

RESOLUCIÓ D'EQUACIONS DIFERENCIALS EN
DERIVADES PARCIALS MITJANÇANT TÈCNIQUES
MONTE CARLO

Lúcia Monreal Mengual
Juliol 2001

ÍNDEX

Capítol 1. Introducció.	1
1.1. Objectius.	1
1.2. Introducció als mètodes <i>Monte Carlo</i> .	1
Capítol 2. Classificació i reducció a la forma canònica de les EDP.	3
2.1. Introducció.	3
2.2. Reducció a la forma canònica de les EDP.	4
2.2.1. Reducció a la forma canònica de l'equació hiperbòlica.	7
2.2.1. Reducció a la forma canònica de l'equació parabòlica.	14
2.2.1. Reducció a la forma canònica de l'equació el·líptica.	17
Capítol 3. El mètode de les diferències finites.	21
3.1. Diferenciació numèrica.	21
3.2. Diferències finites.	23
3.3. Error de discretització.	24
3.4. Exemple: Equacions en derivades parcials. L'equació de la calor.	26
3.5. Mètodes implícits.	28
Capítol 4. El mètode <i>Monte Carlo</i> per a EDP de $2n$ ordre.	30
Capítol 5. Exemple de resolució d'equacions diferencials en derivades parcials.	43
5.1. Algorisme.	44
5.2. Exemples.	46
5.3. Conseqüències.	66
Capítol 6. Conclusions.	67
Annex 1. Construcció de l'estimador.	68
Annex 2. Generadors de nombres aleatoris.	74
Bibliografia.	81

Capítol 1. Introducció

1.1. Objectius

En aquest treball d'investigació ens plantegem la resolució d'equacions diferencials en derivades parcials (EDP) de $2n$ ordre mitjançant les tècniques de simulació *Monte Carlo*.

Els objectius que es pretenen assolir són: presentar un mètode alternatiu de resolució d'EDP que resulte senzill des del punt de vista conceptual i desenvolupar els algorismes que ens permetran resoldre qualsevol equació diferencial en derivades parcials de $2n$ ordre de tipus el·líptic o parabòlic.

1.2. Introducció als mètodes *Monte Carlo*

Sota la denominació de mètodes *Monte Carlo* s'inclouen nombrosos procediments matemàtics la característica comuna dels quals és l'ús de nombres generats aleatòriament. Aquests permeten el càlcul de magnituds que són difícils d'avaluar mitjançant altres mètodes. Poden aplicar-se tant a problemes on l'atzar té un paper essencial, com a problemes que admeten una reformulació en termes estadístics.

Els mètodes *Monte Carlo* han estat aplicats en dos tipus de problemes:

- Simulació de sistemes amb un comportament estocàstic.
- Integració de funcions i resolució d'equacions diferencials.

La simulació constitueix una nova branca de la investigació científica, a cavall entre la teoria i l'experimentació. Permet reemplaçar en molts casos l'experimentació directa, que sol ser més costosa i més difícil de controlar, i obtenir resultats numèrics en casos en què el tractament analític és molt complicat.

Els mètodes *Monte Carlo* s'utilitzen habitualment en la simulació de sistemes en els quals no es coneixen amb detall les condicions de contorn o que tenen comportaments de caràcter intrínsecament aleatori. Per exemple, el trànsit en una ciutat, l'evolució del qual és funció de un gran nombre de variables de difícil control i de les quals només es disposa d'informació estadística, és un cas en el qual no es coneixen les condicions de contorn amb total precisió. En altres problemes, l'atzar ve de la naturalesa intrínsecament aleatòria. Per exemple, les reaccions de partícules en acceleradors o reactors nuclears involucren pertorbacions de tipus caòtic amb comportaments quàntics, que fan necessari un tractament estadístic. El funcionament

d'un reactor nuclear pot simular-se mitjançant nombres aleatoris que representen els moviments dels neutrons al seu interior. Així, es pot experimentar reduint el temps, la inversió econòmica i els accidents.

El segon grup d'aplicacions del mètode de *Monte Carlo* correspon a la integració de funcions. Un exemple d'aquest ús seria el càlcul de l'àrea d'una figura plana, que formalment es correspon amb el càlcul d'una integral. Així, podem avaluar el número π calculant la proporció de punts d'un quadrat que es troben a l'interior de la circumferència circumscripita (el diàmetre de la qual és igual al costat del quadrat), ja que aquesta fracció és igual a $\pi/4$. Si un generador proporciona aleatòriament punts del quadrat, només caldrà avaluar quants en cauen a l'interior de la circumferència. L'estimació serà millor com més alt siga el nombre de punts avaluats.

Cal dir que no sempre podem diferenciar els dos grans grups d'aplicacions (simulació i integració) i que molts problemes comparteixen característiques d'ambdós. Açò es dona en l'aplicació del mètode a problemes deterministes la resolució analítica dels quals no és possible. Aquests no tenen components aleatoris, però una reformulació adequada del problema permet l'aplicació d'una tècnica *Monte Carlo*.

Capítol 2. Classificació i reducció a la forma canònica de les EDP

2.1. Introducció

L'objectiu d'aquest capítol és donar una classificació de les EDP de 2n ordre i veure que, tant si els coeficients són constants, com si són variables, aquestes equacions poden reduir-se a una forma anomenada canònica. Els operadors associats a cadascuna d'aquestes formes canòniques coincideixen amb els operadors de Laplace, de la calor i d'ones.

La forma general d'aquest tipus d'equacions és donada per:

$$A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}) = 0 \quad (1)$$

on A, B, C i u són funcions de (x, y) .

(també podem escriure-la:

$$A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + F(x, y)u = G(x, y)$$

on A, B, C, D, E, F, G, u són funcions de (x, y))

Aquestes equacions es classifiquen en:

El·líptiques si $B^2 - AC < 0$

Parabòliques si $B^2 - AC = 0$ (2)

Hiperbòliques si $B^2 - AC > 0$

Distingirem els tres casos possibles, i veurem que en funció d'unes noves coordenades $\xi = \xi(x, y), \eta = \eta(x, y)$ les EDP s'escriuen en termes de ξ, η de la forma següent :

1. Formes canòniques de les equacions hiperbòliques:

$$\begin{aligned} u_{\xi\xi} - u_{\eta\eta} &= \Psi(\xi, \eta, u, u_\xi, u_\eta) \\ u_{\xi\eta} &= \Phi(\xi, \eta, u, u_\xi, u_\eta) \end{aligned}$$

2. Forma canònica de l'equació parabòlica:

$$u_{\eta\eta} = \Phi(\xi, \eta, u, u_\xi, u_\eta)$$

3. Forma canònica de l'equació el·líptica:

$$u_{\xi\xi} + u_{\eta\eta} = \Phi(\xi, \eta, u, u_\xi, u_\eta)$$

2.2. Reducció a la forma canònica de les EDP

Definim l'operador $L[u]$:

$$\begin{aligned} L[u] &= A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} = \\ &= A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \Phi\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) \end{aligned} \quad (3)$$

Mitjançant canvis de variable

$$\xi = \xi(x, y) \quad , \quad \eta = \eta(x, y)$$

tal que el Jacobià és no nul, podem reduir l'equació (1) a una forma més senzilla.

Escrivim:

$$u(x, y) = v(\xi, \eta)$$

i calculem les seues derivades:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} v(\xi, \eta) = \frac{\partial v}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + 2 \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \cdot \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial v}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial v}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} v(\xi, \eta) = \frac{\partial v}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + 2 \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \cdot \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial v}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + \frac{\partial v}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial^2 \xi}{\partial x \partial y} + \frac{\partial v}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial^2 \eta}{\partial x \partial y}$$

Amb aquest canvi de variable l'operador $L[\bullet]$ s'escriu:

$$L[v] = a \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + 2b \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + c \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} + \Psi(\xi, \eta, v, \frac{\partial v}{\partial \xi}, \frac{\partial v}{\partial \eta}) = 0 \quad (4)$$

on:

$$a = A \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + 2B \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} + C \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2$$

$$b = A \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} + B \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + C \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y}$$

$$c = A \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2B \frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + C \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2$$

i la funció $\Psi(\xi, \eta, v, \frac{\partial v}{\partial \xi}, \frac{\partial v}{\partial \eta})$ pot obtenir-se a partir de $\Phi(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y})$.

Anem a veure com s'escriuen les condicions (2) per als nous coeficients a, b i c. Es senzill comprovar que

$$b^2 - ac = (B^2 - AC)J^2, \quad J = \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x}$$

on J és el Jacobià del canvi de variable. Les noves variables s'han triat de manera que el Jacobià és no nul, per tant el canvi de variable no altera el tipus d'equació.

El problema que es planteja és l'elecció adequada de les variables $\xi = \xi(x, y)$, $\eta = \eta(x, y)$.

Distingirem els tres casos possibles d'operadors que poden presentar-se en EDP de 2n. ordre.

Notació: si l'equació diferencial l'escrivim:

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G$$

llavors, mitjançant el canvi de coordenades $(x, y) \rightarrow (\xi, \eta)$ l'equació esdevé:

$$av_{\xi\xi} + 2bv_{\xi\eta} + cv_{\eta\eta} + dv_{\xi} + ev_{\eta} + fv = g$$

on

$$a = A\xi_x^2 + 2B\xi_x\xi_y + C\xi_y^2$$

$$b = A\xi_x\eta_x + B(\xi_x\eta_y + \xi_y\eta_x) + C\xi_y\eta_y$$

$$c = A\eta_x^2 + 2B\eta_x\eta_y + C\eta_y^2$$

$$d = A\xi_{xx} + 2B\xi_{xy} + C\xi_{yy} + D\xi_x + E\xi_y$$

$$e = A\eta_{xx} + 2B\eta_{xy} + C\eta_{yy} + D\eta_x + E\eta_y$$

$$f = F$$

$$g = G$$

2.2.1. Reducció a la forma canònica de l'equació hiperbòlica

El nostre objectiu és trobar el canvi de variable que faça que el nou operador hiperbòlic $L[\cdot]$ siga més senzill que l'operador original.

Suposem, per exemple, que $A \neq 0$ i triem unes noves variables tal que $a = c = 0$ (es verifica que $b^2 > 0$, per tant l'equació és hiperbòlica). La condició $a = 0$ implica:

$$A\left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 + 2B\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} + C\left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2 = 0 \quad (5)$$

Com que $A \neq 0$, necessàriament $\frac{\partial \xi}{\partial y} \neq 0$. Si no fos així, el fet que $\frac{\partial \xi}{\partial y} = 0$ implicaria que $A\left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 = 0$ i d'ací deduiríem que $\frac{\partial \xi}{\partial x} = 0$ i per tant, $J = 0$; però hem quedat a triar canvis de variable tal que el Jacobià siga no nul.

Aleshores, $\frac{\partial \xi}{\partial y} \neq 0$ i podem dividir l'equació (5) per $\left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2$:

$$A\left(\frac{\xi_x}{\xi_y}\right)^2 + 2B\frac{\xi_x}{\xi_y} + C = 0$$

Anàlogament, ho podem fer amb la condició $c = 0$ i obtenim l'equació:

$$A \left(\frac{\eta_x}{\eta_y} \right)^2 + 2B \frac{\eta_x}{\eta_y} + C = 0$$

Aleshores, $\frac{\xi_x}{\xi_y}$ i $\frac{\eta_x}{\eta_y}$ són les solucions de l'equació de 2n. grau

$$A\lambda^2 + 2B\lambda + C = 0$$

i llavors,

$$\frac{\xi_x}{\xi_y} = \frac{-B + \sqrt{B^2 - AC}}{A} \quad (6)$$

$$\frac{\eta_x}{\eta_y} = \frac{-B - \sqrt{B^2 - AC}}{A} \quad (7)$$

Ara el nostre problema consisteix en trobar unes funcions ξ i η tal que les raons $\frac{\xi_x}{\xi_y}$ i $\frac{\eta_x}{\eta_y}$ verifiquen les equacions (6) i (7). Si prenem les funcions ξ i η com :

$$\xi(x, y) = c_1 \quad \eta(x, y) = c_2$$

$$d\xi = \frac{\partial \xi}{\partial x} dx + \frac{\partial \xi}{\partial y} dy = 0 \quad \rightarrow \quad -\frac{\xi_x}{\xi_y} = \frac{dy}{dx}$$

$$d\eta = \frac{\partial \eta}{\partial x} dx + \frac{\partial \eta}{\partial y} dy = 0 \quad \rightarrow \quad -\frac{\eta_x}{\eta_y} = \frac{dy}{dx}$$

Per a buscar les funcions ξ i η integrem les expressions següents :

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B - \sqrt{B^2 - AC}}{A} \quad (8)$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B + \sqrt{B^2 - AC}}{A} \quad (9)$$

i obtenim

$$y = y_1(x) + c_1$$

$$y = y_2(x) + c_2$$

Aleshores:

$$c_1 = y - y_1(x)$$

$$c_2 = y - y_2(x)$$

i les funcions que busquem són:

$$\xi = c_1, \quad \eta = c_2$$

En termes de les noves variables ξ i η , l'equació (1) queda:

$$2b \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} = \Psi(\xi, \eta, v, \frac{\partial v}{\partial \xi}, \frac{\partial v}{\partial \eta})$$

i com que $b \neq 0$ per la condició $b^2 - ac > 0$, l'equació anterior esdevé:

$$v_{\xi\eta} = \Phi(\xi, \eta, v, \frac{\partial v}{\partial \xi}, \frac{\partial v}{\partial \eta}) \quad (10)$$

Encara podem realitzar un nou canvi de variable en l'equació a la fi de transforma-la en una altra que ens resulta més familiar.

