - \frac{\beta}{2}h \quad q_0 = \frac{1}{2} + \frac{\beta}{2}h,$$

observem que aleshores es pot interpretar com l'existència d'una simetria a petita escala. Finalment el límit del terme és:

$$\frac{(q_0 - p_0)h^2}{h \tau} \rightarrow 2D\beta \equiv b.$$

I per últim, el límit de la fórmula de probabilitat quan $h \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ és:

$$p_t = Dp_{xx} + bp_x.$$

Entendrem ara el significat d'aquest límit. Com ja sabem, el terme Dp_{xx} modela el fenomen de difusió, el que ara ens interessa entendre és el terme bp_x . Per això primer examinarem les dimensions de b , com el factor $(q_0 - p_0)$ no té dimensions, seran les mateixes que les del quocient $\frac{h^2}{\tau}$, que anomenarem velocitat, espai recorregut en una unitat de temps. És a dir, el coeficient b ens donarà tant la direcció de la tendència de la difusió (signe del terme b) com la velocitat a la qual avança (valor $|b|$).

2.5 Passeig aleatori ($n > 1$)

En aquesta secció estendrem el mètode del passeig aleatori a $n > 1$. Per imaginar-nos en quina situació ens trobem, un exemple en $n = 3$ podria ser la temperatura d'una habitació, com varia en funció de la calor que reben les parets.

Aquesta secció és molt similar al cas en $n = 1$ en relació als càlculs. Hem d'introduir el concepte de xarxa \mathbb{Z}^n , que és un conjunt de punts $x \in \mathbb{R}^n$ amb coordenades enteres amb signe, és a dir, tant positives com negatives. Donat un pas d'espai $h > 0$, el símbol $h\mathbb{Z}^n$ indica la xarxa de punts tal que les seves coordenades són múltiples de h .

Cada punt $x \in h\mathbb{Z}^n$, té $2n$ punts a distància h , donats per:

$$x + he_j \quad i \quad x - he_j \quad (j = 1, \dots, n),$$

on e_1, \dots, e_n és la base canònica en \mathbb{R}^n . El moviment de les partícules ha de complir:

- 1) Comença en $x = 0$.
- 2) Sigui $\tau > 0$ el pas de temps. Si la partícula es troba en x a temps t , la partícula a temps $t + \tau$ es trobarà en un dels $2n$ punts $x \pm he_j$ amb probabilitat $p = \frac{1}{2n}$ independentment dels passos anteriors.

Tornarem a calcular ara la probabilitat $p(x, t)$ com hem fet per $n = 1$. Les condicions inicials són:

$$p(0, 0) = 1, \quad p(x, 0) = 0 \quad \text{si } x \neq 0,$$

la fórmula de probabilitats totals ens dona

$$p(x, t + \tau) = \frac{1}{2n} \sum_{j=1}^n [p(x + he_j, t) + p(x - he_j, t)] \quad (2.7)$$

Per fer els càlculs seguirem els mateixos passos que en $n = 1$. Primer, mantenint x, t fixos volem estudiar què succeeix al límit $h \rightarrow 0, t \rightarrow 0$. Suposem p continua i suau en $\mathbb{R}^n \times (0, +\infty)$, amb la fórmula de Taylor obtenim:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau)$$

$$p(x \pm he_j, t) = p(x, t) \pm p_{x_j}(x, t)h + \frac{1}{2}p_{x_j x_j}(x, t)h^2 + \mathcal{O}(h^2).$$

Substituint en (2.7) i simplificant:

$$p_t(x, t)\tau + \mathcal{O}(\tau) = \frac{h^2}{2n} \Delta p + \mathcal{O}(h^2),$$

dividint per τ

$$p_t(x, t) + \mathcal{O}(1) = \frac{1}{2n} \frac{h^2}{\tau} \Delta p + \mathcal{O}\left(\frac{h^2}{\tau}\right), \quad (2.8)$$

com en l'anterior cas, necessitem que $\frac{h^2}{\tau}$ tingui un límit positiu i acotat, per tant, escollirem el límit com:

$$\frac{h^2}{\tau} = 2nD,$$

amb $D > 0$. Això ens indica que en una unitat de temps, la partícula avança $\sqrt{2nD}$ unitats.

Per tant, si apliquem el límit $h \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0$, a l'expressió (2.8) deduem:

$$p_t(x, t) = D\Delta p(x, t),$$

amb les condicions inicials tornem a obtenir

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} p(x, t) = \delta(x),$$

i tenint en compte $\int_{\mathbb{R}^n} p(x, t) dx = 1$, la solució única trobada és:

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi Dt)^n}} e^{-\frac{|x|^2}{4Dt}}, \quad t > 0.$$

3 Resultats bàsics sobre l'equació de la calor

Durant aquesta secció cercarem la solució del problema principal d'aquest treball, l'equació de la calor. Ja hem vist, i ens podem situar, una primera forma de la funció de la calor, ara ens centrarem en trobar la solució d'altres maneres, com per exemple amb el mètode de separació de variables o partint d'un inici amb condicions no homogènies. També esmentarem els resultats més rellevants d'aquesta funció.

En aquesta secció trobarem que a vegades els resultats es mostren i discuteixen en $n = 1$ i d'altres en $n > 1$. Per exemple, quan trobem la solució fent servir el mètode de separació de variables ho farem $n = 1$, ja que es típicament unidimensional, en canvi, per generalitzar, el teorema d'unicitat, el principi del màxim i la solució fonamental ho trobarem en $n > 1$, per últim, discutirem el problema global de Cauchy que tornarà a estar en $n = 1$ per simplicitat dels càlculs.

3.1 Solució per separació de variables ($n = 1$)

En aquesta secció considerarem un cas concret, ens situem en \mathbb{R} . Suposem que tenim una vareta metàl·lica fina de longitud L , aïllada excepte als extrems, amb temperatura inicial ($t=0$) constant $T = u_0$. Volem saber què passarà si aplico calor en un dels extrems de la vareta amb temperatura $u_1 > u_0$. Com es difondrà? Intuïtivament podem pensar que acabarem obtenint una temperatura constant igual al llarg de tota la vareta metàl·lica, però podem calcular quant trigarà a arribar a aquesta situació? Aquest comportament dependrà de les característiques de la vareta? Totes aquestes preguntes les podem estudiar a través del model matemàtic que ens dona el problema de la calor.

El problema de la calor és un problema matemàtic que es fa servir per modelar la transferència de calor en un cos i predir com la temperatura canviarà al cos amb el pas del temps i la posició. Per resoldre el problema de la calor, és necessari establir les condicions inicials i de frontera del sistema.

Les condicions inicials del problema de la calor fan referència a la temperatura inicial del cos i com està distribuïda en aquest. Les condicions de frontera del problema de la calor fan referència a com es transfereix la calor al cos a través de les seves fronteres.

3.1.1 Plantejament del problema

Definim ara el model matemàtic:

$$u_t - Du_{xx} = 0, \quad t > 0, \quad 0 < x < L, \quad (3.1)$$

amb una condició inicial:

$$u(x, 0) = u_0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (3.2)$$

i la condició de frontera de tipus Dirichlet:

$$u(0, t) = u_0, \quad u(L, t) = u_1, \quad t > 0. \quad (3.3)$$

No imposem límit superior al temps ja que el nostre interès està en l'estudi del comportament a llarg termini.

Per fer l'estudi més senzill reescalarem el problema i plantejarem l'equació de la temperatura z amb variables sense dimensió.

1) *Variable d'espai.* Farem servir la longitud de la vareta L i definirem:

$$y = \frac{x}{L},$$

notem que clarament y és una variable sense dimensió, es tracta d'una escala de longitud que està definida en $0 \leq y \leq 1$.

2) *Variable de temps.* Recordem que les unitats del terme de difusió D són $[\text{longitud}]^2 \times [\text{temps}]^{-1}$, per tant si definim $\tau = L^2/D$ la seva unitat de mesura serà $[\text{temps}]$ i aleshores definint

$$s = \frac{t}{\tau},$$

tenim la variable s sense unitats de mesura que ens indica el pas del temps.

Per tant, si plantegem l'equació de la temperatura amb aquests paràmetres, obtenim el model matemàtic següent:

$$z(y, s) = \frac{u(Ly, \tau s) - u_0}{u_1 - u_0},$$

i fent servir (3.2) i (3.3) obtenim les condicions inicials i de frontera de tipus Dirichlet també redimensionades:

$$z(y, 0) = \frac{u(Ly, 0) - u_0}{u_1 - u_0} = 0, \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (3.4)$$

$$z(0, s) = \frac{u(0, \tau s) - u_0}{u_1 - u_0} = 0, \quad z(1, s) = \frac{u(L, \tau s) - u_0}{u_1 - u_0} = 1, \quad (3.5)$$

on $z(y, s)$ serà l'equació de la calor amb variables sense unitats, u_0 la temperatura inicial i u_1 la temperatura que aplicarem al problema.

Al llarg del problema ens trobem amb tres estats diferents: l'estat inicial, que ja hem comentat, l'estat transitori, és tot el que succeeix entre l'inici i el final del problema, i l'estat d'equilibri, quan temperatura en cada punt de la verta metàl·lica que ja no varia. A continuació farem un anàlisi dels dos estats que encara no hem vist.

Estat d'equilibri

Abans d'estudiar què succeeix en l'estat d'equilibri observem que:

$$(u_1 - u_0)z_s = \frac{\partial t}{\partial s} u_t = \tau u_t = \frac{L^2}{D} u_t,$$

$$(u_1 - u_0)z_{yy} = \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)^2 u_{xx} = L^2 u_{xx}.$$

I ara, per l'equació de la calor, tenim $u_t = Du_{xx}$, aleshores:

$$(u_1 - u_0)(z_s - z_{yy}) = \frac{L^2}{D} u_t - L^2 u_{xx} = \frac{L^2}{D} Du_{xx} - L^2 u_{xx} = 0.$$

Per tant, concloem que

$$z_s - z_{yy} = 0. \quad (3.6)$$

Ara doncs, ja podem analitzar el comportament de la funció z durant l'estat d'equilibri. Sabem que aquest estat es produeix quan la temperatura és constant al llarg de la vareta metàl·lica, per tant tenim $z_s = 0$ i per (3.6) obtenim $z_{yy} = 0$ i junt amb (3.4) i (3.5), tenint en compte que ens trobem en l'interval $[0, 1]$, com la solució ha de ser una recta obtenim que l'equació durant l'estat d'equilibri és

$$z^{St}(y) = y,$$

i amb la variable x inicial trobarem

$$u^{St}(x) = u_0 + (u_1 - u_0) \frac{x}{L}.$$

Estat transitori

Aquest estat comprén tot el que succeeix des de l'inici fins arribar a l'estat d'equilibri, per tant, per definició obtenim que ara l'equació de la temperatura és:

$$U(y, s) = z^{St}(y, s) - z(y, s) = y - z(y, s).$$

Observació 3.1. Notem que la funció $U(y, s)$ convergirà a 0 quan $t \rightarrow \infty$ ja que $z \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} z^{St} = y$. Aquesta funció ens donarà informació sobre la velocitat a la qual s'escampa la calor.