Si definim unes noves variables α i β :

$$\alpha = (\xi + \eta)/2 \quad \beta = (\xi - \eta)/2$$

resulta:

$$\xi = \alpha - \beta \qquad \eta = \alpha + \beta$$

$$v(\xi, \eta) = v(\alpha + \beta, \alpha - \beta) = w(\alpha, \beta)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \alpha^2} - \frac{\partial^2 v}{\partial \beta^2} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial \xi} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial \alpha} + \frac{\partial v}{\partial \beta} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial \eta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial \alpha} - \frac{\partial v}{\partial \beta} \right)$$

Aleshores, l'equació (7) s'escriu:

$$u_{\alpha\alpha} - u_{\beta\beta} = \Psi(\alpha, \beta, u, u_\alpha, u_\beta) \qquad (11)$$

Nota: en el desenvolupament anterior hem utilitzat que $A \neq 0$. En el cas en què $A = 0$:

1. Si $C = 0$, com que $B \neq 0$ per la condició $B^2 - AC > 0$, l'equació (1) ja es troba en la forma canònica, només cal dividir-la per $2B$.
2. Si $C \neq 0$, invertim els papers de la x i la y , és a dir, en lloc de calcular $\frac{\xi_x}{\xi_y}$ i

$$\frac{\eta_x}{\eta_y}, \text{ calcularem } \frac{\xi_y}{\xi_x} \text{ i } \frac{\eta_y}{\eta_x} \text{ com a solucions de l'equació}$$

$C\lambda^2 + 2B\lambda + A = 0$. Aquesta equació té dues solucions

$$\lambda_1 = 0, \lambda_2 = -\frac{2B}{C}$$

$$\lambda_1 = 0 \rightarrow \frac{dy}{dx} = 0 \rightarrow \xi = \xi(x)$$

i integrant λ_2 s'obté la funció $\eta(x, y)$.

Exemples.

1. Reducció a la forma canònica d'una EDP hiperbòlica amb coeficients constants.

$$u_{xx} - 4u_{yy} + u_x = 0$$

$$A = 1, B = 0, C = -4$$

Es verifica que $B^2 - AC = 16 > 0$, per tant, l'equació és hiperbòlica.

Les equacions (8), (9) s'escriuen:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B - \sqrt{B^2 - AC}}{A} = -2$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B + \sqrt{B^2 - AC}}{A} = 2$$

integrant s'obté:

$$y = -2x + c_1 \rightarrow c_1 = y + 2x$$

$$y = 2x + c_2 \rightarrow c_2 = y - 2x$$

Aleshores, les noves variables ξ i η que busquem són:

$$\xi = y + 2x \qquad \eta = y - 2x$$

i les noves a, b, c, d, e, f, g :

$$a = A\xi_x^2 + 2B\xi_x\xi_y + C\xi_y^2 = 0$$

$$b = A\xi_x\eta_x + B(\xi_x\eta_y + \xi_y\eta_x) + C\xi_y\eta_y = -12$$

$$c = A\eta_x^2 + 2B\eta_x\eta_y + C\eta_y^2 = 0$$

$$d = A\xi_{xx} + 2B\xi_{xy} + C\xi_{yy} + D\xi_x + E\xi_y = 2$$

$$e = A\eta_{xx} + 2B\eta_{xy} + C\eta_{yy} + D\eta_x + E\eta_y = -2$$

$$f = F = 0$$

$$g = G = 0$$

En termes de ξ i η , l'equació diferencial s'escriu:

$$-24u_{\xi\eta} + 2u_{\xi} - 2u_{\eta} = 0 \rightarrow u_{\xi\eta} = \frac{1}{12}(u_{\xi} - u_{\eta})$$

Si canviem a les variables $\alpha = \frac{\xi + \eta}{2}$, $\beta = \frac{\xi - \eta}{2}$, l'equació anterior queda reduïda a la forma:

$$u_{\alpha\alpha} - u_{\beta\beta} = \frac{1}{3}u_{\beta}$$

2. Rescriure la següent equació amb coeficients variables en la forma canònica. [2]

$$y^2 u_{xx} - x^2 u_{yy} = 0$$

$$\rightarrow A = y^2, B = 0, C = -x^2, D = E = F = G = 0$$

Les equacions (8), (9) esdevenen:

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{x}{y} \rightarrow y^2 = -x^2 + c_1 \rightarrow c_1 = y^2 + x^2 = \xi$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{x}{y} \rightarrow y^2 = x^2 + c_1 \rightarrow c_1 = y^2 - x^2 = \eta$$

$$a = A\xi_x^2 + 2B\xi_x\xi_y + C\xi_y^2 = 0$$

$$b = A\xi_x\eta_x + B(\xi_x\eta_y + \xi_y\eta_x) + C\xi_y\eta_y = -8x^2y^2$$

$$c = A\eta_x^2 + 2B\eta_x\eta_y + C\eta_y^2 = 0$$

$$d = A\xi_{xx} + 2B\xi_{xy} + C\xi_{yy} + D\xi_x + E\xi_y = 2(y^2 - x^2)$$

$$e = A\eta_{xx} + 2B\eta_{xy} + C\eta_{yy} + D\eta_x + E\eta_y = -2(x^2 + y^2)$$

$$f = F = 0$$

$$g = G = 0$$

En termes de ξ i η , l'equació diferencial s'escriu:

$$-16x^2y^2u_{\xi\eta} + 2(y^2 - x^2)u_{\xi} - 2(x^2 + y^2)u_{\eta} = 0$$

↓

$$u_{\xi\eta} = \frac{(y^2 - x^2)u_{\xi} - (x^2 + y^2)u_{\eta}}{8x^2y^2}$$

↓

$$u_{\xi\eta} = \frac{\eta u_{\xi} - \xi u_{\eta}}{2(\xi^2 - \eta^2)}$$

Si canviem a les variables $\alpha = \frac{\xi + \eta}{2}$, $\beta = \frac{\xi - \eta}{2}$, l'equació anterior queda reduïda a la forma:

$$u_{\alpha\alpha} - u_{\beta\beta} = \frac{1}{2\beta} u_{\beta} - \frac{1}{2\alpha} u_{\alpha}$$

2.2.2. Reducció a la forma canònica de l'equació parabòlica

El nostre objectiu és el mateix que al cas hiperbòlic: trobar el canvi de variable que du l'equació a la forma canònica.

Suposem $A \neq 0$. Triem unes noves variables ξ i η tal que $b = c = 0$ (així es verifica que $b^2 - ac = 0$, i per tant l'equació és parabòlica). La condició $c = 0$ implica:

$$A \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2B \frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + C \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 = 0$$

Dividim l'equació per $\left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2$: (aquest factor és no nul pel mateix raonament utilitzat al cas hiperbòlic)

$$A \left(\frac{\eta_x}{\eta_y} \right)^2 + 2B \frac{\eta_x}{\eta_y} + C = 0$$

Aleshores, $\frac{\eta_x}{\eta_y}$ és solució de l'equació de 2n. grau

$$A\lambda^2 + 2B\lambda + C = 0$$

i com que $B^2 - AC = 0$, aquesta solució és única.

$$\frac{\eta_x}{\eta_y} = -\frac{B}{A}$$

Prenem, com en el cas hiperbòlic, $\eta(x, y) = k$

$$d\eta = \frac{\partial \eta}{\partial x} dx + \frac{\partial \eta}{\partial y} dy \rightarrow \frac{\eta_x}{\eta_y} = -\frac{dy}{dx} \rightarrow \frac{dy}{dx} = \frac{B}{A}$$

i integrant l'última expressió:

$$y = \frac{B}{A}x + k \rightarrow k = y - \frac{B}{A}x = \eta(x, y)$$

Estudiem b:

$$b = A \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} + B \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + C \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y}$$

com $\frac{\partial \eta}{\partial x} = -\frac{B}{A} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y}$

$$\begin{aligned} b &= A \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \left(-\frac{B}{A} \right) \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + B \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \left(-\frac{B}{A} \right) \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + C \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} = \\ &= -\frac{B^2}{A} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} + C \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial \xi}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} \cdot \left(\frac{-B^2 + AC}{A} \right) = 0 \end{aligned}$$

Aleshores la condició $c = 0$ implica que $b = 0$. Triem per simplicitat $\xi = \xi(x) = x$.

Amb aquest canvi de variable arribem a una equació de la forma:

$$u_{\xi\xi} = \Phi(\xi, \eta, u, u_\xi, u_\eta) \quad (12)$$

que és la forma canònica de l'equació parabòlica.

Nota: Si $a=0$ i l'operador és parabòlic tenim que $b=0$. Per tant c no pot anul·lar-se, ja que si fos així no tindríem una EDP de $2n$ ordre. En aquest cas l'equació () amb $a=b=0$ ja ve expressada en la forma canònica.

Exemple: Escrivim la següent equació en la forma canònica

$$x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2xy \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + y^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$A = x^2, B = xy, C = y^2, D = E = F = G = 0$$

Es verifica que $B^2 - AC = 0$, per tant l'equació es parabòlica. Fem el canvi a unes noves variables tal que $c = b = 0$.

Hem vist que la condició $c = 0$ condueix a

$$\frac{\eta_x}{\eta_y} = -\frac{dy}{dx} \rightarrow \frac{dy}{dx} = \frac{B}{A} = \frac{y}{x} \rightarrow y = kx$$

i les noves variables ξ i η són:

$$\eta(x, y) = k = \frac{y}{x} \quad \xi(x) = x$$

$$a = A \left(\frac{\xi_x}{\xi_y} \right)^2 + 2B \frac{\xi_x}{\xi_y} + C = A = x^2$$

$$b = c = 0$$

$$d = A\xi_{xx} + 2B\xi_{xy} + C\xi_{yy} + D\xi_x + E\xi_y = 0$$

$$e = A\eta_{xx} + 2B\eta_{xy} + C\eta_{yy} + D\eta_x + E\eta_y = x^2 \cdot \frac{2y}{x^3} + 2xy \cdot \frac{-1}{x^2} = 0$$

$$f = F = 0$$

$$g = G = 0$$

La nova equació s'escriu:

$$x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = 0 \quad \rightarrow \quad \xi^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} = 0$$

i resolent-la $\frac{\partial u}{\partial \xi} = f(\eta) \quad \rightarrow \quad u(\xi, \eta) = f(\eta)\xi + g(\eta)$

2.2.3. Reducció a la forma canònica de l'equació el·líptica

Aquest cas es resol de manera idèntica al cas hiperbòlic, és a dir, triarem unes noves coordenades ξ i η tal que $a = c = 0$.

Ara $A \neq 0$, $C \neq 0$ ja que $B^2 - AC < 0$. Busquen unes noves variables ξ i η tal que $a = c = 0$. La condició $a = 0$ implica:

$$A\left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 + 2B\frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y} + C\left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2 = 0$$

Com que $A \neq 0$, necessàriament $\frac{\partial \xi}{\partial y} \neq 0$ (pel mateix raonament expressat en el cas

hiperbòlic). Per tant podem dividir l'equació anterior per $\left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2$:

$$A\left(\frac{\xi_x}{\xi_y}\right)^2 + 2B\frac{\xi_x}{\xi_y} + C = 0$$

Anàlogament, ho podem fer amb la condició $c = 0$ i obtenim l'equació:

$$A \left(\frac{\eta_x}{\eta_y} \right)^2 + 2B \frac{\eta_x}{\eta_y} + C = 0$$

Aleshores, $\frac{\xi_x}{\xi_y}$ i $\frac{\eta_x}{\eta_y}$ són les solucions de l'equació de 2n. grau

$$A\lambda^2 + 2B\lambda + C = 0$$

però la condició $B^2 - AC < 0$ implica que aquestes solucions són complexes conjugades i obtindriem, si procedim com en el cas hiperbòlic dues noves variables ξ i η , també complexes conjugades.

Per a passar a variables reals fem un nou canvi:

$$\alpha = \frac{\xi + \eta}{2} \quad \beta = \frac{\xi - \eta}{2i}$$

Aquest nou canvi de variable, si seguim un camí anàleg als casos anteriors, condueix a una equació de la forma:

$$u_{\alpha\alpha} + u_{\beta\beta} = \Phi(\alpha, \beta, u, u_\alpha, u_\beta) \quad (13)$$

Exemple: Reduïm a la forma canònica l'equació:

$$y^2 u_{xx} + x^2 u_{yy} = 0$$

$$A = y^2, C = x^2, B = D = E = F = G = 0$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B - \sqrt{B^2 - AC}}{A} = -\frac{x}{y} i$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B + \sqrt{B^2 - AC}}{A} = \frac{x}{y} i$$

integrant les dues últimes equacions obtenim:

$$y^2 = -x^2 i + c_1 \rightarrow \xi = c_1 = y^2 + x^2 i$$

$$y^2 = x^2 i + c_2 \rightarrow \eta = c_2 = y^2 - x^2 i$$

$$a = c = 0$$

$$b = A\xi_x \eta_x + B(\xi_x \eta_y + \xi_y \eta_x) + C\xi_y \eta_y = y^2 \cdot 2xi(-2xi) + x^2 \cdot 2y \cdot 2y = 8x^2 y^2$$

$$d = A\xi_{xx} + 2B\xi_{xy} + C\xi_{yy} + D\xi_x + E\xi_y = y^2 \cdot 2i + x^2 \cdot 2 = 2(x^2 + y^2 i)$$

$$e = A\eta_{xx} + 2B\eta_{xy} + C\eta_{yy} + D\eta_x + E\eta_y = y^2 \cdot (-2i) + x^2 \cdot 2 = 2(x^2 - y^2 i)$$

$$f = F = 0$$

$$g = G = 0$$

L'equació s'escriu:

$$8x^2 y^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + 2(x^2 + y^2 i) \frac{\partial u}{\partial \xi} + 2(x^2 - y^2 i) \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0$$

Definim unes noves variables reals α i β

$$\alpha = \frac{\xi + \eta}{2} = y^2 \quad \beta = \frac{\xi - \eta}{2i} = x^2$$

En termes de α i β , l'equació anterior esdevé:

$$8\alpha\beta\frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial\beta^2}\right) + 2(\beta + i\alpha)\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial\alpha} - i\frac{\partial u}{\partial\beta}\right) + 2(\beta - i\alpha)\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial\alpha} + i\frac{\partial u}{\partial\beta}\right) = 0$$

↓

$$2\alpha\beta\left(\frac{\partial^2 u}{\partial\alpha^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial\beta^2}\right) = -2\beta\frac{\partial u}{\partial\alpha} - 2\alpha\frac{\partial u}{\partial\beta}$$

↓

$$u_{\alpha\alpha} + u_{\beta\beta} = -\frac{1}{\alpha}u_{\alpha} - \frac{1}{\beta}u_{\beta}$$

Capítol 3: El mètode de les diferències finites

3.1. Diferenciació numèrica

La diferenciació numèrica és necessària per a calcular zeros que impliquen derivades d'una funció de la qual només coneixem punts.

Per a calcular de forma aproximada el valor de la derivada d'una funció podem utilitzar la seua definició formal:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Per a valors de h menuts s'obté

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

Per a estimar l'error comès, considerem el desenvolupament de Taylor per a f

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + O(h^2)$$

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) = O(h)$$

Si es canvia h per $(-h)$, s'obté l'aproximació

$$f'(x) \approx \frac{-f(x-h) + f(x)}{h} \quad (1)$$

La següent proposició permet la demostració d'aquesta última aproximació.

Proposició 1: Siga $\beta \in \mathbb{R}$, aleshores es verifica que:

$$f'(x) = \frac{1}{h\beta(\beta+1)} \left[-\beta^2 f(x-h) - (1-\beta^2)f(x) + f(x+\beta h) \right] + O(h^2)$$

Demostració: considerem el desenvolupament de Taylor de la funció f avaluat en $(x-h)$ i $(x+\beta h)$ respectivament:

$$f(x+\beta h) = f(x) + f'(x)\beta h + \frac{f''(x)}{2} \beta^2 h^2 + O(h^3)$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2} h^2 + O(h^3)$$

si multipliquem per (β^2) la segona expressió i restem ambdues s'obté:

$$\begin{aligned} & -\beta^2 f(x-h) - (1-\beta^2)f(x) + f(x+\beta h) = \\ & = -\beta^2 \left(f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2} h^2 + O(h^3) \right) - (1-\beta^2)f(x) + \\ & + f(x) + f'(x)\beta h + \frac{f''(x)}{2} \beta^2 h^2 + O(h^3) = \\ & = h\beta(\beta+1)f'(x) + O(h^3) \end{aligned}$$

d'on podem deduir la proposició 1.

Si $\beta=1$ s'obté l'aproximació (1).

$$f''(x) = \frac{2}{h^2 \beta(\beta+1)} \left[\beta f(x-h) - (1+\beta)f(x) + f(x+\beta h) \right] + O(h)$$

Proposició 2: Siga $\beta \in \mathbb{R}$, aleshores es verifica:

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

Si $\beta=1$, $O(h)$ s'ha de substituir per $O(h^2)$.

Demostració 2: Anàloga a la proposició 1.

En el cas en què $\beta=1$, s'obté la aproximació d'ordre h^2 .

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

També podem fer el mateix amb les derivades parcials de funcions de dues o més variables.

Per exemple, si f és una funció de dues variables x e y ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x, y) &\approx \frac{-f(x, y-k) + f(x, y+k)}{2k} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x, y) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) (x, y) \approx \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{-f(x, y-k) + f(x, y+k)}{2k} \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{2h} \left\{ - \left(\frac{-f(x-h, y-k) + f(x-h, y+k)}{2k} \right) + \left(\frac{-f(x+h, y-k) + f(x+h, y+k)}{2k} \right) \right\} = \\ &= \frac{1}{4hk} \{ f(x-h, y-k) - f(x-h, y+k) - f(x+h, y-k) + f(x+h, y+k) \} \end{aligned}$$

3.2. Diferències finites

Considerem l'equació diferencial

$$\begin{aligned} v''(t) &= c(t)v(t) + d(t) \\ a &\leq t \leq b \end{aligned} \quad (2)$$

amb condicions inicials

$$\begin{aligned} v(a) &= \alpha \\ v(b) &= \beta \end{aligned}$$

Volem obtenir una aproximació numèrica de la solució. El mètode de les diferències finites consisteix en:

a. Dividir l'interval $[a, b]$ en n subintervalls de igual longitud $h=(b-a)/n$. Per a $i=0, 1, \dots, n$ siguin $t_i=a+ih$ els $(n+1)$ punts considerats. Els punts $t_0=a$ i $t_n=b$ s'anomenen punts de la frontera, i la resta de t_i punts interiors.

b. Si v és la solució del problema, en cadascun dels punts interiors podem aproximar v'' per:

$$v''(t_i) \approx \frac{v(t_{i-1}) - 2v(t_i) + v(t_{i+1}))}{h^2}$$

Si substituïm aquesta expressió en l'equació (2) obtenim:

$$\frac{v(t_{i-1}) - 2v(t_i) + v(t_{i+1}))}{h^2} \approx c_i v(t_i) + d_i \quad i = 1, 2, \dots, n-1$$

on c_i i d_i denoten $c(t_i)$ i $d(t_i)$ respectivament. Representem per v_i l'aproximació a la solució en t_i . Aquestes aproximacions numèriques són els valors que satisfan la igualtat:

$$\frac{v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}}{h^2} = c_i v_i + d_i \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3)$$

i, aleshores

$$\begin{aligned} -v_{i-1} + 2v_i - v_{i+1} + h^2 c_i v_i &= -h^2 d_i & i = 1, 2, \dots, n-1 \\ v_0 &= \alpha \\ v_n &= \beta \end{aligned}$$

L'equació anterior pot expressar-se en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 2+h^2c_1 & -1 & & & & \\ -1 & 2+h^2c_2 & -1 & & & \\ \dots & \dots & \dots & & & \\ & & & 2+h^2c_{n-2} & -1 & \\ & & & -1 & 2+h^2c_{n-1} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ \dots \\ v_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -h^2d_1 + \alpha \\ -h^2d_2 \\ \dots \\ -h^2d_{n-2} \\ -h^2d_{n-1} + \beta \end{bmatrix}$$

Si $c(t) \geq 0$ en $[a, b]$, com que la matriu de coeficients del sistema estarà dominada per les entrades diagonals serà no-singular, i llavors, el sistema tindrà una única solució.

3.3. Error de discretització

L'error de discretització és l'error que es produeix al prendre v_i com una aproximació a la solució $v(t_i)$. L'error de discretització global es defineix com

$$\max_{\{1 \leq i \leq n-1\}} |v_i - v(t_i)|$$

Per a estudiar-lo, se introdueix l'*error de discretització local*:

$$L(t, h) = \frac{1}{h^2} [v(t-h) - 2v(t) + v(t+h)] - c(t)v(t) - d(t)$$

que és l'error comès en aproximar v'' . L'expressió anterior avaluada en els punts interiors t_i esdevé:

$$\sigma_i = \frac{1}{h^2} [v(t_{i-1}) - 2v(t_i) + v(t_{i+1})] - c_i v(t_i) - d_i$$

on $\sigma_i = L(t_i, h)$.

Si restem a l'expressió anterior l'equació (3) i definint $e_i = v(t_i) - v_i$, obtenim:

$$(2 + h^2 c_i) e_i - e_{i+1} - e_{i-1} = -h^2 \sigma_i$$

on $e_0 = e_n = 0$.

En forma matricial

$$A \bar{e} = -h^2 \bar{\sigma}$$

$$\bar{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_{n-1} \end{bmatrix} \quad \bar{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \dots \\ \sigma_{n-1} \end{bmatrix}$$

on A és la matriu de coeficients del sistema anterior i si suposem que A^{-1} existeix, podem deduir la relació bàsica entre l'*error de discretització local* i *global*:

$$\bar{e} = -h^2 A^{-1} \bar{\sigma}$$

3.4. Exemple: Equacions amb derivades parcials. L'equació de la calor.

L'equació de la calor és un exemple d'equació en derivades parcials de tipus parabòlica. Per a un segment de longitud L es defineix per

$$\begin{aligned}
 K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{\partial u}{\partial t} & (4) \\
 0 \leq x &\leq L \\
 t &\geq 0
 \end{aligned}$$

amb les condicions inicials

$$\begin{aligned}
 u(0, x) &= g(x) & 0 \leq x \leq L \\
 u(t, 0) &= \alpha \\
 u(t, L) &= \beta & t \geq 0
 \end{aligned}$$

on g és una funció donada i α i β són constants. A més, u representa la temperatura del material, t és el temps i K és la constant de difusivitat tèrmica. Per a desenvolupar el mètode de diferències finites s'ha de considerar

- a) *Domini Espacial*
 Es divideix en n seccions, cada una de longitud h .

$$h = \frac{L}{n}$$

- b) *Domini Temporal*
 Es consideren passos en el temps de longitud k .

$$\begin{aligned}
 x_j &= jk & j = 0, 1, 2, \dots, n. \\
 t_i &= ik & i = 0, 1, 2, \dots
 \end{aligned}$$

Si $u_{i,j}$ representa la solució aproximada en (t_i, x_j) , aproximant les derivades parcials

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{-u_{i,j} + u_{i+1,j}}{k}$$

i substituint en l'equació (4) s'obté:

$$K \left(\frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2} \right) = \frac{-u_{i,j} + u_{i+1,j}}{k}$$

o, equivalentment,

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \mu(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1})$$

sent $\mu = K(k/h^2)$.