Per trobar l'equació de la calor en l'estat transitori faran servir el *mètode de separació de variables*. És un mètode matemàtic que s'utilitza per resoldre equacions diferencials parcials (EDPs). Consisteix en separar les variables dependents i les independents de l'equació i després resoldre les equacions resultants per separat.

Tenint en compte els darrers càlculs seguirem buscant la fórmula explícita de $U(y, s)$ fent servir el mètode de separació de variables².

Volem buscar una funció del tipus $U(y, s) = v(y)w(s)$ complint les condicions de frontera de tipus Dirichlet (3.4) i (3.5). Per començar suposarem $v(0) = w(0) = 0$. De la igualtat (3.6) tenim

$$0 = U_s - U_{yy} = v(y)w'(s) - v''(y)w(s)$$

$$\frac{v''(y)}{v(y)} = \frac{w'(s)}{w(s)} = \lambda,$$

obtenim doncs

$$v''(y) - \lambda v(y) = 0 \tag{3.7}$$

$$w'(s) - \lambda w(s) = 0. \tag{3.8}$$

Per trobar la forma explícita de $U(y, s)$ haurem de trobar solucions no trivials d'aquestes equacions diferencials i ho farem separant tres casos: $\lambda = 0$, $\lambda > 0$ i $\lambda < 0$.

²Tractarem amb unes condicions de frontera homogènies, d'aquesta manera ens serà més senzill realitzar els càlculs.

- $\lambda = 0$

Obtenim $v''(y) = 0$ per tant busquem calcular $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ tal que $v(y) = C_1 y + C_2$.
Aplicant les condicions de frontera $v(0) = v(1) = 0$

$$\begin{aligned} 0 &= v(0) = C_2 \\ 0 &= v(1) = C_1 + C_2, \end{aligned}$$

per tant $C_1 = C_2 = 0$, aquesta solució és trivial i no ens interessa.

- $\lambda = \mu^2 > 0$

Calculem la solució de $v''(y) - \mu^2 v(y) = 0$ obtenint $v(y) = C_1 e^{-\mu y} + C_2 e^{\mu y}$ i amb les condicions de frontera tornem a obtenir $C_1 = C_2 = 0$ una solució trivial i per tant aquest cas tampoc ens interessa.

- $\lambda = -\mu^2 < 0$

Calculem ara la solució de $v''(y) + \mu^2 v(y) = 0$ d'on obtenim $v(y) = C_1 \sin \mu y + C_2 \cos \mu y$ i amb les condicions de frontera

$$\begin{aligned} 0 &= v(0) = C_2 \\ 0 &= v(1) = C_1 \sin \mu + C_2 \cos \mu, \end{aligned}$$

de la primera equació obtenim $C_2 = 0$ i per tant hem de resoldre

$$0 = C_1 \sin \mu,$$

amb $C_1 \in \mathbb{R}$ arbitrari tenim $\mu_n = n\pi, n \in \mathbb{N}$. Finalment, la solució per aquest cas és $v_n(y) = A_n \sin n\pi y$.

Als dos primers casos hem obtingut una solució trivial, és l'últim cas el que ens interessa per trobar la forma explícita de $U(y, s)$. Ens cal ara calcular la forma de $w(s)$, per això hem de calcular la solució de

$$w'(s) - \lambda w(s) = 0,$$

per $\lambda = -\mu^2 < 0$, d'on obtenim $w_n(s) = B_n e^{-n^2 \pi^2 s}$. Si ho agrupem tot tenim

$$U_n(y, s) = v_n(y)w_n(s) = A_n \sin(n\pi y) B_n e^{-n^2 \pi^2 s} = D_n \sin(n\pi y) e^{-n^2 \pi^2 s}.$$

Com l'equació és lineal, qualsevol combinació lineal de solucions és solució. Es pot veure que qualsevol sèrie convergent de la forma:

$$U(y, s) = \sum_{n=1}^{\infty} U_n(y, s) = \sum_{n=1}^{\infty} D_n \sin(n\pi y) e^{-n^2 \pi^2 s},$$

també és solució. Els coeficients D_n es poden determinar a partir de la condició inicial.

3.2 Unicitat i principi del màxim

Es aquesta secció veurem i provarem dues propietats rellevants de la solució de l'equació de la calor. Primer volem comprovar que el problema de la calor en \mathbb{R}^n que hem plantejat a la secció 2.2, amb una de les quatre condicions de frontera, té una única solució.

Teorema 3.2 (Unicitat de la solució en \mathbb{R}^n). *El problema de la calor (Secció 2.2) amb qualsevol de les quatre condicions de frontera enunciades, té una única solució.*

Demostració. Comencem assumint que u_1 i u_2 són solucions del problema, definim $w = u_1 - u_2$, haurem de provar que $w \equiv 0$. Per construcció, w compleix

$$w_t - D\Delta w = 0, \quad (\phi, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (3.9)$$

amb la condició inicial

$$w(x, 0) = 0,$$

i les condicions de frontera amb $(x, t) \in \partial\Omega \times (0, T]$:

$$w(x, t) = 0 \quad (\text{Dirichlet})$$

o

$$\partial_n w(x, t) = 0 \quad (\text{Neumann})$$

o

$$\partial_n w(x, t) + \alpha w(x, t) = 0, \quad \alpha > 0 \quad (\text{Robin})$$

o

$$w(x, t) = 0 \quad \text{en } A_1, \quad \partial_n w(x, t) = 0 \quad \text{en } A_2 \quad (\text{mixtes}).$$

Multipliquem per w i integrem (3.9) en Ω :

$$\int_{\Omega} w w_t dx = D \int_{\Omega} w \Delta w dx.$$

Per una banda, al costat esquerra de la igualtat tenim:

$$\int_{\Omega} w w_t dx = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} w^2 dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} w^2 dx.$$

I a la banda dreta, fent servir la identitat de Green³ amb $w_1 = w_2 = w$:

$$D \int_{\Omega} w \Delta w dx = D \int_{\partial\Omega} w \partial_n w dx - \int_{\Omega} |\nabla w|^2 dx.$$

Anomenem $E(t) = \int_{\Omega} w^2 dx$ i amb les igualtats anteriors obtenim:

$$\frac{1}{2} E'(t) = D \int_{\partial\Omega} w \partial_n w dx - D \int_{\Omega} |\nabla w|^2 dx.$$

Veiem ara que $E'(t) < 0$. Com $|\nabla w|^2 > 0$, només cal veure $\int_{\Omega} w \partial_n w dx < 0$, ho comprovem per totes les condicions de frontera:

- Condicions de Radiació o Robin:

Tenim la igualtat $\partial_n w = -\alpha w$, per tant

$$\int_{\Omega} w \partial_n w dx = -\alpha \int_{\Omega} w^2 dx,$$

ara $w^2 > 0$ per tant el terme és negatiu i $E'(t) < 0$.

³ $\int_{\Omega} w_1 \Delta w_2 dx = \int_{\partial\Omega} w_1 \partial_n w_2 dx - \int_{\Omega} \nabla w_1 \nabla w_2 dx$

- Amb les altres condicions o bé tenim $w = 0$ o $\partial_n w = 0$, per tant el primer terme és nul i $E'(t) < 0$ com volíem veure.

Ara, per tant, tenim que $E(t)$ és una funció decreixent i per la condició inicial:

$$E(0) = \int_{\Omega} w^2(x, 0) dx = 0,$$

aleshores $E(t) = 0$ és una funció constant i, finalment, $w(x, t) \equiv 0$, $(x, t) \in \Omega \times (0, T)$, hem demostrat que la solució és única. \square

Ara ja hem vist que existeix una única solució al problema de la calor, i per tant això ens permetia suposar, quan intentàvem trobar una solució amb el mètode de separació de variables, que existia una solució del tipus $U(y, s) = v(y)w(s)$, ja que si trobem una solució serà aquesta la vàlida al tenir la propietat de unicitat.

Tot seguit demostrarem un teorema que parla d'una de les propietats de l'equació de la calor: el principi del màxim. El principi del màxim és un principi matemàtic que s'utilitza per predir el comportament de sistemes físics en equilibri. Es basa en la idea que en un sistema de difusió en equilibri, la magnitud que s'està estudiant (per exemple, la temperatura, la pressió o l'energia) no pot tenir un valor màxim o mínim a l'interior del domini. Ho enunciamos i demostrarem en el domini definit $D_T = \Omega \times (0, T)$.

Definició 3.3 (subsolució (supersolució)). *Una funció $w \in C^{2,1}(D_T)$ tal que $w_t - D\Delta w \leq 0$ (≥ 0) en D_T s'anomena subsolució (supersolució) de l'equació de la calor.*

Ara passarem a enunciar un teorema auxiliar que necessitarem per provar el principi del màxim.

Teorema 3.4. *Suposem $u \in C^2(D_T) \cap C(\overline{D_T})$. Si*

$$\Delta u \geq 0 \quad \text{en } D_T, \tag{3.10}$$

aleshores $\max_{\overline{D_T}} u = \max_{\partial D_T} u$.

Demostració. Teorema 1 de l'apartat 6.4.1. Weak maximum pinciple del llibre [2] de les referències. \square

Teorema 3.5 (Principi del màxim). *Si $u(x, t)$ una funció que satisfà la desigualtat*

$$F(u) \equiv u_t - \Delta u \leq 0 \quad (\text{resp. } \geq 0) \quad \text{en } D_T, \tag{3.11}$$

aleshores el màxim (resp. mínim) de $u(x, t)$ sobre $\overline{D_T}$ es trobarà en $\partial_p D_T = (\overline{\Omega} \times \{t = 0\}) \cup S = (\partial\Omega \times (0, T))$.

Demostració. Suposem que tenim la desigualtat estricta

$$u_t - \Delta u < 0 \quad \text{en } D_T, \tag{3.12}$$

però $\exists (x_0, t_0) \in D_T$ tal que $u(x_0, t_0) = \max_{\overline{D_T}} u$. Si $0 < t_0 < T$ aleshores (x_0, t_0) es troba a l'interior de D_T i per tant

$$u_t = 0 \quad \text{en } (x_0, t_0), \tag{3.13}$$

ja que és un màxim de u . Ara hem de veure que $\Delta u \leq 0$ en (x_0, t_0) per arribar a contradicció, i això ho tenim pel teorema auxiliar fent servir que (x_0, t_0) és un màxim i un punt interior, per tant

$$u_t - \Delta u \geq 0 \quad \text{en } (x_0, t_0), \quad (3.14)$$

que contradia la hipòtesi i per tant el màxim no pot ser un punt interior. \square

3.3 Solució fonamental ($n > 1$)

En aquesta secció buscarem una solució particular en \mathbb{R}^n de l'equació $u_t - \Delta u = 0$ que és coneguda com la *solució fonamental*.