Els valors d' $u_{0,j}$, $u_{i,0}$ i $u_{i,n}$ són donats per les condicions inicials. Per tant, es va calcular la solució aproximada un pas de temps després d'un altre. Primer $u_{1,j}$ per a totes les j , a continuació els $u_{2,j}$, i així successivament.

L'error de discretització global és el que es produeix al prendre $u_{i,j}$ com a aproximació de $u(t_i, x_j)$. Es pot conèixer estimant l'error de discretització local definit com

$$L(t, x, h, k) = K \left(\frac{u(t, x+h) - 2u(t, x) + u(t, x-h)}{h^2} \right) - \left(\frac{-u(t, x) + u(t+k, x)}{k} \right)$$

Com és conegut que

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

$$\frac{-u(t, x) + u(t+k, x)}{k} = \frac{\partial u}{\partial t} + O(k)$$

substituint en l'equació anterior i recordant que

$$K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t}$$

s'obté finalment

$$L(t, x, h, k) = \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(k)$$

(precisió de primer ordre en el temps i de segon ordre en l'espai)

Perquè l'equació

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \mu(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1})$$

sigui estable pot demostrar-se que

$$K \frac{k}{h^2} \leq 0.5$$

(condició d'estabilitat).

Ja que la condició d'estabilitat imposa dimensions de pas per al temps molt xicotets segons $h \rightarrow 0$ es necessitaran un gran nombre de passos de temps. Açò motiva la consideració de mètodes implícits.

3.5.-Mètodes implícits

L'esquema en *diferències finites*

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \mu(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1})$$

s'anomena explícit perquè avalua valors de $u_{i+1,j}$ en el temps t_{i+1} , en funció de l'instant precedent t_i . Considerant novament l'equació de la calor i l'aproximació en diferències per a (t_{i+1}, x_j)

$$K \left(\frac{u_{i+1,j-1} - 2u_{i+1,j} + u_{i+1,j+1}}{h^2} \right) = \frac{-u_{i,j} + u_{i+1,j}}{k}$$

d'on, equivalentment,

$$u_{i+1,j} = (1 + 2\mu)u_{i+1,j} - \mu(u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j-1}) \dots j = 1, 2, \dots, n-1$$

Aquesta última expressió es pot escriure de forma matricial

$$(E + \mu A)u_{i+1} = u_i + b \dots i = 0, 1, 2, \dots$$

on E és la matriu identitat, u_m representa la fila m -èsima de la matriu $u_{i,j}$ i

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ \dots & \dots & \dots & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & \\ & & 0 & -1 & 2 & \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} \mu\alpha \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ \mu\beta \end{bmatrix}$$

sent les condicions de contorn

$$u_{i,0} = \alpha$$

$$u_{i,n} = \beta$$

L'error local és del mateix tipus que el mètode explícit:

$$O(h^2) + O(k)$$

Capítol 4. El mètode *Monte Carlo* per a EDP de 2n ordre.

El mètode permet obtenir una solució aproximada d'una equació en derivades parcials, en un punt $z = (x_i, y_i)$, donades unes condicions de contorn (per exemple, de Dirichlet).

L'esquema que se segueix és el següent:

1. Es discretitza el domini on s'inclou el punt on es desitja avaluar la solució.
2. Es discretitza l'equació diferencial donada pel mètode de diferències finites.
3. Es rescriu l'equació per a obtenir un valor per a la solució en el punt donat, en funció dels valors de la funció en els nodes veïns.
4. S'interpreten els coeficients de la fórmula obtinguda com a probabilitats de transició d'un node als nodes veïns.

Amb més detall, donada l'equació diferencial en derivades parcials:

$$L[u] = F(x, y)$$

on $L[\bullet]$ representa l'operador

$$L[u] = A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} \quad (1)$$

L'operador $L[\bullet]$ pot ser discretitzat i s'obté la aproximació següent:

$$L[u] \approx A_{i,j} \left[\frac{v_{i+1,j} - 2v_{i,j} + v_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \right] + 2B_{i,j} \left[\frac{v_{i+1,j+1} - v_{i,j+1} - v_{i+1,j} + v_{i,j}}{(\Delta x)(\Delta y)} \right] + C_{i,j} \left[\frac{v_{i,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i,j-1}}{(\Delta y)^2} \right] + D_{i,j} \left[\frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{(\Delta x)} \right] + E_{i,j} \left[\frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{(\Delta y)} \right] \quad (2)$$

on

$$\begin{aligned}x_i &= x_0 + i(\Delta x) \\y_j &= y_0 + j(\Delta y) & i = 1, 2, \dots, n \\v_{i,j} &= u(x_i, y_j) & j = 1, 2, \dots, m \\A_{i,j} &= A(x_i, y_j)\end{aligned}$$

i anàlogament per a les funcions B, C, D, E .

Si es defineixen $\{\Gamma_{\bullet,\bullet}\}$ i $Q_{i,j}$ com:

$$\begin{aligned}\Gamma_{i+1,j+1} &= \left[\frac{2B_{i,j}}{(\Delta x)(\Delta y)} \right] \\ \Gamma_{i+1,j} &= \left[\frac{A_{i,j}}{(\Delta x)^2} - \frac{2B_{i,j}}{(\Delta x)(\Delta y)} + \frac{D_{i,j}}{\Delta x} \right] \\ \Gamma_{i,j+1} &= \left[\frac{C_{i,j}}{(\Delta y)^2} - \frac{2B_{i,j}}{(\Delta x)(\Delta y)} + \frac{E_{i,j}}{\Delta y} \right] \\ \Gamma_{i-1,j} &= \left[\frac{A_{i,j}}{(\Delta x)^2} \right] \\ \Gamma_{i,j-1} &= \left[\frac{C_{i,j}}{(\Delta y)^2} \right] \\ Q_{i,j} &= \left[\frac{2A_{i,j}}{(\Delta x)^2} - \frac{2B_{i,j}}{(\Delta x)(\Delta y)} + \frac{2C_{i,j}}{(\Delta y)^2} + \frac{D_{i,j}}{\Delta x} + \frac{E_{i,j}}{\Delta y} \right]\end{aligned}$$

l'equació diferencial pot escriure's en la forma:

$$Q_{i,j}v_{i,j} = \Gamma_{i+1,j}v_{i+1,j} + \Gamma_{i+1,j+1}v_{i+1,j+1} + \Gamma_{i,j+1}v_{i,j+1} + \Gamma_{i-1,j}v_{i-1,j} + \Gamma_{i,j-1}v_{i,j-1} - F_{i,j}$$

Dividint per $Q_{i,j}$ i definint $p_{i,j} = \Gamma_{i,j} / Q_{i,j}$ s'obté:

$$v_{i,j} = p_{i+1,j}v_{i+1,j} + p_{i+1,j+1}v_{i+1,j+1} + p_{i,j+1}v_{i,j+1} + p_{i-1,j}v_{i-1,j} + p_{i,j-1}v_{i,j-1} - \frac{F_{i,j}}{Q_{i,j}} \quad (3)$$

És senzill comprovar que:

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

només cal tenir en compte la definició de $p_{i,j}$:

$$\begin{aligned} p_{i+1,j} + p_{i+1,j+1} + p_{i,j+1} + p_{i-1,j} + p_{i,j-1} &= \frac{1}{Q_{i,j}} [\Gamma_{i+1,j} + \Gamma_{i+1,j+1} + \Gamma_{i,j+1} + \Gamma_{i-1,j} + \Gamma_{i,j-1}] = \\ &= \frac{1}{Q_{i,j}} \left[\frac{2A_{i,j}}{(\Delta x)^2} - \frac{2B_{i,j}}{(\Delta x)(\Delta y)} + \frac{2C_{i,j}}{(\Delta y)^2} + \frac{D_{i,j}}{\Delta x} + \frac{E_{i,j}}{\Delta y} \right] = \frac{Q_{i,j}}{Q_{i,j}} = 1 \end{aligned}$$

Si les $p_{i,j}$ són totes positives es poden prendre com a probabilitats de transició als nodes veïns. L'equació (3) s'interpreta de la manera següent:

Si estem en la posició (i,j) en el pas N, llavors:

- (A) $p_{i,j+1}$ representa la probabilitat de moure'ns al node $(i,j+1)$, en el pas N+1.
- (B) $p_{i,j-1}$ representa la probabilitat de moure'ns al node $(i,j-1)$, en el pas N+1.
- (C) $p_{i+1,j}$ representa la probabilitat de moure'ns al node $(i+1,j)$, en el pas N+1.
- (D) $p_{i-1,j}$ representa la probabilitat de moure'ns al node $(i-1,j)$, en el pas N+1.
- (E) $p_{i+1,j+1}$ representa la probabilitat de moure'ns al node $(i+1,j+1)$, en el pas N+1.

Suposem ara una partícula en el punt $P_0=z$. Després de m passos la partícula arribarà a un punt de la frontera P_m , on, si les condicions de contorn utilitzades són les de Dirichlet, es coneix el valor de la funció $u(P_m)$. Si la seqüència de punts que visita la partícula és $(P_0, P_1, P_2, \dots, P_m)$ una estimació del valor de $u(z)$ és donada per

$$u(z) = u(P_m) - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{F(P_j)}{Q(P_j)}$$

(vegeu l'annex 2).

Si repetim l'algorisme K vegades prenem com a valor de $u(z)$ la mitjana dels valors obtinguts. Llavors:

$$u(z) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left(u(P_{m_k}^k) - \sum_{j=0}^{m_k-1} \frac{F(P_j^k)}{Q(P_j^k)} \right) \quad (4)$$

on $(P_0^k, P_1^k, \dots, P_{m_k}^k)$ representen les K trajectòries *aleatòries*.

Exemple 1:

Per a comprovar el mètode partim del camp següent:

$$u(x, y) = -M \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2}, \quad M > 0 \quad (x, y) \in [0, 1]$$

Construïm una equació diferencial en derivades parcials la solució de la qual siga $u(x, y)$. Per això derivem dues vegades respecte de x i y ,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -M$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 1$$

multipliquem la segona relació per M i les sumem:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + M \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Aquesta equació tindrà per solució el camp $u(x, y)$.

Si la comparem amb l'expressió general de les EDP de 2n ordre veiem que es tracta d'una equació de tipus el·líptic:

$$\left. \begin{array}{l} A = 1 \\ B = 0 \\ C = M \end{array} \right\} \Rightarrow B^2 - AC = -M < 0$$

Ara, resoldrem aquesta equació segons el mètode explicat en aquest capítol .

1. Discretització del domini on volem avaluar la solució:

a) Discretització de la variable x :

$$x_i = 0 + ih$$

$$h = \frac{1-0}{n} = \frac{1}{n}$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, n$$

$$x_0 = 0$$

$$x_n = nh = 1$$

b) Discretització de la variable y :

$$\begin{aligned} y_j &= 0 + jk \\ k &= \frac{1-0}{m} = \frac{1}{m} \\ j &= 0, 1, 2, \dots, m \\ y_0 &= 0 \\ y_m &= mk = 1 \end{aligned}$$

c) Condicions de contorn sobre la frontera (Dirichlet)

$$\begin{aligned} u_{i,0} &= u(x_i, 0) = -M \frac{x_i^2}{2} \\ u_{i,m} &= u(x_i, y_m) = u(x_i, 1) = -M \frac{x_i^2}{2} + \frac{1}{2} \\ u_{0,j} &= u(x_0, y_j) = u(0, y_j) = \frac{y_j^2}{2} \\ u_{n,j} &= u(x_n, y_j) = u(1, y_j) = -\frac{M}{2} + \frac{y_j^2}{2} \end{aligned}$$

2. Aproximació en *diferències finites* i obtenció de la solució $u_{i,j}$

Aproximant les derivades parcials

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_j)}{\partial y^2} \approx \frac{u(x_i, y_j + k) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_j - k)}{k^2} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}$$

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_j)}{\partial x^2} \approx \frac{u(x_i + h, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i - h, y_j)}{h^2} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

i substituint-les en l'equació diferencial s'obté:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + M \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} = 0$$

Aïllant $u_{i,j}$ s'arriba a l'expressió:

$$\begin{aligned}
 u_{i,j} = & \frac{1}{2h^2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{M}{k^2} \right)} u_{i+1,j} + \frac{1}{2h^2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{M}{k^2} \right)} u_{i-1,j} + \frac{M}{2k^2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{M}{k^2} \right)} u_{i,j+1} + \\
 & + \frac{M}{2k^2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{M}{k^2} \right)} u_{i,j-1} \quad (5)
 \end{aligned}$$

3. Interpretem els coeficients de la fórmula obtinguda com probabilitats de transició d'un node als nodes veïns.

Si comparem aquesta expressió amb la relació (3) obtinguda en aquest capítol

$$u_{i,j} = p_{i+1,j} u_{i+1,j} + p_{i+1,j+1} u_{i+1,j+1} + p_{i,j+1} u_{i,j+1} + p_{i-1,j} u_{i-1,j} + p_{i,j-1} u_{i,j-1} - \frac{F_{i,j}}{Q_{i,j}}$$

deduïm que

$$F_{i,j} = 0$$

$$Q_{i,j} = 2 \left(\frac{1}{h^2} + \frac{M}{k^2} \right)$$

$$p_{i+1,j} = \frac{1}{2 \left(1 + M \frac{h^2}{k^2} \right)}$$

$$p_{i-1,j} = \frac{1}{2 \left(1 + M \frac{h^2}{k^2} \right)}$$

$$p_{i,j+1} = \frac{M}{2 \left(M + \frac{k^2}{h^2} \right)}$$

$$p_{i,j-1} = \frac{M}{2 \left(M + \frac{k^2}{h^2} \right)}$$

$$p_{i+1,j+1} = 0$$

Observem que totes les p 's són positives. És senzill comprovar que:

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

Ara calculem analíticament la solució:

Si $h = k = \frac{1}{2}$, és a dir, si la retícula és la de la figura 1

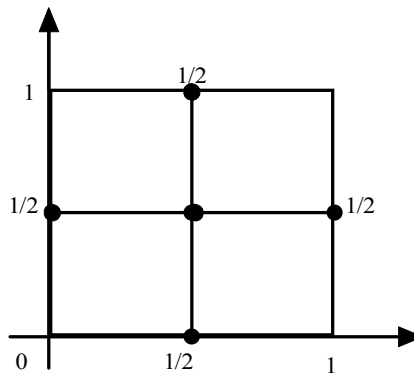


Fig. 1

resulta que

$$p_{i+1,j} = p_{i-1,j} = \frac{1}{2(1+M)}$$

$$p_{i,j+1} = p_{i,j-1} = \frac{M}{2(1+M)}$$

Amb la fórmula (5):

$$u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2(1+M)} u\left(1, \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2(1+M)} u\left(0, \frac{1}{2}\right) + \frac{M}{2(1+M)} u\left(\frac{1}{2}, 1\right) + \frac{M}{2(1+M)} u\left(\frac{1}{2}, 0\right)$$

$$u\left(1, \frac{1}{2}\right) = -\frac{M}{2} + \frac{1}{8} \qquad u\left(\frac{1}{2}, 1\right) = -\frac{M}{8} + \frac{1}{2}$$

$$u\left(0, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{8} \qquad u\left(\frac{1}{2}, 0\right) = -\frac{M}{8}$$

arribem a :

$$u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2(1+M)} \left(-\frac{M}{2} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} - \frac{M^2}{8} + \frac{M}{2} - \frac{M^2}{8} \right) = \frac{1}{8}(1-M)$$

El valor del camp $u(x,y)$ en $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ és donat per:

$$u(x,y) = -M \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} \rightarrow u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = -\frac{M}{8} + \frac{1}{8} = \frac{1}{8}(1-M)$$

per tant, el mètode anterior reproduïx el valor de $u(x,y)$ en el punt considerat. Però, fins ara no hem utilitzat *Monte Carlo*, aleshores el nostre objectiu és comprovar que podem obtenir el valor de $u(x,y)$ directament a partir de l'expressió

$$u(z) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left(u(P_{m_k}^k) - \sum_{j=0}^{m_k-1} \frac{F(P_j^k)}{Q(P_j^k)} \right)$$

on els P_{m_k} són els punts de la frontera i $P_0^k, P_1^k, \dots, P_{m_k-1}^k$ són els nodes visitats en el llançament k .

En una retícula com la de la figura 1, les trajectòries aleatòries són $\{P_0, P_1\}$, $\{P_0, P_2\}$, $\{P_0, P_3\}$, $\{P_0, P_4\}$ i K llançaments tindrem K_1 arribades a P_1 , K_2 arribades a P_2 , K_3 a P_3 i K_4 arribades a P_4 . L'equació anterior esdevé:

$$u(z) = \frac{K_1}{K} u(P_1) + \frac{K_2}{K} u(P_2) + \frac{K_3}{K} u(P_3) + \frac{K_4}{K} u(P_4) - \frac{F(P_0)}{Q(P_0)}$$

Per a K grans el quocient $\frac{K_i}{K}$ és la probabilitat del camí $\{P_0, P_i\}$ i com que $F=0$ aquesta expressió és idèntica a (3).

A més, en aquest exemple

$$\frac{p_{i+1,j}}{p_{i,j+1}} = \frac{\left(\frac{k^2}{h^2} + M\right)}{M \left(1 + M \frac{h^2}{k^2}\right)} = \frac{(k^2 + Mh^2) \frac{1}{h^2}}{\frac{M}{k^2} (k^2 + Mh^2)} = \frac{1}{M} \frac{k^2}{h^2}$$

per tant, per a una discretització donada (per exemple, per a $h=k$), en augmentar M hi haurà més diferència entre ambdues probabilitats. (veure apartat 5.2.1)

Si prenem una retícula més fina (fig.2) les possibilitats per als diferents camins aleatoris augmenten considerablement. En el capítol 5 presentem els resultats per a aquest problema quan es pren una retícula més fina i per a diferents valors del paràmetre M .

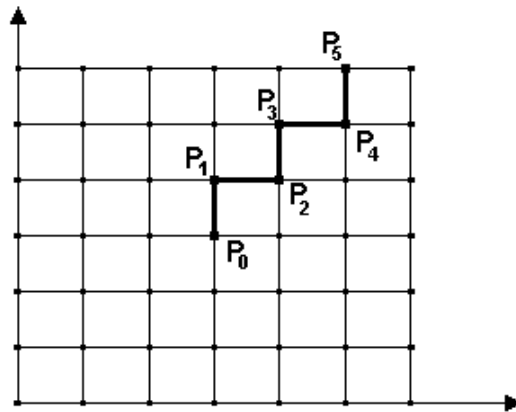


Figura 2.

Exemple 2:

Partim del camp de l'exemple 1:

$$u(x, y) = -M \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} \quad (x, y) \in [0, 1], M > 0$$

Si derivem dues vegades respecte de x i y ,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -M$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 1$$

i sumem ambdues expressions obtenim l'equació no homogènia

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 1 - M$$

que té per solució $u(x, y)$.

Si comparem amb l'expressió general de les EDP de 2n ordre veiem que es tracta d'una equació de tipus el·líptic:

$$\left. \begin{array}{l} A = 1 \\ B = 0 \\ C = 1 \end{array} \right\} \Rightarrow B^2 - AC = -1 < 0$$

Repetim l'esquema utilitzat en l'exemple 1:

1. Discretització de l'equació diferencial

a) Discretització de la variable x :

$$x_i = 0 + ih$$

$$h = \frac{1 - 0}{n} = \frac{1}{n}$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, n$$

$$x_0 = 0$$

$$x_n = nh = 1$$

b) Discretització de la variable y :

$$\begin{aligned} y_j &= 0 + jk \\ k &= \frac{1-0}{m} = \frac{1}{m} \\ j &= 0,1,2,\dots,m \\ y_0 &= 0 \\ y_m &= mk = 1 \end{aligned}$$

c) Condicions de contorn sobre la frontera (Dirichlet)

$$\begin{aligned} u_{i,0} &= u(x_i, 0) = -M \frac{x_i^2}{2} \\ u_{i,m} &= u(x_i, y_m) = u(x_i, 1) = -M \frac{x_i^2}{2} + \frac{1}{2} \\ u_{0,j} &= u(x_0, y_j) = u(0, y_j) = \frac{y_j^2}{2} \\ u_{n,j} &= u(x_n, y_j) = u(1, y_j) = -\frac{M}{2} + \frac{y_j^2}{2} \end{aligned}$$

2. Aproximació en *diferències finites* i obtenció de la solució $u_{i,j}$

Si aproximem les derivades parcials

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_j)}{\partial y^2} \approx \frac{u(x_i, y_j + k) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_j - k)}{k^2} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}$$

$$\frac{\partial^2 u(x_i, y_j)}{\partial x^2} \approx \frac{u(x_i + h, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i - h, y_j)}{h^2} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

i les substituïm en l'equació diferencial obtenim:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2} = 1 - M$$

Aïllant $u_{i,j}$ s'arriba a l'expressió:

$$u_{i,j} = \frac{1}{2h^2\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2}\right)}u_{i+1,j} + \frac{1}{2h^2\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2}\right)}u_{i-1,j} + \frac{1}{2k^2\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2}\right)}u_{i,j+1} + \frac{1}{2k^2\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2}\right)}u_{i,j-1} - \frac{1-M}{2\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2}\right)} \quad (6)$$

Si comparem aquesta expressió amb la relació (3) obtinguda en aquest capítol

$$u_{i,j} = p_{i+1,j}u_{i+1,j} + p_{i+1,j+1}u_{i+1,j+1} + p_{i,j+1}u_{i,j+1} + p_{i-1,j}u_{i-1,j} + p_{i,j-1}u_{i,j-1} - \frac{F_{i,j}}{Q_{i,j}}$$

deduïm que

$$F_{i,j} = 1 - M$$

$$Q_{i,j} = 2\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{k^2}\right)$$

$$p_{i+1,j} = \frac{1}{2\left(1 + \frac{h^2}{k^2}\right)}$$

$$p_{i-1,j} = \frac{1}{2\left(1 + \frac{h^2}{k^2}\right)}$$

$$p_{i,j+1} = \frac{1}{2\left(1 + \frac{k^2}{h^2}\right)}$$

$$p_{i,j-1} = \frac{1}{2\left(1 + \frac{k^2}{h^2}\right)}$$

$$p_{i+1,j+1} = 0$$

Observem que totes les p 's són positives. És senzill comprovar que:

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

Anem a calcular analíticament la solució:

Si $h = k = \frac{1}{2}$, és a dir, si la retícula és el de la figura 1

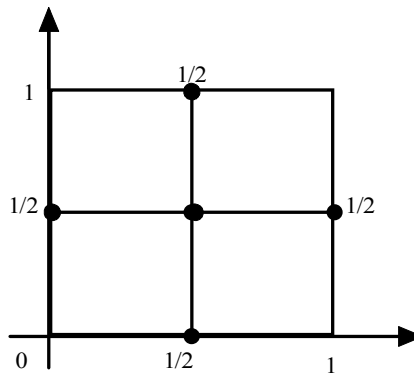


Fig. 1

resulta que

$$F_{i,j} = 1 - M \quad Q_{i,j} = 16$$

$$p_{i+1,j} = p_{i-1,j} = p_{i,j+1} = p_{i,j-1} = \frac{1}{4}$$

Des de la posició $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ podem anar a la posició $\left(1, \frac{1}{2}\right)$ amb probabilitat $\frac{1}{4}$, a la posició $\left(0, \frac{1}{2}\right)$ amb probabilitat $\frac{1}{4}$, a la posició $\left(\frac{1}{2}, 1\right)$ amb probabilitat $\frac{1}{4}$ i a la posició $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ amb probabilitat $\frac{1}{4}$.