La solució fonamental de l'equació de calor és una solució general per a l'equació de la calor que s'utilitza com a punt de partida per resoldre problemes específics de la calor, com per exemple, com veurem més endavant, el problema global de Cauchy.

Buscarem una funció $u(x, t)$ que sigui invariant respecte dilatacions de la forma $u(x, t) \rightarrow \lambda^\alpha u(\lambda^\beta x, \lambda t)$ amb $\lambda > 0$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$.

Prenent $\lambda = t^{-1}$ es comprova que aquests tipus de solucions són de la forma

$$u(x, t) = \frac{1}{t^\alpha} v\left(\frac{x}{t^\beta}\right), \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times (0, T), \quad (3.15)$$

amb $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ i $v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una funció a determinar.

De (3.15) deduïm:

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= -\alpha t^{-(\alpha+1)} v\left(\frac{x}{t^\beta}\right) + \beta t^{-(\alpha+1)} t^{-\beta} \nabla v\left(\frac{x}{t^\beta}\right) x \\ \Delta u(x, t) &= t^{-(\alpha+\beta)} t^{-\beta} \Delta v\left(\frac{x}{t^\beta}\right). \end{aligned}$$

Ara si $u(x, t)$ és solució de l'equació de la calor i substituïm $y = \frac{x}{t^\beta}$ aleshores v és solució de

$$\alpha t^{-(\alpha+1)} v(y) + \beta t^{-(\alpha+1)} \nabla v(y) y + t^{-(\alpha+2\beta)} \Delta v(y) = 0, \quad \forall y \in \mathbb{R}^n, \quad \forall t > 0.$$

Si substituïm $\beta = \frac{1}{2}$ podem deduir que u és solució si, i només si:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{t^{\alpha+1}} v(y) + \frac{1}{2} \frac{1}{t^{\alpha+1}} \nabla v(y) y + \frac{1}{t^{\alpha+1}} \Delta v(y) &= 0 \\ \frac{1}{t^{\alpha+1}} \left[\alpha v(y) + \frac{y}{2} \nabla v(y) + \Delta v(y) \right] &= 0 \\ \alpha v(y) + \frac{y}{2} \nabla v(y) + \Delta v(y) &= 0. \end{aligned}$$

Ara tenim una EDP que només depèn de la variable x .

Volem trobar una solució de la forma

$$v(y) = w(|y|) \quad \text{amb } w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}.$$

Si diem $r = |y|$ aleshores l'equació anterior es converteix en:

$$\alpha w(r) + \frac{1}{2} r w'(r) + w''(r) + \frac{N-1}{r} w'(r) = 0,$$

multiplicant per r^{N-1} obtenim:

$$r^{N-1}w''(r) + (N-1)r^{N-2}w'(r) + \alpha r^{N-1}w(r) + \frac{1}{2}r^N w'(r) = 0,$$

prenent $\alpha = \frac{N}{2}$ es queda com:

$$(N-1)r^{N-2}w'(r) + r^{N-1}w''(r) + \frac{N}{2}r^{N-1}w(r) + \frac{r^N}{2}w'(r) = \left(r^{N-1}w'(r) + \frac{1}{2}r^N w(r) \right)' = 0.$$

És una EDO lineal de segon ordre que resolent-la s'obté:

$$w(r) = be^{-\frac{r^2}{4}} + a \int_0^r \frac{1}{S^{N-1}} e^{\frac{s^2}{4} - \frac{r^2}{4}} ds, \quad a, b \in \mathbb{R}.$$

Prenent $a \equiv 0$ i tornant a (3.15) obtenim una solució de l'equació de la calor donada per:

$$u(x, t) = b \frac{1}{t^{\frac{N}{2}}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}}, \quad (x, t) \in \mathbb{R}^n \times (0, T).$$

Volem trobar la solució que compleix

$$\int_{\Omega} u(x, t) dx = 1, \quad \forall t > 0.$$

Per tant $b = \frac{1}{(4\pi)^{\frac{N}{2}}}$ ja que:

$$\int_{\Omega} \frac{1}{t^{\frac{N}{2}}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} dx = \frac{1}{t^{\frac{N}{2}}} \prod_{i=1}^N \int_{\Omega} e^{-\frac{s_i^2}{4t}} ds_i = (4\pi)^{\frac{N}{2}}.$$

Definició 3.6. Anomenem a la funció

$$G(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{N}{2}}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} & \text{si } x \in \mathbb{R}^n, t > 0 \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R}^n, t \leq 0 \end{cases}$$

solució fonamental de l'equació de la calor o nucli de Gauss.

Proposició 3.7 (Propietats de la solució fonamental). *Per tot $(x_0, t_0) \in \mathbb{R}^n \times (0, \infty)$ es compleix:*

- 1) $G(x, t) > 0$
- 2) $\phi_t(x, t) - \Delta \phi(x, t) = 0$
- 3) $\phi(x, t) \in C^\infty(\mathbb{R}^n, (0, \infty))$
- 4) $\int_{\mathbb{R}^n} \phi(x, t) dx = 1$

Demostració.

- 1) La prova és trivial.
- 2) Aquesta propietat es compleix per construcció.

3) La funció $\phi(x, t)$ és producte de dues funcions C^∞ :

$$g_1(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}}$$

$$g_2(x) = e^{-\frac{|x|^2}{4t}}$$

amb derivades contínues $\forall(x, t) \in \mathbb{R}^n \times (0, \infty)$.

4) Aquesta propietat es compleix per construcció.

□

3.3.1 Delta de Dirac

En aquesta secció estudiarem el comportament de la solució fonamental trobada a la secció anterior. Observem què succeeix a prop de l'instant inicial $t = 0$, $\forall x \in D_T$, si $x \neq 0$

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} e^{-\frac{|x|^2}{4t}} = 0,$$

en canvi, si $x = 0$

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} = +\infty.$$

Si interpretem la solució fonamental com la concentració de la calor en x a temps t dedim que a l'inici ($t = 0$) la calor tendeix a concentrar-se tota a l'origen ($x = 0$). Aquest comportament segueix la distribució de Dirac.

Definició 3.8 (Delta de Dirac). *La delta de Dirac, denotada per $\delta(x)$, és una funció generalitzada que satisfà:*

- $\delta(x) = 0, \quad x \neq 0$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$

No hem d'entendre la delta de Dirac com una funció definida a anàlisi ja que no té, per exemple, un valor per cada punt, sino com una distribució. Si volem visualitzar $\delta(x)$ hem de considerar una funció de variable real x que sigui nula fora d'un petit domini d'amplitud ϵ al voltant de $x = 0$ i que a l'interior d'aquest domini sigui 1. Si prenem el límit $\epsilon \rightarrow 0$ tindrem una imatge pròxima a la distribució de Dirac. A la Figura 2 trobareu dues imatges que representen la funció $G(x, t)$ de la definició 3.6 amb valors de t propers a zero per poder aproximar gràficament el que és la Delta de Dirac.

Enumerem dues propietats de la delta de Dirac que ens seran útils al proper capítol.

Proposició 3.9. *Propietats de la delta de Dirac:*

1) *Si $f(x)$ és una funció contínua:*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0).$$

2) *Si fem un canvi d'origen, aleshores tenim que:*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - a)dx = f(a).$$

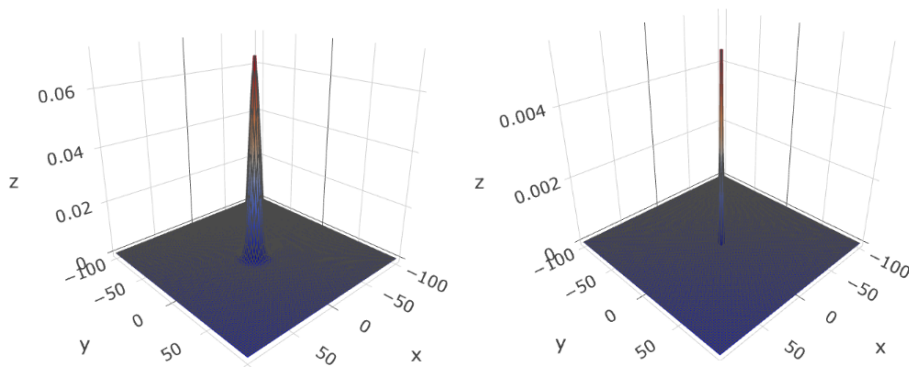


Figura 2: Representació $G(x, t)$

3.4 El problema global de Cauchy ($n = 1$)

Què succeiria si a l'inici del problema cada punt de la barra comencés amb una temperatura diferent? Trobar una resposta a aquesta pregunta equival a trobar una solució al següent problema:

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = 0, & \text{en } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ u(x, 0) = g(x), & \text{en } \mathbb{R}, \end{cases}$$

on $g(x)$ és una funció coneguda. Farem la deducció de quina és la solució d'aquest problema de Cauchy i seguidament ho formalitzarem en un teorema.

Aquest problema modela l'evolució de la temperatura al llarg d'una barra on cada punt ha començat amb una temperatura diferent. Interpretem les dades del problema per poder arribar a la solució: observem que $u(x, t)dx$ ens donarà la concentració a l'interior de l'interval $(x, x + dx)$ al temps t . Per tant $g(y)dy$ representa la concentració en l'interval $(y, y + dy)$ en $t = 0$. Recordant les propietats de la delta de Dirac, distribució que segueix la solució fonamental, sabem que $G(x - y, t)$ també és solució i representa la concentració en x al temps t causat per una unitat de massa, i aleshores $G(x - y, t)g(y)dy$ representa la concentració en x al temps t causat per la difusió de la massa $g(y)dy$.

Per la propietat lineal de l'equació de la calor podem calcular la concentració total com la suma de les petites concentracions. Això ve donat per la següent fórmula:

$$u(x, t) = \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)g(y)dy = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4t}} g(y)dy. \quad (3.16)$$

El següent teorema demostra que, sota la hipòtesi sigui $g(x)$ una funció acotada, $u(x, t)$ és solució del problema de Cauchy plantejat.

Teorema 3.10. *Sigui $g \in C(\mathbb{R})$ acotada, i $u(x, t)$ definida com a 3.16, aleshores*

- 1) $u(t, x) \in C^\infty(\mathbb{R} \times (0, \infty))$
- 2) $u_t(x, t) - u_{xx}(x, t) = 0 \quad (x, t) \in (\mathbb{R} \times (0, \infty))$
- 3) $\lim_{(x,t) \rightarrow (x_0,t)} u(x, t) = g(x_0) \quad \forall x \in \mathbb{R}$
- 4) $|u(x, t)| \leq \sup_{x \in \mathbb{R}} |g(x)|$

Demostració.