Amb la fórmula (6):

$$u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}u\left(1, \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{4}u\left(0, \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{4}u\left(\frac{1}{2}, 1\right) + \frac{1}{4}u\left(\frac{1}{2}, 0\right) - \frac{1-M}{16}$$

$$u\left(1, \frac{1}{2}\right) = -\frac{M}{2} + \frac{1}{8} \qquad u\left(\frac{1}{2}, 1\right) = -\frac{M}{8} + \frac{1}{2}$$

$$u\left(0, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{8} \qquad u\left(\frac{1}{2}, 0\right) = -\frac{M}{8}$$

arribem a :

$$u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4} \left(-\frac{M}{2} + \frac{1}{8} + \frac{1}{8} - \frac{M}{8} + \frac{1}{2} - \frac{M}{8} \right) - \frac{1-M}{16} = \frac{1}{8}(1-M)$$

El valor del camp $u(x,y)$ en $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ és:

$$u(x,y) = -M \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2} \quad \rightarrow \quad u\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = -\frac{M}{8} + \frac{1}{8} = \frac{1}{8}(1-M)$$

Capítol 5. Exemples de resolució d'EDP

5.1. Algorisme

5.2. Exemples

5.2.1. Resolució de l'equació diferencial el·líptica homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + M \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

5.2.2. Resolució de l'equació diferencial el·líptica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 6x + 2y$$

5.2.3. Resolució de l'equació diferencial el·líptica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 2x^2 + 2y^2 + 2$$

5.2.4. Resolució de l'equació diferencial parabòlica homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

5.2.5. Resolució de l'equació diferencial parabòlica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 2(1 + y^2)$$

5.2.6. Resolució de l'equació diferencial parabòlica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} = x^2$$

5.3. Conseqüències

5.1. Algorisme.

El nostre objectiu és la resolució d'equacions diferencials de 2n ordre en derivades parcials, l'expressió de les quals és:

$$A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} = F(x, y)$$

El mètode proposat és vàlid per a equacions parabòliques i el·líptiques, ja que en ambdós casos les probabilitats surten positives (si no ho són d'entrada, sempre podem reduir l'equació a la forma canònica, vegeu el capítol 1) i hem fet ús de condicions de contorn de tipus Dirichlet (*).

Ara calcularem el valor de la solució de l'EDP en un punt del domini. L'esquema que s'ha de seguir és:

- a. Discretitzem el domini, és a dir, elegim un valor per a h i per a k . Açò ens dóna la xarxa de punts (vegeu la figura 2 del capítol 4).
- b. Avaluarem la solució $u(x, y)$ en un punt de la retícula utilitzant l'expressió

$$u(z) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left(u(P_{m_k}^k) - \sum_{j=0}^{m_k-1} \frac{F(P_j^k)}{Q(P_j^k)} \right)$$

on P_{m_k} són els punts de la frontera i $P_0^k, P_1^k, \dots, P_{m_k-1}^k$ són els nodes pels quals passem en el llançament k .

Per a simular-ho fem ús de l'algorisme següent:

1. Suposem que volem avaluar la solució en (x_0, y_0) . Fem $x=x_0, y=y_0$

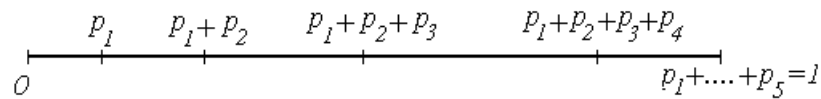
* En aquest treball hem utilitzat condicions de contorn tipus Dirichlet. Si les condicions són de Neumann s'ha de treballar amb una filosofia semblant, però amb un tractament una mica diferent [1].

Si les condicions de contorn no són de Dirichlet (per exemple, de Neumann o mixtes) aleshores quan s'arriba a la frontera existirà una probabilitat de deixar-la i tornar a entrar en el domini. Si es deixa la frontera aleshores continua el procés; si no, el valor de la frontera s'emmagatzema, i comencem una nova iteració des de $z=P_0$.

2. Mentre que $(x,y) \notin$ frontera repetim l'algorisme

- Generem un nombre aleatori r (vegeu l'annex 2).
- Calculem en (x,y) les probabilitats p_1, p_2, p_3, p_4, p_5 .
- Obtenim les coordenades del node de destí de la manera següent:

Representem les probabilitats en l'interval $[0,1]$



i seleccionem el node de destí en funció del subinterval en què cau el nombre aleatori:

- si $r \in [0, p_1]$, el node de destí serà $(x + h; y + k)$
- si $r \in]p_1, p_1 + p_2]$, el node de destí serà $(x + h; y)$
- si $r \in]p_1 + p_2, p_1 + p_2 + p_3]$, el node de destí serà $(x; y + k)$
- si $r \in]p_1 + p_2 + p_3, p_1 + p_2 + p_3 + p_4]$, el node de destí serà $(x - h; y)$
- si $r \in]p_1 + p_2 + p_3 + p_4, 1]$, el node de destí serà $(x; y - k)$

Per comoditat, hem triat $h=k$.

La codificació d'aquest algorisme ha estat realitzada amb el programa MATLAB 5.3.

5.2 Exemples.

5.2.1. Resolució de l'equació diferencial el·líptica homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + M \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Com hem vist en l'exemple 1 del capítol 4 el camp

$$u(x, y) = -M \frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2}, \quad M > 0 \quad (x, y) \in [0, 1]$$

és una solució d'aquesta equació.

Ara obtenim una solució aproximada al valor de $u(0.5, 0.5)$ per a diferents valors de M , fixant el valor de $h=k=0.1$ i prenent un nombre d'iteracions $N=100.000$.

a. M=1

Solució exacta $u(0.5, 0.5) = 0$

Solució obtinguda mitjançant l'algorisme *Monte Carlo*

$$u(0.5, 0.5) \approx 7.795 \times 10^{-5}$$

En la figura 5.2.1a hem representat el nombre de vegades que els camins aleatoris travessen cada node (i, j)

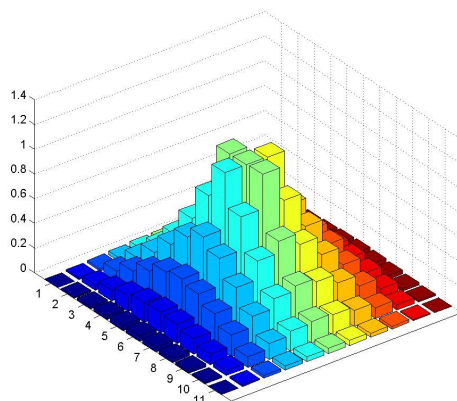


Fig 5.2.1a₁

Les figures 5.2.1a₂ i 5.2.1a₃ corresponen a la intersecció de la figura anterior amb els plans $x=0$ i $y=0$, i representen el nombre de vegades que arribem a cada punt de la frontera. com que en aquest cas

$$p_{i-1,j} = p_{i+1,j} = \frac{1}{2\left(1 + M \frac{h^2}{k^2}\right)} = \frac{1}{4} \quad p_{i,j+1} = p_{i,j-1} = \frac{M}{2\left(M + \frac{k^2}{h^2}\right)} = \frac{1}{4}$$

les dues figures ixen iguals, per a un nombre d'iteracions suficientment gran (recordem que hem pres $N=100.000$).

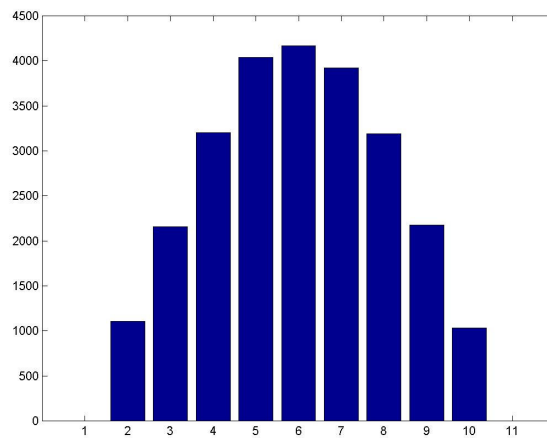


Fig 5.2.1a₂

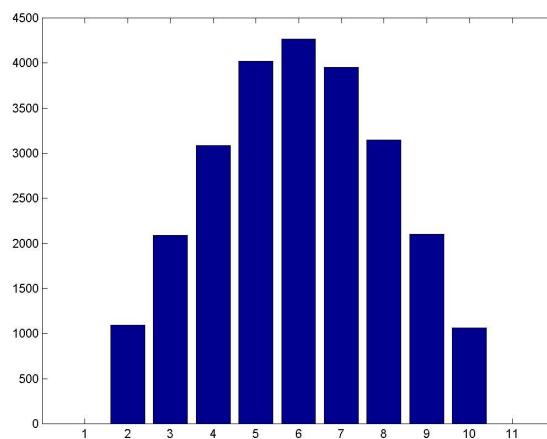


Fig 5.2.1a₃

b. M=10

Solució exacta $u(0.5,0.5) = -1.1250$

Solució obtinguda mitjançant l'algorisme *Monte Carlo*

$$u(0.5,0.5) \approx -1.1196$$

En la figura 5.2.1b₁ hem representat el nombre de vegades que els camins aleatoris travessen cada node (i,j) . En les figures 5.2.1b₁, 5.2.1b₂, 5.2.1b₃ ja s'observa una direcció privilegiada. Açò ja ho esperàvem perquè

$$\frac{p_{i+1,j}}{p_{i,j+1}} = \frac{1}{10} = \frac{p_{i-1,j}}{p_{i,j-1}}$$

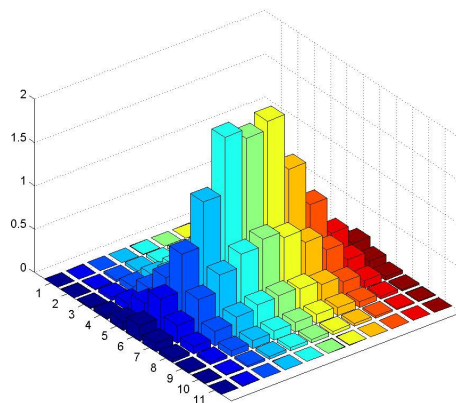


Fig 5.2.1b₁

En les dues figures que es mostren a continuació podem veure que el nombre de vegades que arribem a $y=0$ (Fig 5.2.1b₂) és considerablement superior al nombre de vegades que arribem a $x=0$ (Fig 5.2.1b₃).

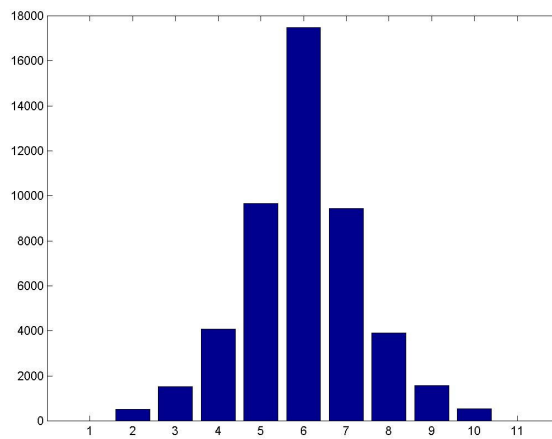


Fig 5.2.1b₂

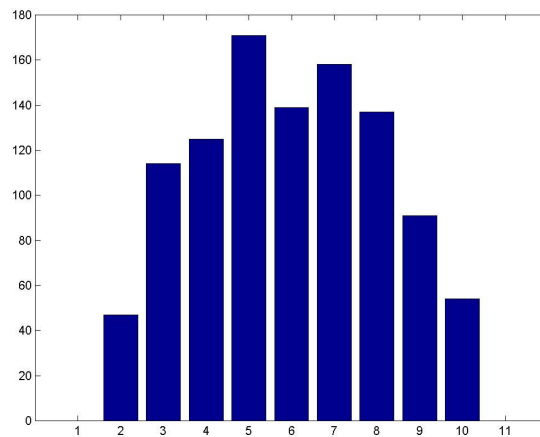


Fig 5.2.1b₃

c. M=100

Solució exacta $u(0.5,0.5) = -12.3750$

Solució obtinguda mitjançant l'algorisme *Monte Carlo*

$$u(0.5,0.5) \approx -12.3616$$

En la figura 5.2.1c₁ hem representat el nombre de vegades que els camins aleatoris travessen cada node (i,j)