- 1) Es demostra amb la regla de Leibniz.
- 2) És conseqüència del punt anterior i la propietat 2 de la solució fonamental.

$$u_t(x, t) - u_{xx}(x, t) = \int_{\mathbb{R}} [(G_t - G_{xx})(x - y, t)]g(y)dy = 0,$$

ja que $G(x - y, t)$ és solució de l'equació de la calor.

- 3) Siguin $x_0 \in \mathbb{R}, \epsilon > 0$ fixes, agafem $\delta > 0$ tal que

$$|g(y) - g(x_0)| < \epsilon \quad \text{si} \quad |y - x_0| < \delta \quad \forall y \in \mathbb{R}.$$

Aleshores, si $|x - x_0| < \frac{\delta}{2}$ i amb la propietat $\int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)dy = 1$ tenim doncs

$$\begin{aligned} |u(x, t) - g(x_0)| &= \left| \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)g(y)dy - g(x_0) \right| \\ &= \left| \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)g(y)dy - g(x_0) \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)dy \right| \\ &= \left| \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)(g(y) - g(x_0))dy \right| \\ &\leq \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)|g(y) - g(x_0)|dy \\ &= \int_{B(x_0, \delta)} G(x - y, t)|g(y) - g(x_0)|dy + \int_{\mathbb{R} - B(x_0, \delta)} G(x - y, t)|g(y) - g(x_0)|dy := I_1 + I_2. \end{aligned}$$

I ara

$$\begin{aligned} I_1 &:= \int_{B(x_0, \delta)} G(x - y, t)|g(y) - g(x_0)|dy \\ &\leq \epsilon \int_{B(x_0, \delta)} G(x - y, t)dy \\ &\leq \epsilon \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t)dy = \epsilon. \end{aligned}$$

A més, si $|x - x_0| \leq \frac{\delta}{2}$ i $|y - x_0| \geq \delta$, aleshores

$$|y - x_0| \leq |y - x| + \frac{\delta}{2} \leq |y - x| + \frac{1}{2}|y - x_0|.$$

Per tant $|y - x| \geq \frac{1}{2}|y - x_0|$. I per tant, ara tenim

$$I_2 \leq 2\|g\|_{\infty} \int_{\mathbb{R} - B(x_0, \delta)} G(x - y, t)dy$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{C}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}-B(x_0, \delta)} e^{-\frac{|y-x|^2}{4t}} dy \\
&\leq \frac{C}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}-B(x_0, \delta)} e^{-\frac{|y-x_0|^2}{16t}} dy \\
&= C \int_{\mathbb{R}-B(x_0, \frac{\delta}{\sqrt{t}})} e^{-\frac{|z|^2}{16}} dz \xrightarrow{t \rightarrow 0^+} 0.
\end{aligned}$$

Per tant, si $|x - x_0| < \frac{\delta}{2}$ i $t \rightarrow 0$ suficientment petita, obtenim $|u(x, t) - g(x_0)| < 2\epsilon$.

4) Aquest apartat es demostra fent servir el canvi de variable $z = x - y$

$$\begin{aligned}
|u(x, t)| &= \left| \int_{\mathbb{R}} G(x - y, t) g(y) dy \right| \\
&= \left| \int_{\mathbb{R}} G(z, t) g(x - z) dz \right| \\
&\leq \int_{\mathbb{R}} G(z, t) |g(x - z)| dz \\
&\leq \int_{\mathbb{R}} G(z, t) \sup_{x, z \in \mathbb{R}} |g(x - z)| dz \\
&= \sup_{x \in \mathbb{R}} |g(x)| \int_{\mathbb{R}} G(z, t) dz = \sup_{x \in \mathbb{R}} |g(x)|.
\end{aligned}$$

Així, queda demostrada la desigualtat.

□

Ara doncs ja hem demostrat que (3.16) és la solució del problema global de Cauchy, el següent pas és provar que aquesta solució és única, per això ens caldrà el principi global del màxim que anunciarem seguidament.

Teorema 3.11 (Principi global del màxim). *Sigui z continua en $\mathbb{R} \times [0, T]$, amb les derivades z_x, z_{xx}, z_t contínues en $\mathbb{R} \times (0, T)$, tal que, en $\mathbb{R} \times (0, T)$:*

$$z_t - z_{xx} \leq 0 \quad (\text{resp. } \geq 0)$$

$$z(x, t) \leq Ce^{Ax^2} \quad \left(\text{resp. } z(x, t) \geq -Ce^{Ax^2} \right), \quad (3.17)$$

on $C > 0$. Aleshores

$$\sup_{\mathbb{R} \times [0, T]} z(x, t) \leq \sup_{\mathbb{R}} z(x, 0) \quad \left(\text{resp. } \inf_{\mathbb{R} \times [0, T]} z(x, t) \geq \inf_{\mathbb{R}} z(x, 0) \right)$$

Demostració. Aquesta prova es troba al Teorema 2.16 del llibre [4] de les referències del treball. \square

Necessitarem el següent corol·lari per demostrar el teorema d'unicitat.

Corol·lari 3.12. *Suposem u solució de*

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = 0 & \text{en } \mathbb{R} \times (0, T) \\ u(x, 0) = 0 & \text{en } \mathbb{R}, \end{cases}$$

continua en $\mathbb{R} \times [0, T]$, amb derivades u_x, u_{xx}, u_t contínues en $\mathbb{R} \times (0, T)$. Si $|u|$ satisfà (3.17), aleshores $u \equiv 0$.

Demostració. Del teorema (3.11) tenim

$$0 = \inf_{\mathbb{R}} u(x, 0) \leq \inf_{\mathbb{R} \times [0, T]} u(x, t) \leq \sup_{\mathbb{R} \times [0, T]} u(x, t) \leq \sup_{\mathbb{R}} u(x, 0) = 0,$$

per tant, $u \equiv 0$. \square

Ara anunciarem i demostrarem el teorema d'unicitat.

Teorema 3.13. *sigui g una funció contínua en \mathbb{R} , tal que*

$$|g(x, t)| \leq Ce^{Ax^2} \quad \text{en } \mathbb{R} \times (0, T),$$

i sigui f i les seves derivades f_t, f_x, f_{xx} contínues i acotades en $\mathbb{R} \times [0, T]$. Aleshores el problema de Cauchy (3.4) té una única solució u en $\mathbb{R} \times (0, T)$ donada per (3.16).

Demostració. Siguin u i v solucions del problema de Cauchy (3.4), aleshores $w = u - v$ també és solució del problema amb $f = g = 0$ i aleshores es satisfan les hipòtesis del corol·lari 3.12, per tant $w = 0$, és a dir u i v són la mateixa solució. \square

4 Mètodes numèrics per l'equació de la calor

Ja hem parlat al capítol anterior sobre el problema de Cauchy del problema de la calor, en aquest capítol trobarem la teoria utilitzada per resoldre el problema fent ús de mètodes numèrics. Un dels mètodes més comuns és el mètode de les diferències finites, que implica la discretització de l'espai i del temps i la resolució de l'equació de la transferència de calor en cada punt de l'espai i en cada pas de temps.

Un altre mètode comú és el mètode dels elements finits, que implica la discretització de l'espai en elements finits i la resolució de l'equació de la transferència de calor en cada element. Aquest mètode és eficient en dominis més generals, però com el nostre domini de treball serà quadrat farem servir el mètode de les diferències finites que no funciona tan precís en dominis més generals com en espais quadrats i rectangulars.

Ambdós mètodes requereixen l'especificació de les condicions inicials i de frontera pel problema, així com la selecció d'un tamany de pas adequat i l'ús d'un algoritme d'iteració per resoldre l'equació de la transferència de calor en cada pas de temps.

Cal tenir en compte que la solució obtinguda fent ús de mètodes numèrics és una aproximació i pot no ser completament precisa. No obstant, aquests mètodes són útils per a la resolució de problemes complexos i per obtenir una comprensió aproximada de com la temperatura canvia amb el temps.

L'objectiu d'aquest capítol és resoldre el següent problema de Cauchy fent servir la teoria de mètodes numèrics que s'explicarà tot seguit.

$$\begin{cases} u_t - \Delta u = f(x, t) & \text{en } \Omega = (0, 1)^2, \quad \forall t \in (0, T) \\ u = g(x, t) & \text{amb } x \in \partial\Omega \quad \forall t \in (0, T) \end{cases}$$

Per poder resoldre el problema farem ús del mètode de les diferències finites i per tant haurem de discretitzar dos cops, primer discretitzarem l'espai en una malla de punts equiespaiats i després, en una segona part, realitzarem la discretització del temps.

4.1 Mètodes de semidiscretització

En aquesta secció discretitzarem l'espai dividint-lo en una malla de punts o cel·les espacials. Això es fa per poder aproximar l'equació de la transferència de calor en cada punt de la malla i, així, obtenir una solució numèrica pel problema.

Per discretitzar l'espai, es tria una distància finita (coneguda com a tamany de pas) entre cada parella de punts consecutius de la malla. Això permet dividir l'espai en un conjunt finit de cel·les. A continuació, s'assigna una temperatura a cada punt de la malla en un temps inicial donat i s'utilitza l'equació de la transferència de calor per calcular la temperatura en cada punt en el següent pas de temps.

És important tenir en compte que el tamany de pas s'ha de triar amb cura per garantir la precisió de la solució. Si el tamany de pas és massa gran, la solució pot ser molt poc precisa. D'altra banda, si el tamany de pas és massa petit, el procés de càlcul pot ser molt lent i requerir molt temps de còmput.

Per implementar el mètode de les diferències finites, és necessari seguir una sèrie de passos:

- 1) Definir l'equació diferencial parcial que es vol resoldre i establir les condicions de frontera.

- 2) Discretitzar el domini de l'equació diferencial utilitzant una malla fina, el que significa dividir el domini en una sèrie de punts equiespaiats.
- 3) Utilitzar una fórmula de diferències finites per aproximar la derivada en cada punt de la malla.
- 4) Resoldre el sistema d'equacions resultant per obtenir els valors de la funció en cada punt de la malla.
- 5) Utilitzar els valors de la funció de la malla per obtenir una aproximació de la solució de l'equació diferencial en el domini discretitzat.

*Si és necessari, repetir els passos 2-5 utilitzant una malla més fina per obtenir una solució més precisa.

Hi ha moltes fórmules de diferències finites diferents que es poden utilitzar per aproximar la derivada d'una funció en un punt donat. Algunes de les fórmules més comunes són:

- 1) Fórmula de les diferències finites cap endavant: aquesta fórmula s'utilitza per aproximar la derivada en un punt utilitzant el valor de la funció en aquest punt i en un punt adjacent posterior. La fórmula s'escriu com a:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

- 2) Fórmula de les diferències finites cap enrere: aquesta fórmula s'utilitza per aproximar la derivada en un punt utilitzant el valor de la funció en aquest punt i en un punt adjacent anterior. La fórmula s'escriu com a:

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

- 3) Fórmula de les diferències finites centrada: aquesta fórmula s'utilitza per aproximar la derivada en un punt utilitzant el valor de la funció en aquest punt i en dos punts adjacents, un anterior i un altre posterior. La fórmula s'escriu com a:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$

on h és un valor petit que s'utilitza per calcular l'aproximació de la derivada.

En aquest capítol farem servir la fórmula de les diferències finites centrada ja que aquesta té un error d'ordre h^2 i l'error de les dues primeres fórmules es major, d'ordre h . Discretitzarem l'espai considerant la malla de punts següent:

$$\{(x_i, y_j) : i = 0, \dots, N+1, j = 1, \dots, N+1\} \quad \text{per la regió } \Omega \text{ on } N \in \mathbb{N}, \quad (4.1)$$

on $x_i = \frac{i}{N+1}$ i $y_j = \frac{j}{N+1}$.

Observació 4.1. Anomenarem $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ al valor de la solució.

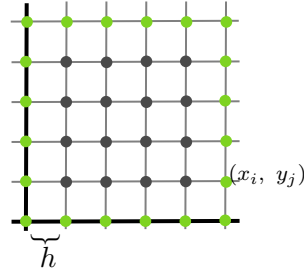


Figura 3: Malla de punts equiespaiats

Ara fent servir la fórmula de les diferències finites centrada obtenim:

$$\begin{aligned}
 -\Delta u &\approx - \left[\frac{1}{h^2} (u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \frac{1}{h^2} (u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}) \right] \\
 &\approx -\frac{1}{h^2} [-4u_{i,j} + u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}]. \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

Si estem interessats en resoldre l'estat estacionari, on $u_t = 0$, el que hem de resoldre és $-\Delta u = f(x)$, això és l'equivalent a resoldre:

$$-\frac{1}{h^2} [-4u_{i,j} + u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}] \approx f_{i,j} \quad \text{per } i, j = 1, \dots, N. \quad (4.3)$$

Notem que els valors u_{ij} a la frontera, és a dir, per $i, j = 0, N+1$ no són incògnites, ja que el seu valor ve donat per la condició de frontera g . Per tant, finalment, hem de resoldre un sistema amb N^2 incògnites i N^2 equacions. En passar-ho a forma matricial obtindrem un sistema $Au = b$ on A és una matriu definida a blocs tal que:

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} T & -I & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -I & T & -I & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -I & T & -I & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -I & T & -I & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -I & T & -I \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -I & T \end{pmatrix},$$

on la matriu $-I$ és la matriu identitat amb -1 a la diagonal i la matriu T és de la forma:

$$T = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -1 & 4 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Sigui u el vector de les incògnites i b el terme independent, si ho endrecem en ordre

lexicogràfic respecte els índexs, aleshores:

$$u = \begin{pmatrix} u_{1,1} \\ \vdots \\ u_{N,1} \\ u_{1,2} \\ \vdots \\ u_{N,2} \\ \vdots \\ u_{1,N} \\ \vdots \\ u_{N,N} \end{pmatrix},$$

i el vector b conté els termes independents que seran $h^2 f_{ij}$ més els termes g_{ij} de les equacions (4.3) en les que apareixen valors de la u que pertanyen a la frontera.

Ara farem una prova que serà important en els següents capítols. Veurem que la matriu A definida abans, és una matriu simètrica i definida positiva. Primer veiem que és simètrica ja que les matrius T i $-I$ ho són. Per veure que és definida positiva ho podem fer provant que tots els seus VAPs són reals i estrictament positius, per això necessitarem el teorema de Gershgorin.

Teorema 4.2 (Teorema dels cercles de Gershgorin). *Sigui A una matriu quadrada de dimensió n amb valors propis $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Aleshores els valors propis de A estan continguts a la unió, en el pla complex, dels discs:*

$$D(a_{ii}, r_i) = \{z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq r_i\}, \quad i = 1, \dots, n,$$

on $r_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$, és a dir $\text{Spec}(A) \subset \cup_{i=1}^n D_i(a_{ii}, r_i)$. Els conjunts $D_i(a_{ii}, r_i)$ s'anomenen cercles de Gershgorin.

Notem aleshores que amb la nostra matriu A tenim 2 discs $\overline{B(4, 2)}$, 2 més $\overline{B(4, 3)}$ i la resta són $\overline{B(4, 4)}$, per tant tots els VAPs de la matriu A es troben dins del disc $\overline{B(4, 4)}$, és a dir $\text{Spec}(A) \subset [0, 8]$.

Hem vist que tots els VAPs són reals positius i pertanyen a l'interval $[0, 8]$, només queda veure que el 0 no és un dels VAPs de A .

Per demostrar-ho suposarem $0 \in \text{Spec}(A)$ i arribarem a contradicció.

$$0 \in \text{Spec}(A) \iff \exists v \neq 0 \quad \text{tal que} \quad Av = 0,$$

hem de trobar v tal que compleixi

$$4v_{i,j} - v_{i-1,j} - v_{i+1,j} - v_{i,j-1} - v_{i,j+1} = 0,$$

és a dir:

$$v_{i,j} = \frac{v_{i-1,j} + v_{i+1,j} + v_{i,j-1} + v_{i,j+1}}{4}. \quad (4.4)$$

Ara jo agafo $v_{i,j}$ el valor màxim, com que aquest és de la forma (4.4) vol dir que el valor màxim és el promig de valors menors, per tant:

$$v_{i,j} = v_{i-1,j} = v_{i+1,j} = v_{i,j-1} = v_{i,j+1},$$

però als extrems de la malla de punts hi ha punts que són 0, per tant hauria de ser $v = 0$, així arribem a contradicció.

Per tant la matriu A del sistema és simètrica i definida positiva, i podrem aplicar el mètode del gradient conjugat (veure secció 4.2.4).

Aquesta primera part és la teoria necessària per poder aproximar $-\Delta u \approx Au$, ara ens trobem davant d'un sistema d'EDOs $u_t - \Delta u = f(x, t)$ que hem de resoldre amb els mètodes explicats a continuació.

4.2 Mètodes numèrics per EDOs

Enunciarem tres mètodes numèrics per EDOs: *Euler explícit*, *Euler implícit* i *Crank-Nicolson*, estudiarem l'ordre i l'estabilitat per poder escollir el mètode més acurat per fer els càlculs. És en aquesta part on haurem de fer la discretització del temps per poder acabar de resoldre el nostre sistema.

Aquests mètodes tenen com a objectiu trobar una aproximació de la funció $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ del sistema

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, t) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases}$$

Definició 4.3 (Ordre d'un mètode numèric). *Diem que un mètode numèric és d'ordre p si l'error local és d'ordre $p+1$ i l'error global és d'ordre p .*

Definició 4.4 (Estabilitat d'un mètode numèric). *Un mètode numèric és estable quan, aplicat al sistema*

$$\begin{cases} \dot{x} = -\lambda x, & \lambda > 0 \\ x(0) = x_0, \end{cases}$$

produeix una solució acotada $\forall \Delta t > 0, \forall \lambda > 0$.

4.2.1 Euler explícit

El mètode d'Euler explícit és un mètode per calcular valors de cada punt per un temps futur basant-se en el valor present del punt i els seus veïns.

Aquest mètode troba una aproximació fent servir la definició de derivada per la dreta de la funció u respecte la variable de temps t .

$$f(x, t) = x_t(t) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t},$$

aïllant tenim

$$x(t + \Delta t) \approx x(t) + \Delta t f(x, t).$$

Per tant el mètode d'Euler explícit és:

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n, t_n) \\ t_{n+1} = t_n + \Delta t \end{cases}$$

Ordre del mètode

Per calcular l'ordre del mètode aplicarem la fórmula de Taylor per tal de calcular l'error local.

Un pas del mètode d'Euler explícit és:

$$x_1 = x_0 + \Delta f(x_0, t_0),$$

ara el desenvolupament de Taylor de la solució exacta és:

$$\begin{aligned} x(t_1) &= x_0 + \dot{x}_0 \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{x}_0 (\Delta t)^2 + \mathcal{O}((\Delta t)^2) \\ &= x_0 + f(x_0, t_0) \Delta t + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, t_0) f(x_0, t_0) + \frac{\partial f}{\partial t}(x_0, t_0) \right] (\Delta t)^2 + \mathcal{O}((\Delta t)^3). \end{aligned}$$

Notem que els dos primers termes coincideixen, en canvi, al mètode d'Euler no hi ha un tercer terme que si que apareix quan apliquem la fórmula de Taylor, aquest terme d'ordre 2 ens indica que l'ordre de l'error local és 2, el global serà 1 i per tant l'ordre del mètode d'Euler explícit és 1.

Estabilitat del mètode

Fent servir la definició d'estabilitat apliquem:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t(-\lambda x_n) = (1 - \lambda \Delta t)x_n$$

$$x_n = (1 - \lambda \Delta t)^n x_0.$$

La solució serà acotada si ho és

$$\begin{aligned} (1 - \lambda \Delta t)^n &\iff \\ \iff |1 - \lambda \Delta t| \leq 1 &\iff \\ \iff 0 \leq \lambda \Delta t \leq 2, & \end{aligned}$$

així doncs, el mètode l'Euler explícit no és estable.

4.2.2 Euler implícit

Als mètodes implícits l'equació que es vol resoldre tindrà més d'una incògnita i per tant no podrà ser resolta de forma explícita.

El mètode d'Euler implícit troba una aproximació fent servir la definició de derivada per l'esquerra de la funció u respecte la variable de temps t .

$$f(x, t) = x_t(t) \approx \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t},$$

aïllant tenim

$$x(t + \Delta t) \approx x(t) + \Delta t f(x, t + \Delta t).$$

Per tant el mètode d'Euler implícit és:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_{n+1}, t_{n+1}).$$

Ordre del mètode

Per calcular l'ordre d'aquest mètode farem el desenvolupament de Taylor per compararlo amb un pas del mètode. Comencem calculant la sèrie de Taylor de la solució exacta:

$$x(t_1) = x_0 + \Delta t \dot{x}_0 + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \ddot{x}_0 + \mathcal{O}((\Delta t)^3).$$

El mètode d'Euler implícit aproxima $x(t_1)$ pel valor \tilde{x}_1 que resol l'equació:

$$\tilde{x}_1 = x_0 + \Delta t f(\tilde{x}_1, t_1).$$

Calculem la sèrie de Taylor per aquest valor per $\Delta t = 0$ per compararla amb la de $x(t_1)$ i obtenir l'ordre del mètode:

$$\tilde{x}_1 = x_0 + \Delta t \frac{\partial x_1}{\partial \Delta t}(t_0) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \frac{\partial^2 x_1}{\partial (\Delta t)^2}(t_0) + \mathcal{O}((\Delta t)^3)$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial \Delta t} = f(x_1, t_1) + \Delta t \left[\frac{\partial f}{\partial t}(x_1, t_1) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(x_1, t_1) \frac{\partial x_1}{\partial \Delta t} \right].$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial \Delta t}(t_0) = f(x_0, t_0).$$

Finalment notem que el terme de grau zero x_0 i el primer terme avaluat en t_0 coincideixen amb el mètode, en canvi el terme d'ordre 2, si fem el càlcul de $\frac{\partial^2 x_1}{\partial (\Delta t)^2}$ obtenim un resultat diferent al terme del desenvolupament de Taylor de la solució exacta \ddot{x}_0 , per tant l'error local és d'ordre 2, el global d'ordre 1, que vol dir que el mètode d'Euler implícit és d'ordre 1.