Apareix un camí altament probable. Açò ho podem veure de la relació entre probabilitats

$$\frac{p_{i+1,j}}{p_{i,j+1}} = \frac{1}{100} = \frac{p_{i-1,j}}{p_{i,j-1}}$$

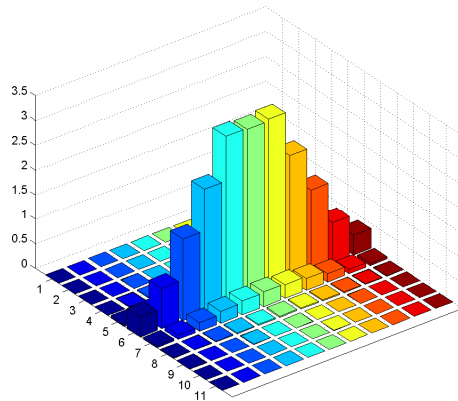


Fig 5.2.1c₁

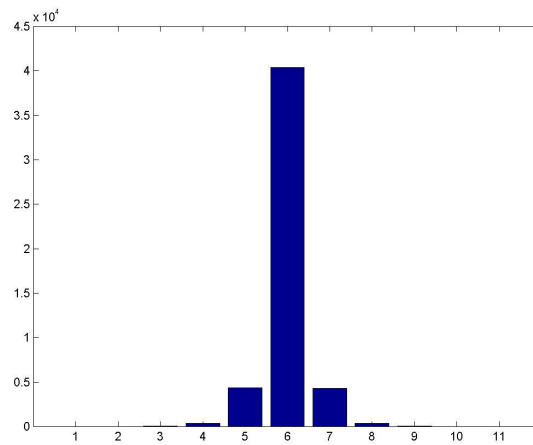


Fig 5.2.1c₂

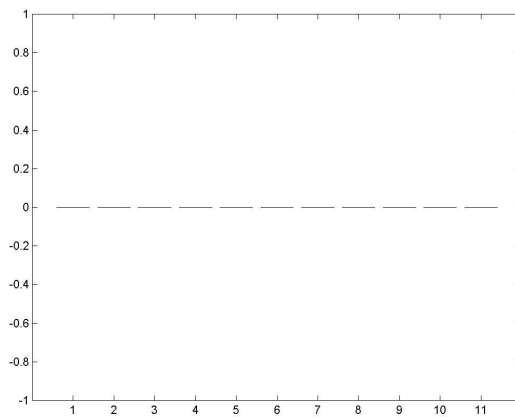


Fig 5.2.1c₃

El nombre de vegades que arribem a $x=0$ és pràcticament zero com ho podem veure en la figura 5.2.1c₃. Una aproximació a la solució en $(0.5, 0.5)$ seria

$$u(0.5, 0.5) \approx \frac{1}{2} [u(0.5, 0) + u(0.5, 1)] = -12.25$$

5.2.2. Resolució de l'equació diferencial el·líptica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 6x + 2y$$

La solució d'aquesta equació és

$$u(x, y) = yx^2 + x^3$$

$$u(0.5, 0.5) = 0.25$$

$$u(0.4, 0.4) = 0.128$$

Com que coneixem la solució exacta podem estudiar l'error en funció de N, nombre d'iteracions, i de h, que ens dóna el nombre de punts de la retícula.

La taula 5.2.2a conté els valors aproximats de $u(0.5, 0.5)$ per a diferents valors de h i per a un nombre d'iteracions fix N=100.000. En la tercera columna **error** representa la diferència en valor absolut entre la solució exacta i la solució aproximada. En la figura 5.2.2a es representa l'error en funció de h per a N=100.000.

h	u(0.5,0.5)	error
0,25	0,253272	0,003272
0,1	0,252165	0,002165
0,05	0,251856	0,001856
0,025	0,251375	0,001375
0,0125	0,2492835	0,0007165

Taula 5.2.2a

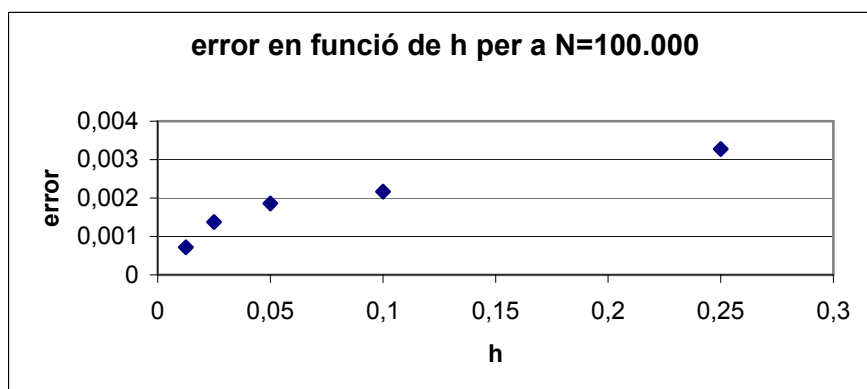


Fig 5.2.2a

Prenem $h=k=0.1$ i estudiem la solució en funció del nombre d'iteracions N. Avaluarem la solució en dos punts (0.5,0.5) i (0.4,0.4). Els resultats obtinguts es mostren en les taules 5.2.2b i 5.2.2c.

N	u(0.5,0.5)	error
10000	0,255316	0,005316
50000	0,252499	0,002499
100000	0,252165	0,002165
200000	0,251068	0,001068
500000	0,250999	0,000999
800000	0,25107	0,00107
1000000	0,250988	0,000988
1200000	0,250955	0,000955
1500000	0,250273	0,000273

Taula 5.2.2b

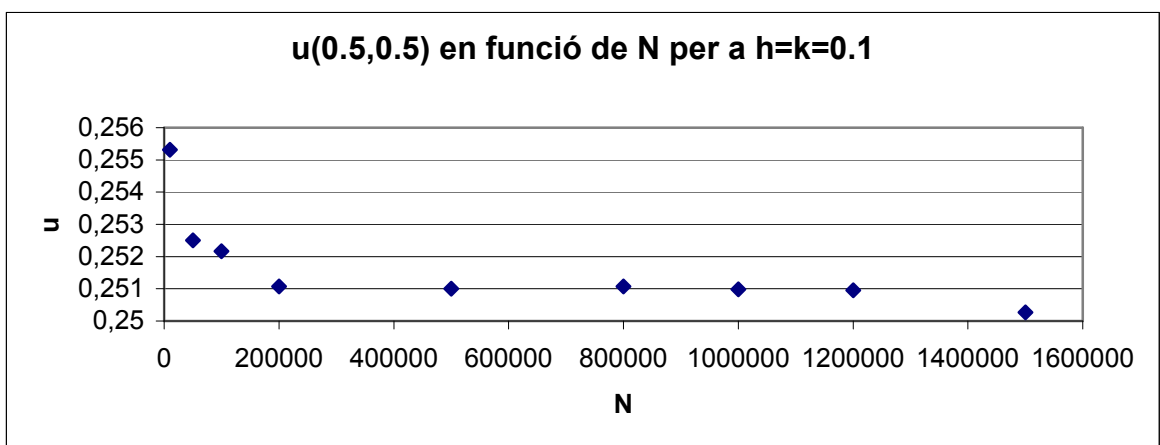


Fig 5.2.2b₁

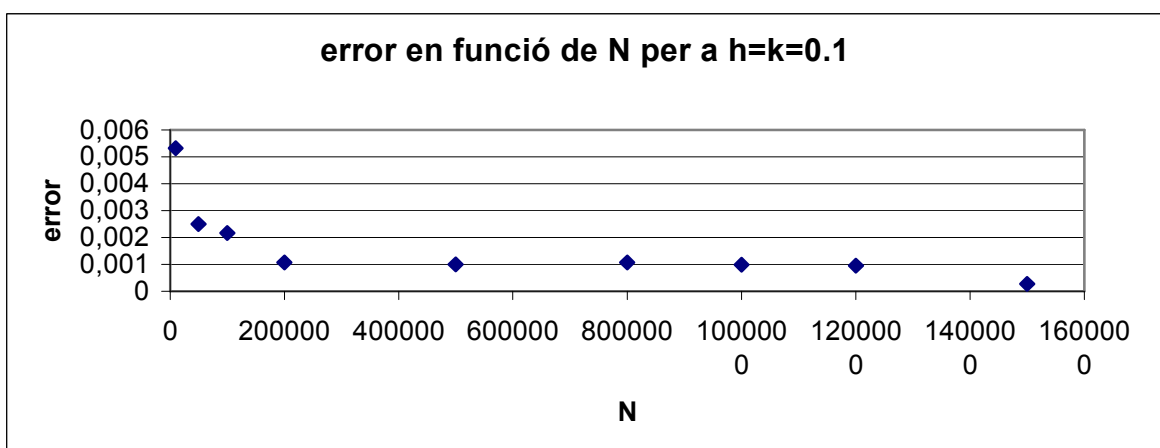


Fig 5.2.2b₂

N	u(0.4,0.4)	error
10000	0,13163285	0,00363285
50000	0,1303308	0,0023308
200000	0,12867302	0,00067302
300000	0,12856377	0,00056377
500000	0,12837449	0,00037449
700000	0,12819365	0,00019365
900000	0,12817957	0,00017957
1000000	0,12818095	0,00018095
1100000	0,12816266	0,00016266
1300000	0,12809559	9,5589E-05
1400000	0,12804243	4,2426E-05

Taula 5.2.2c

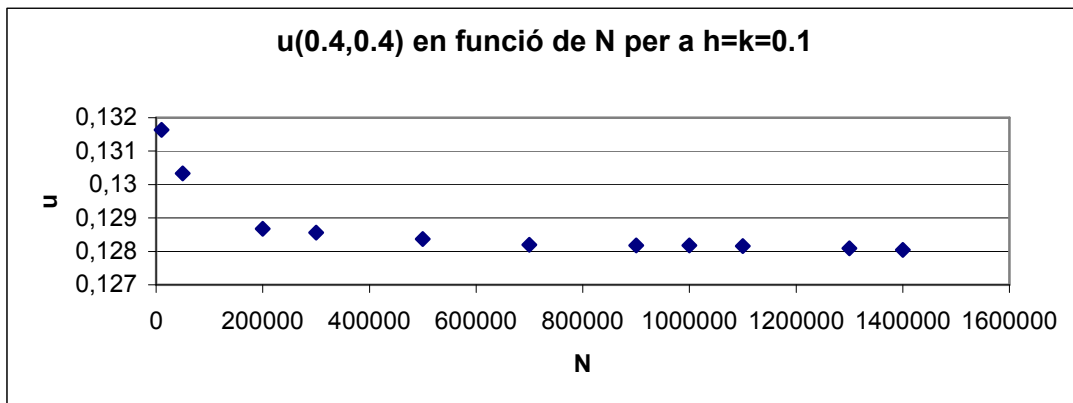


Fig 5.2.2c₁

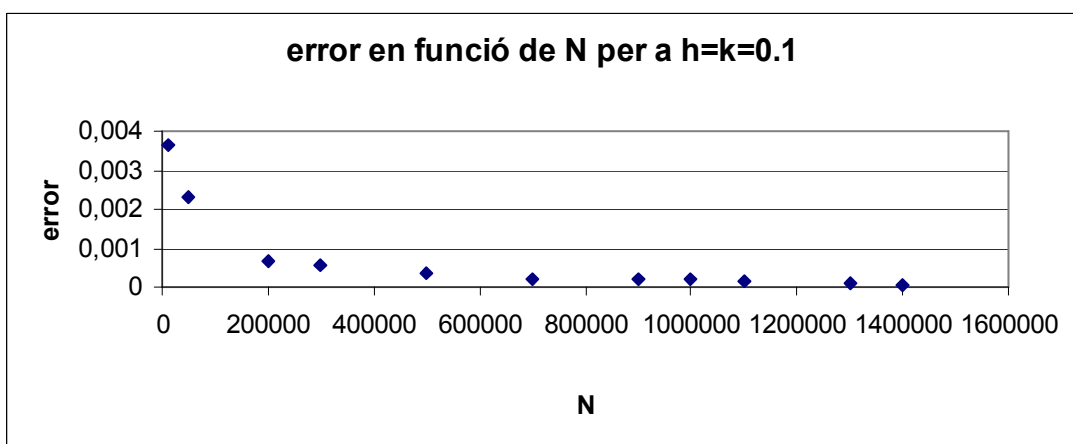


Fig 5.2.2c₂

5.2.3. Resolució de l'equació diferencial el·líptica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 2x^2 + 2y^2 + 2$$

La solució d'aquesta equació és:

$$u(x, y) = x^2(1 + y^2)$$

$$u(0.5, 0.5) = 0.3125$$

La taula 5.2.3a mostra el valor aproximat de $u(0.5, 0.5)$ per a diferents valors de h i per a $N=100.000$. En la figura 5.2.3a es representa l'error absolut en funció de h per a un nombre d'iteracions fix ($N=100.000$).

h	u(0.5,0.5)	error
0,25	0,31508574	0,00258574
0,1	0,31392463	0,00142463
0,05	0,31339363	0,00089363
0,025	0,31277187	0,00027187

Taula 5.3.2a

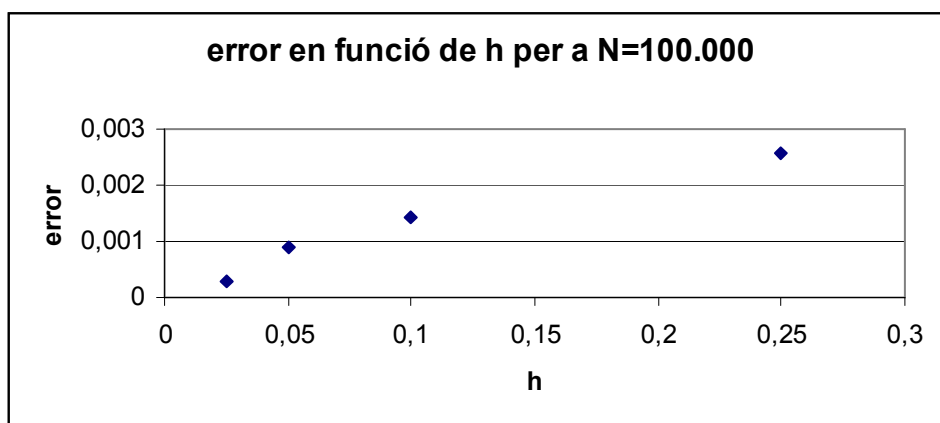


Fig 5.2.3a

Ara fixem el valor dels paràmetres h i k i estudiem la solució en funció del nombre d'iteracions. Els resultats es mostren en la taula 5.2.3b i el les figures 5.2.3b₁ i 5.2.3b₂.