Estabilitat del mètode

Fent servir la definició d'estabilitat apliquem:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t(-\lambda x_{n+1})$$

$$(1 + \lambda \Delta t)x_{n+1} = x_n$$

$$x_{n+1} = \frac{x_n}{(1 + \lambda \Delta t)^n}$$

$$x_n = \frac{x_0}{(1 + \lambda \Delta t)^n}.$$

Notem que el denominador $1 + \lambda \Delta t$ serà sempre major a 1, ja que $\Delta t > 0$, $\lambda > 0$, per tant, x_n tendirà a 0, així doncs, el mètode d'Euler implícit és estable.

4.2.3 Crank-Nicolson

El mètode de Crank-Nicolson és un mètode numèric utilitzat per resoldre equacions diferencials parcials (EDPs) en dues o més variables. S'utilitza sovint per resoldre EDPs que tenen una dependència temporal i espacial, com ara les equacions de difusió o les equacions d'ona.

El mètode de Crank-Nicolson es basa en el mètode de diferències finites i es caracteritza per utilitzar diferències finites centrat-centrat tant en el temps com en l'espai per aproximar la solució de l'EDP en una malla de punts discretitzada del domini. Això significa que s'utilitza una fórmula de diferències finites centrada tant per aproximar les derivades espacials com les temporals.

Un dels avantatges del mètode de Crank-Nicolson és que és un mètode de segon ordre, el que significa que la precisió de la solució augmenta de manera lineal amb la mida de la malla temporal. A més, el mètode de Crank-Nicolson és un mètode implícit, el que significa que la solució en el temps $t + 1$ depèn tant dels valors coneguts en el temps t com dels valors desconeguts en el temps $t + 1$. Això fa que el mètode sigui més estable numèricament que el mètode explícit, que només utilitza els valors coneguts en el temps t per calcular la solució en el temps $t + 1$.

Per aproximar la solució d'una equació diferencial parcial (EDP) utilitzant el mètode de Crank-Nicolson, primer hem de discretitzar l'interval de temps i l'espai. Això significa dividir l'interval de temps en un conjunt de passos de temps més petits, cada temps t_n serà el temps anterior t_{n-1} afegint un pas de temps que anomenarem h_t , és a dir, $t_n = t_{n-1} + h_t$, i dividir l'espai en un conjunt de punts discrets, per això farem servir una malla de punts com hem fet anteriorment.

En primer lloc, farem servir el mètode de Crank-Nicolson per resoldre la següent EDO:

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, t) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad (4.5)$$

Ara, doncs, busquem calcular per tot n , una aproximació de x . El mètode més simple, al qual ens limitarem, és el θ -mètode on $\theta \in [0, 1]$ és un paràmetre: consisteix a reemplaçar l'equació diferencial (4.5) per l'esquema de diferències finites:

$$\frac{1}{h_t}(x_{n+1} - x_n) = \theta f(x_{n+1}) + (1 - \theta)f(x_n),$$

amb el qual, considerant $\theta = \frac{1}{2}$ obtenim el mètode de Crank-Nicolson.

Ordre del mètode

Per calcular l'ordre d'aquest mètode primer aplicarem Taylor a x en t_n :

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + h_t \dot{x}(t_n) + \frac{h_t^2}{2!} \ddot{x}(t_n) + \mathcal{O}(h_t^3), \quad (4.6)$$

ara aplicant-ho:

$$\begin{aligned} \theta f(x_{n+1}) + (1 - \theta)f(x_n) &= \theta \dot{x}(t_{n+1}) + (1 - \theta)\dot{x}(t_n) \\ &= \theta[\dot{x}(t_n) + h_t \ddot{x}(t_n) + \mathcal{O}(h_t^2)] + (1 - \theta)\dot{x}(t_n) \end{aligned}$$

$$= \dot{x}(t_n) + \theta h_t \ddot{x}(t_n) + \mathcal{O}(h_t^2).$$

Sigui ara \tilde{x} una aproximació de x , tenim doncs:

$$\frac{1}{h_t}(\tilde{x}_{n+1} - x_n) = \theta f(\tilde{x}_{n+1}) + (1 - \theta)f(x_n) + \epsilon_n$$

$$\frac{1}{h_t}(\tilde{x}_{n+1} - x_n) = \dot{x}(t_n) + \theta h_t \ddot{x}(t_n) + \mathcal{O}(h_t^3).$$

Aïllant \tilde{x}_{n+1} :

$$\tilde{x}_{n+1} = x(t_n) + h_t \dot{x}(t_n) + \theta h_t^2 \ddot{x}(t_n) + \mathcal{O}(h_t^3),$$

juntament amb la igualtat inicial (4.6)

$$\tilde{x}_{n+1} - x_{n+1} = \theta h_t^2 \ddot{x}(t_n) - \frac{h_t^2}{2} \ddot{x}(t_n) = (\theta - \frac{1}{2})h_t^2 \ddot{x}(t_n).$$

Com el mètode Crank-Nicolson és quan $\theta = \frac{1}{2}$ trobem que l'error local és d'ordre 3 i l'error global és d'ordre 2, per tant el mètode de Crank-Nicolson és d'ordre 2.

Estabilitat del mètode

Fent servir la definició d'estabilitat apliquem:

$$\frac{1}{h_t}(x_{n+1} - x_n) = \theta(-\lambda x_{n+1}) + (1 - \theta)(-\lambda x_n)$$

$$x_{n+1} = x_n + \theta h_t(-\lambda x_{n+1}) + (1 - \theta)h_t(-\lambda x_n)$$

$$(1 + \theta h_t \lambda)x_{n+1} = (1 - (1 - \theta)h_t \lambda)x_n$$

$$x_{n+1} = \frac{1 - (1 - \theta)\lambda h_t}{1 + \theta \lambda h_t} x_n$$

$$x_n = \left(\frac{1 - (1 - \theta)\lambda h_t}{1 + \theta \lambda h_t}\right)^n x_0,$$

és a dir, el mètode Crank-Nicolson és estable si, i només si

$$\left| \frac{1 - (1 - \theta)\lambda h_t}{1 + \theta \lambda h_t} \right| \leq 1$$

$$-1 \leq \frac{1 - (1 - \theta)\lambda h_t}{1 + \theta \lambda h_t} \leq 1$$

Estudiem per separat les dues desigualtats. De la desigualtat de l'esquerra obtenim:

$$-1 - \theta \lambda h_t \leq 1 - (1 - \theta)\lambda h_t$$

$$-2 \leq [(\theta - 1) + \theta]\lambda h_t$$

$$-2 \leq (2\theta - 1)\lambda h_t$$

$$\frac{-2 + \lambda h_t}{2\lambda h_t} \leq \theta$$

$$-\frac{1}{\lambda h_t} + \frac{1}{2} \leq \theta$$

Com la desigualtat s'ha de complir $\forall \lambda > 0, \forall h_t > 0$, la part esquerra de la desigualtat $-\frac{1}{\lambda h_t} + \frac{1}{2}$ serà com a màxim $\frac{1}{2}$, per tant:

$$\frac{1}{2} \leq \theta.$$

Ara de la segona desigualtat obtenim:

$$1 - (1 - \theta)\lambda h_t \leq 1 + \theta\lambda h_t$$

$$1 - 1 \leq \theta\lambda h_t + (1 - \theta)\lambda h_t$$

$$0 \leq \lambda h_t, \tag{4.7}$$

cert $\forall \theta$. Per tant com hem dit al principi $\theta \in [0, 1]$ i de les desigualtats hem tret la restricció $\frac{1}{2} \leq \theta$, aleshores $\theta \in [\frac{1}{2}, 1]$ per a que el mètode sigui estable. Sabem que el mètode de Crank-Nicolson és per $\theta = \frac{1}{2}$, per tant el mètode de Crank-Nicolson és un mètode estable.

Aplicació del mètode

A continuació es troba l'explicació de com passa aquest mètode teòric a la pràctica, veurem com es fa servir per fer els càlculs numèrics. Com hem comentat al final del capítol 4.1 tenim l'aproximació d'un sistema matricial d'una part del problema que volem resoldre, $-\Delta u \approx Au$, completant l'equació, sigui I la matriu identitat, hem de trobar la solució al següent sistema matricial:

$$\dot{u} + Au = f_n \quad \text{on} \quad f_n = f(t_n).$$

Per trobar la solució fent servir el mètode de Crank-Nicolson l'apliquem sobre aquesta última equació, obtenint:

$$\frac{1}{h_t}(u_{n+1} - u_n) = \theta[-Au_{n+1} + If_{n+1}] + (1 - \theta)[-Au_n + If_n]$$

$$\frac{1}{h_t}u_{n+1} - \frac{1}{h_t}u_n = -\theta Au_{n+1} + \theta f_{n+1} - (1 - \theta)Au_n + (1 - \theta)f_n$$

$$\left(\frac{1}{h_t}I + \theta A\right)u_{n+1} = \left(\frac{1}{h_t}I - (1 - \theta)A\right)u_n + \theta f_{n+1} + (1 - \theta)f_n$$

$$(I + h_t\theta A)u_{n+1} = (I - (1 - \theta)h_t A)u_n + \theta h_t f_{n+1} + (1 - \theta)h_t f_n.$$

És a dir, tot es redueix a resoldre el sistema $Mu = b$ on $M = I + \frac{1}{2}h_t A$ i $b = (I - (1 - \theta)h_t A)u_n + \theta h_t f_{n+1} + (1 - \theta)h_t f_n$. Tindrem un sistema a cada pas de temps i per resoldre aquests sistemes es pot fer amb diversos mètodes numèrics com per exemple Jacobi, Gauss-Seidel o el mètode del gradient conjugat, que com veurem a continuació és més acurat i eficient que els altres dos esmentats.

4.2.4 Mètode del gradient conjugat

El *mètode del gradient conjugat* és, en general, una manera eficient de resoldre un sistema del tipus $Ax = b$, on la matriu A és simètrica i definida positiva. El mètode es basa en fer servir direccions conjugades, això permet que el mètode convergeixi més ràpid que altres mètodes iteratius com el mètode de Jacobi o el mètode de Gauss-Seidel. S'utilitza sovint per aprofitar el fet de que la matriu que representa el sistema és simètrica i definida positiva, per tant aquest mètode és d'interès per poder resoldre el nostre exemple ja que la matriu A de la secció 4.1 és una matriu simètrica i definida positiva com ja hem demostrat anteriorment.

Com veurem més endavant, el mètode del gradient conjugat convergeix en un nombre finit de passos que és com a màxim igual a la dimensió del sistema (n), per tant, és un mètode directe. Succeeix que el mètode produeix solucions molt acurades molt abans de fer n passos. Per tant és habitual agafar aquesta solució aproximada i tractar aquest mètode com un mètode iteratiu. Això vol dir que es van fent passos del mètode fins que s'assoleix una solució aproximada que compleix amb un cert criteri de convergència.

En aquest mètode es fa servir el producte escalar $(x, y) = x^T y$ i considerem $r_k = b - Ax_k$ que és el residu del pas k . Aquest mètode consta dels següents càlculs i passos:

- Per $k = 0$ escollim x_0 , iniciem $p_0 = r_0$ i calculem (r_0, r_0) .
- Ara, per $k = 1, \dots, n$

$$\alpha_k = -\frac{(r_k, p_k)}{(p_k, Ap_k)} = -\frac{r_k^T p_k}{p_k^T Ap_k} \quad (4.8)$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k Ap_k, \quad (4.9)$$

es comprova si $\|r_{k+1}\|^2 \geq \epsilon$, si és així es continua:

$$\beta_k = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)} = -\frac{p_k^T Ar_{k+1}}{p_k^T Ap_k} \quad (4.10)$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k. \quad (4.11)$$

Notem que efectivament (4.9) calcula el residu, ja que:

$$r_{k+1} = b - Ax_{k+1} = b - A(x_k - \alpha_k p_k) = b - Ax_k + \alpha_k Ap_k = r_k + \alpha_k Ap_k.$$

Aquest mètode fa servir el que es coneix com a *direccions conjugades*. Els mètodes que fan servir aquest tipus de vectors sorgeixen quan hi ha n vectors p_0, \dots, p_{n-1} que satisfan:

$$(p_i)^T Ap_j = 0, \quad i \neq j. \quad (4.12)$$

Aquests vectors són ortogonals respecte el producte intern $(x, y) = x^T Ay$ definit per A , també s'anomenen conjugats respecte A .

Ara volem provar doncs dues coses: que el mètode convergeix en màxim n iteracions i que les direccions p_i són conjugades respecte A .

Comencem veient la prova sobre la convergència del mètode.

Teorema 4.5 (Teorema de convergència). *Si A és una matriu $n \times n$ real, simètrica i definida positiva i p_0, \dots, p_{n-1} vectors diferents de zero que satisfan (4.12), aleshores per qualsevol x_0 els iterats $x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$, on α_k és donada per (4.8), convergeix a la solució exacta de $Ax = b$ en màxim n passos.*

Notem que el teorema 4.5 garanteix, no només que convergeix sino que, a més, ho fa en un nombre finit de passos, com a màxim n .

Demostració. Primer, observem:

$$(Ax_{k+1} - b)p_j = (Ax_k - \alpha_k Ap_k - b)p_j = (Ax_k - b)p_j - \alpha_k (Ap_k)^T p_j.$$

Així, fent servir la propietat de vectors conjugats de p_j i p_k si $i \neq k$ i la definició de (4.8) si $j = k$, obtenim:

$$(Ax_{k+1} - b)^T p_j = \begin{cases} (Ax_k - b)^T p_j, & j < k \\ 0, & j = k \end{cases}$$

aleshores

$$(Ax_n - b)^T p_j = (Ax_{n-1} - b)^T p_j = \dots = (Ax_{j+1} - b)^T p_j = 0,$$

per $j = 0, \dots, n-1$ i com p_0, \dots, p_{n-1} són linearmnt independent tenim $Ax_n - b = 0$. Pot succeir que $Ax_m = b$ per alguna $m < n$, per tant ja hauriem obtingut la solució. \square

Seguirem veient que, efectivament, les direccions p_i són conjugades respecte A .

Teorema 4.6 (Teorema de les direccions conjugades). *Si A és una matriu $n \times n$ simètrica i definida positiva i sigui la solució del sistema $Ax = b$. Aleshores els vectors p_k generades pel mètode del gradient conjugat satisfan*

$$p_k^T Ap_j = 0, \quad 0 \leq j < k, \quad k = 1, \dots, n-1 \quad (4.13)$$

i $p_k \neq 0$ fins que $x_k = \tilde{x}$. Aleshores $x_m = \tilde{x}$ per algun $m \leq n$.

Demostració. Primer veurem que per les definicions de α_i (4.8), β_i (4.10), el residu (4.9) i les direccions (4.11), tenim que

$$p_j^T r_{j+1} = p_j^T r_j + \alpha_j p_j^T A p_j, \quad j = 0, 1, \dots \quad (4.14)$$

$$p_j^T A p_{j+1} = p_j^T A r_{j+1} + \beta_j p_j^T A p_j = 0, \quad j = 0, 1, \dots \quad (4.15)$$

Ara veurem que els residus $r_j = b - Ax_j$ satisfan:

$$r_k^T r_j = 0, \quad 0 \leq j < k, \quad k = 1, \dots, n-1. \quad (4.16)$$

Farem la demostració d'aquesta propietat per inducció. Asumim per hipòtesi que (4.13) i (4.16) es compleixen per algun $k < n-1$ i demostrarem que també ho fan per $k+1$. Com $p_0 = r_0$, per (4.14) provem que funciona per $k=1$. Per qualsevol $j < k$, fent servir (4.9) i (4.11) tenim

$$r_j^T r_{k+1} = r_j^T (r_k + \alpha_k A p_k) = r_j^T r_k + \alpha_k p_k^T A r_j = r_j^T r_k + \alpha_k p_k^T A (p_j - \beta_{j-1} p_{j-1}) = 0,$$

per la hipòtesi d'inducció. Per tant, hem demostrat que (4.16) val per $k+1$.

Ara tenim que, per qualsevol $j < k$, fent servir la hipòtesi d'inducció, (4.11), (4.9) i (4.16), tenim:

$$p_j^T A p_{k+1} = p_j^T A (r_{k+1} + \beta_k p_k) = p_j^T A r_{k+1} = \alpha_j^{-1} (r_{j+1} - r_j)^T r_{k+1} = 0,$$

per (4.15) tenim també que $p_k^T A p_{k+1} = 0$. Per tant, (4.13) queda demostrat per $k+1$ i la demostració per inducció queda finalitzada.

Anem a provar ara que les direccions compleixen $p_k \neq 0$, a no ser que siguem a la solució. Ho farem per reducció a l'absurd, suposem $p_m = 0$ per algun $m < n$. Aleshores fent servir (4.11) tenim:

$$\begin{aligned} 0 &= p_m^T p_m = (r_m + \beta_{m-1} p_{m-1})^T (r_m + \beta_{m-1} p_{m-1}) \\ &= r_m^T r_m + 2\beta_{m-1} r_m^T p_{m-1} + \beta_{m-1}^2 p_{m-1}^T p_{m-1} \geq r_m^T r_m, \end{aligned}$$

ja que $r_m^T p_{m-1} = 0$ per (4.14). Com $r_m = b - Ax_m = 0$ aleshores $x_m = \tilde{x}$. Per una altra banda, si p_0, \dots, p_{n-1} són totes diferent a zero, aleshores $x_m = \tilde{x}$ pel teorema 4.5. Finalment, hem suposat durant tota la prova $\alpha_i \neq 0$. Per (4.11) i (4.15) obtenim:

$$r_j^T p_j = r_j^T (r_j + \beta_{j-1} p_{j-1}) = r_j^T r_j,$$

per tant la definició de α_j és equivalent a:

$$\alpha_j = -\frac{r_j^T r_j}{p_j^T A p_j},$$

ara, si $\alpha_j = 0$, aleshores $r_j = 0$, i per tant $x_j = \tilde{x}$ i el procés pararia en x_j . \square

Ara volem veure que les dues igualtats de β_k són equivalents. Si p_j són direccions conjugades respecte A i els residus r_j són ortogonals, tenim les següents igualtats:

$$r_{k+1}^T p_{k+1} = (r_k + \alpha_k A p_k)^T p_{k+1} = r_k^T p_{k+1} = r_k^T (r_{k+1} + \beta_k p_k) = \beta_k r_k^T p_k \quad (4.17)$$

$$r_k^T p_k = r_k^T (r_k - \beta_{k-1} p_{k-1}) = r_k^T r_k, \quad (4.18)$$

aïllant de (4.17) obtenim

$$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T p_{k+1}}{r_k^T p_k},$$

i tenint en compte (4.18)

$$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}.$$

Aquesta serà la β que farem servir a la següent secció, al codi.

5 Problema contextualitzat

En aquesta secció es troba la resolució i l'explicació del problema de la calor amb mètodes numèrics. Apliquem tota la teoria detallada a l'anterior secció per resoldre numèricament el problema central d'aquest treball.

Com farem servir el mètode de les diferències finites hem escollit un espai quadrat per a que sigui més senzilla i acurada la resolució del problema.

Ens imaginem que tenim una habitació quadrada vista des de dalt amb un radiador al mig amb el qual volem escalfar la sala. L'habitació començarà amb zero graus i volem veure com es difon la calor des del moment el que engeguem el radiador i aquest es comença a escalfar i emetre calor tenint en compte que les parets donen a l'exterior que es troba a zero graus.

Com hem dit ara $\Omega = (0, 1)^2$, i considerem les equacions:

$$\begin{cases} u_t - \Delta u &= f(t, x, y) & \text{per } (x, y) \in \Omega \\ u &= g(t, x, y) & \text{per } (x, y) \in \partial\Omega. \end{cases}$$

On $f(t, x, y)$ modela el comportament del radiador, on el valor és:

$$f(t, x, y) = \begin{cases} 1000 & \text{si } (x, y) \in \overline{B_{0.1}((0, 0))} \\ 0 & \text{altrament.} \end{cases}$$

i $g(t, x, y)$ és una funció constant 0, ja que és la funció que modela el comportament de les parets, és a dir, les condicions de frontera, i les condicions inicials serà tot a temperatura zero ja que, com hem dit, l'habitació es troba a zero graus a l'inici del problema.

Volem fer servir Crank-Nicolson per aproximar numèricament la solució per $t \in [0, 1]$. El primer pas és crear una malla regular de punts per u , com hem fet en (4.1). Ara tenint present l'aproximació del Laplaciana (4.2) podem passar a un sistema matricial amb la matriu A ja coneguda de manera que tindrem $-\Delta u \approx Au$, i per tant, el que cal resoldre seguidament és:

$$\dot{u} + Au = f_n \quad \text{on} \quad f_n = f(t_n),$$

discretitzant ara el temps (secció 4.2.3) obtindrem la igualtat:

$$(I + h_t\theta A)u_{n+1} = (I - (1 - \theta)h_t A)u_n + \theta h_t f_{n+1} + (1 - \theta)h_t f_n.$$

Cal fer un incís per aclarir que les dues h que apareixen no són les mateixes, per una banda tenim el pas d'espai h que apareix quan apliquem el mètode de les diferències finites i per una altra banda tenim h_t que apareix en discretitzar el temps.

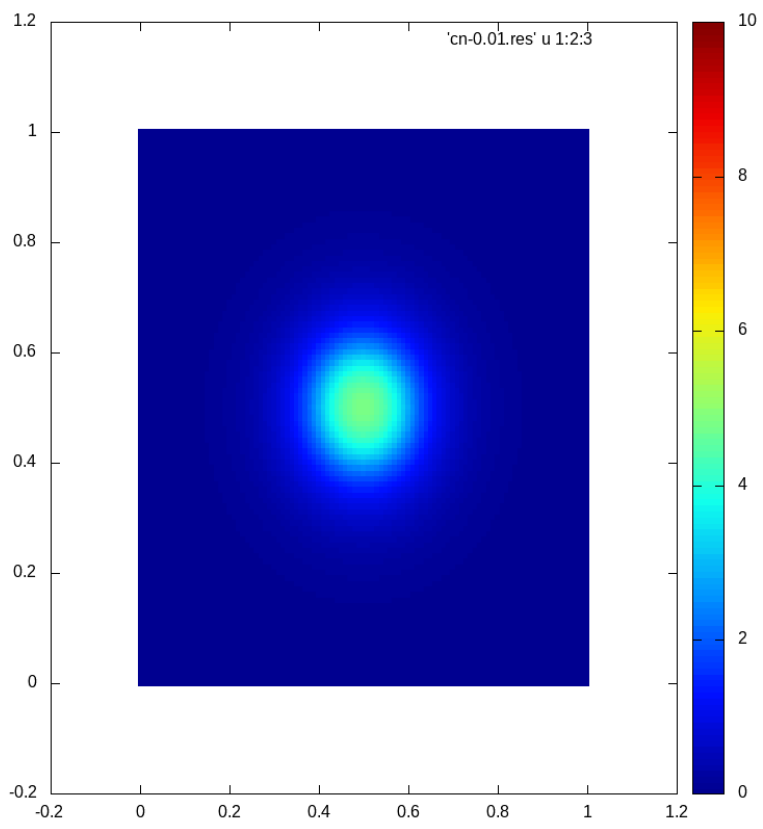
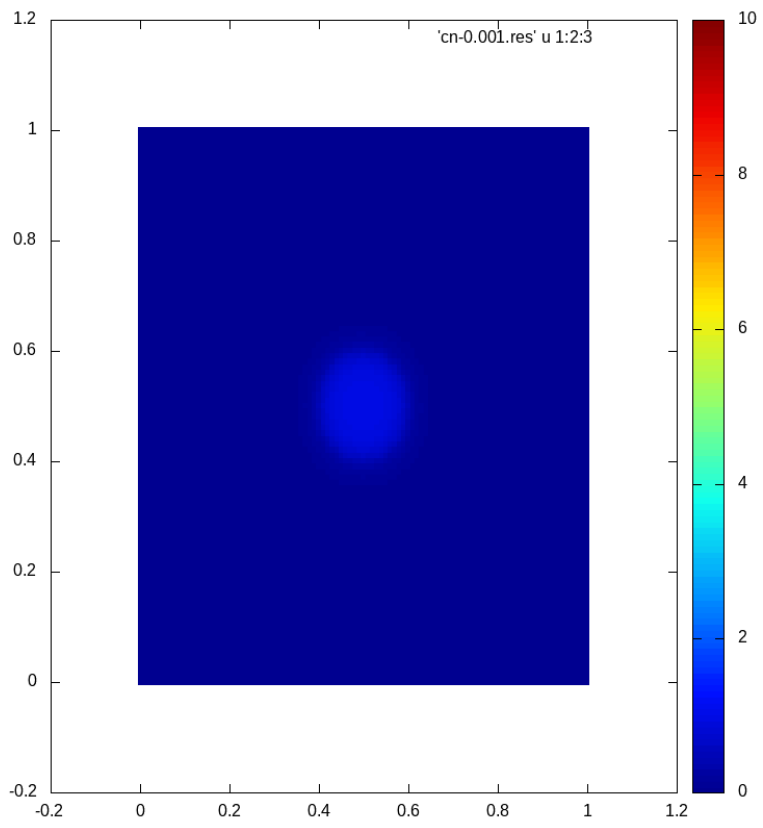
Finalment tot es resumeix en resoldre el sistema $Mx = b$ on $M = (I + h_t\theta A)$ i $b = (I - (1 - \theta)h_t A)u_n + \theta h_t f_{n+1} + (1 - \theta)h_t f_n$. És a dir, a cada pas de temps on aplicarem Crank-Nicolson haurem de resoldre un sistema de N^2 equacions, i per fer això hem aplicat el mètode del gradient conjugat que comparat amb altres mètodes com Jacobi o Gauss-Seidel és més eficient. Per últim, fer notar que efectivament podem aplicar el mètode del gradient conjugat, ja que, com hem comprovat anteriorment la matriu A és una matriu simètrica i definida positiva i per tant M també ho serà.

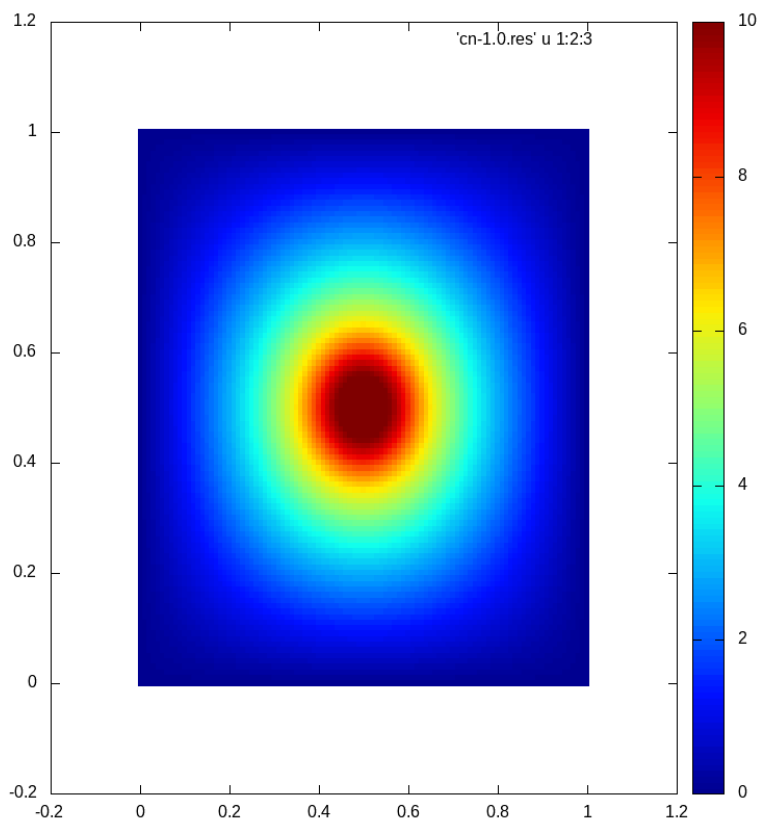
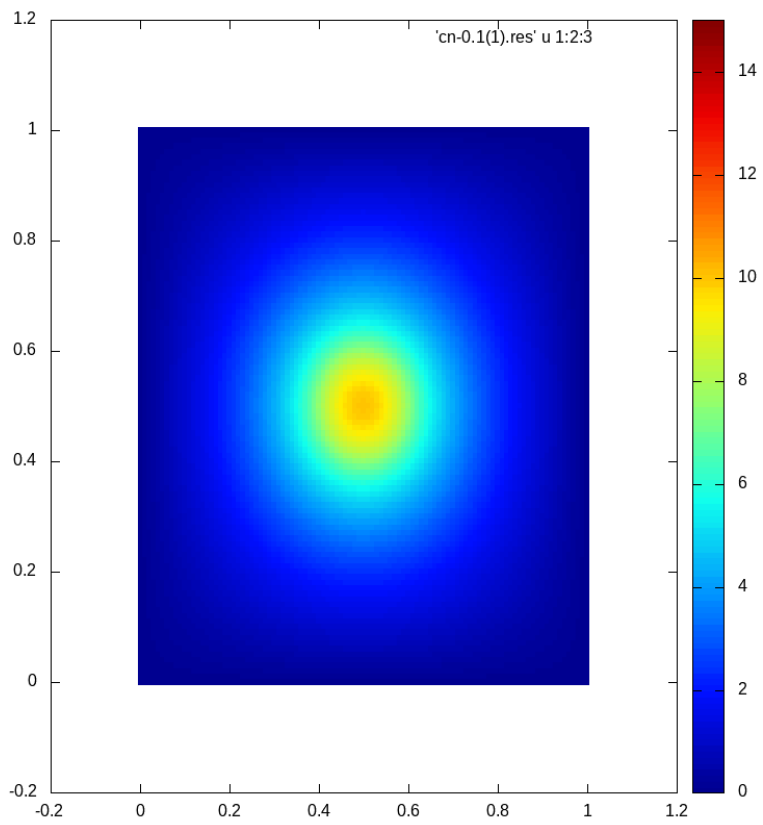
Respecte el codi he creat funcions auxiliars com per exemple una per guardar memòria de les matrius, dues per calcular les funcions f i g del problema, una altra per fer el

producte de dos vectors, per fer el producte de vector per matriu, i per últim una funció que fa les iteracions del mètode del gradient conjugat per a cada pas de temps del mètode de Crank-Nicolson.

La part principal del codi consta d'un bucle on es va incrementant el temps, comença en 0 fins arribar a 1 per realitzar cada pas del mètode de Crank-Nicolson on es crida a la funció del mètode del gradient.

Seguidament podem veure els outpus del programa en un diagrama de colors per a quatre valors diferents de temps. Notem que, com era d'esperar, el que succeeix és que el punt central on es comença a generar l'energia va propagant-la fins que, arribat un cert temps, s'atura i avança molt lentament, o gairebé res, ja que les parets segueixen a zero graus degut a la temperatura de l'exterior. Això podria ser un exemple d'una sala mal aïllada.





Referències

- [1] James M. Ortega. *Introduction to Parallel and Vector Solution of Linear Systems*. Springer, 1988.
- [2] Lawrence C. Evans. *Partial Differential Equation*. American Mathematical Society, 1998.
- [3] Pierre-Arnaud Raviart, Jean-Marie Thomas. *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Masson, 1983.
- [4] Sandro Salsa. *Partial Differential Equations in Action. From Modelling to Theory. Second Edition*. Springer, 2015.