N	u(0.5,0.5)	error
10000	0,31718389	0,00468389
50000	0,31435506	0,00185506
100000	0,31392463	0,00142463
200000	0,31301174	0,00051174
500000	0,31360848	0,00052898
600000	0,31348899	0,00050608
900000	0,31321229	0,00044916

Taula 5.2.3b

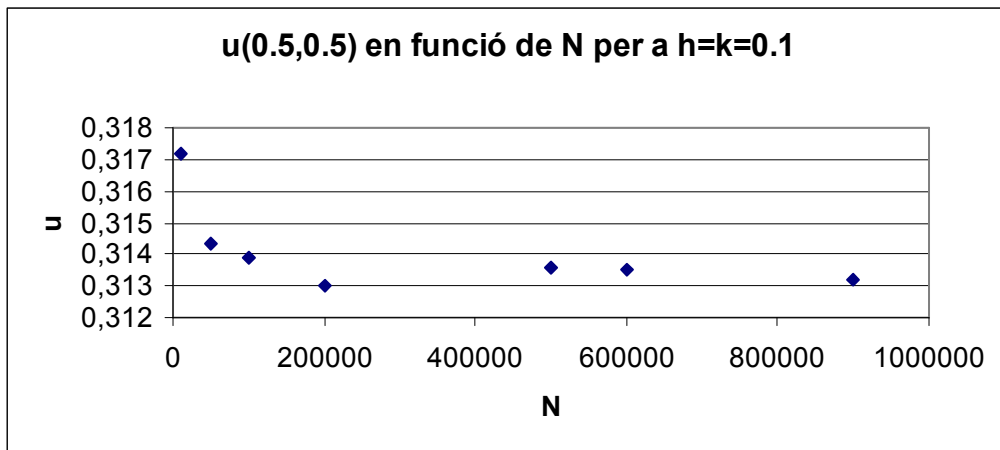


Fig 5.2.3b₁

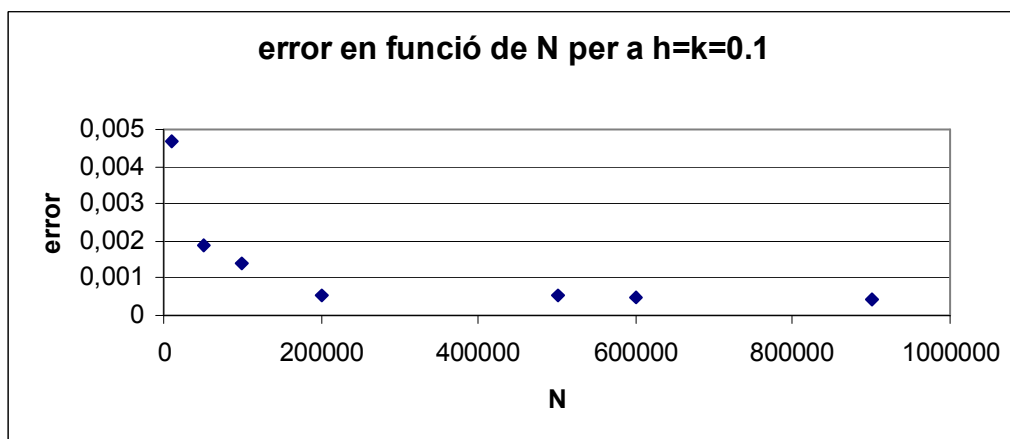


Fig 5.2.3b₂

5.2.4. Resolució de l'equació diferencial parabòlica homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

Hem generat aquesta equació a partir del camp

$$u(x, y) = x^2 y + x^3$$

aleshores coneixem la solució exacta en el punt $(0.5, 0.5)$

$$u(0.5, 0.5) = 0.25$$

Fixem el nombre d'iteracions, $N=100000$ i estudiem la solució en el punt $(0.5, 0.5)$ en funció de h . Els resultats obtinguts es mostren en la taula 5.2.4a i en les figures 5.2.4a₁ i 5.2.4a₂.

h	u(0.5,0.5)	error
0,5	0,2494425	0,0005575
0,25	0,2497675	0,0002325
0,125	0,2501850	0,0001850
0,1	0,2501890	0,0001890
0,05	0,2499214	0,0000786

Taula 5.2.4a

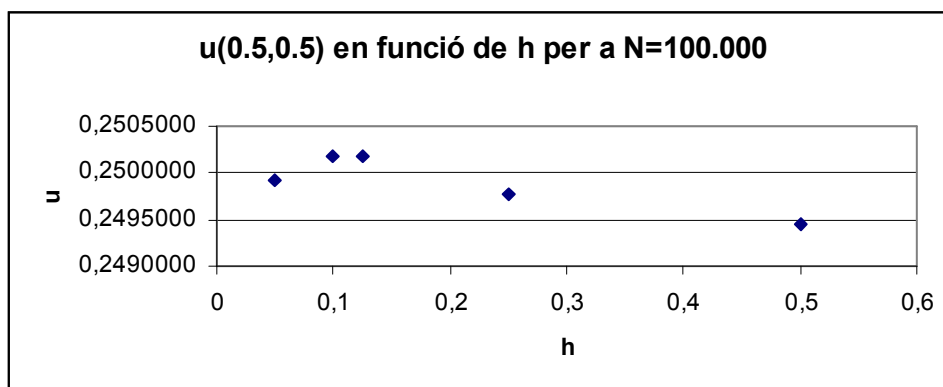


Fig 5.2.4a₁

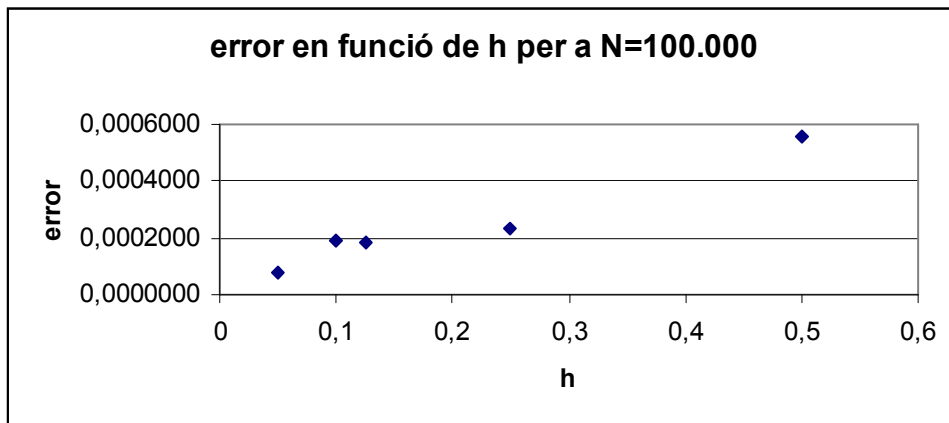


Fig.5.2.4a₂

Fixem ara el valor de $h=0.1$ i estudiem la solució en el punt $(0.5,0.5)$ en funció del nombre d'iteracions N . Presentem els resultats obtinguts en la taula 5.2.4b i en les figures 5.2.4b₁ i 5.2.4b₂.

N	u(0.5,0.5)	error
10000	0,248230	0,001770
40000	0,250398	0,000397
70000	0,250296	0,000296
100000	0,250189	0,000189
200000	0,249822	0,000179
500000	0,249919	0,000081
600000	0,250043	0,000043
700000	0,250014	0,000014

Taula 5.2.4b

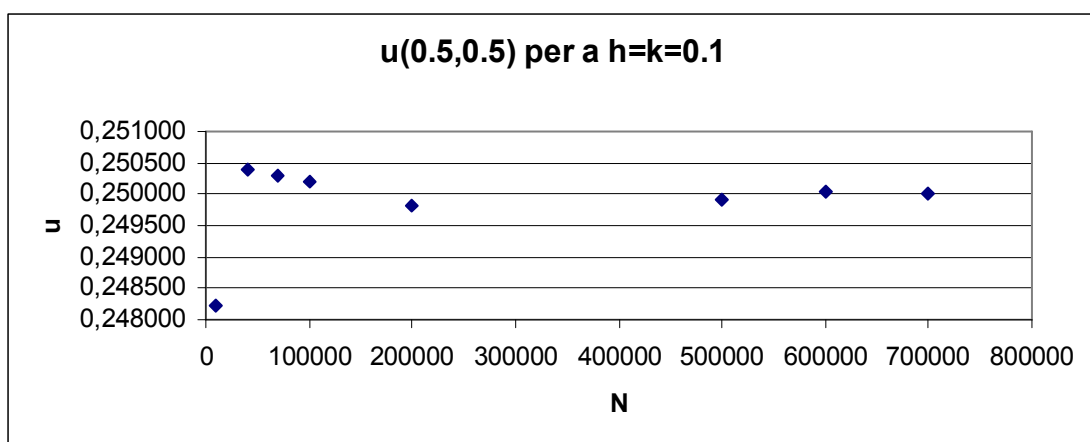


Fig 5.2.4b₁

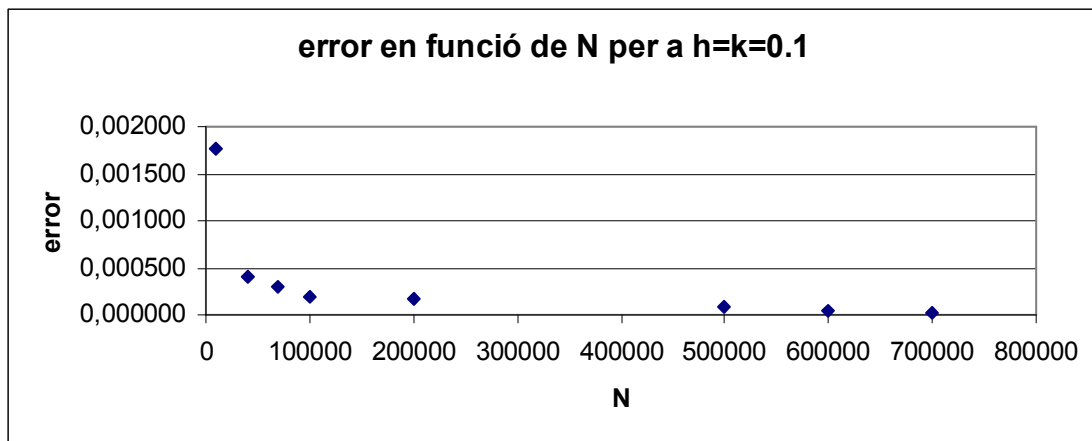


Fig 5.2.4b₂

Estudiem també la solució en els punts $(0.3,0.3)$ i $(0.8,0.8)$. Els valors exactes són

$$u(0.3,0.3)=0.054$$

$$u(0.8,0.8)=1.024$$

Els resultats es presenten en les taules 5.2.4c i 5.2.4d i en les gràfiques corresponents.

N	u(0.3,0.3)	error
10000	0,0534068	0,0005932
50000	0,0536655	0,0003345
90000	0,0537790	0,0002210
100000	0,0540617	0,0000617
200000	0,0539452	0,0000548
500000	0,0539549	0,0000451
800000	0,0539718	0,0000282
1000000	0,0539917	0,0000083
1300000	0,0539835	0,0000165
1500000	0,0539851	0,0000149

Taula 5.2.4c

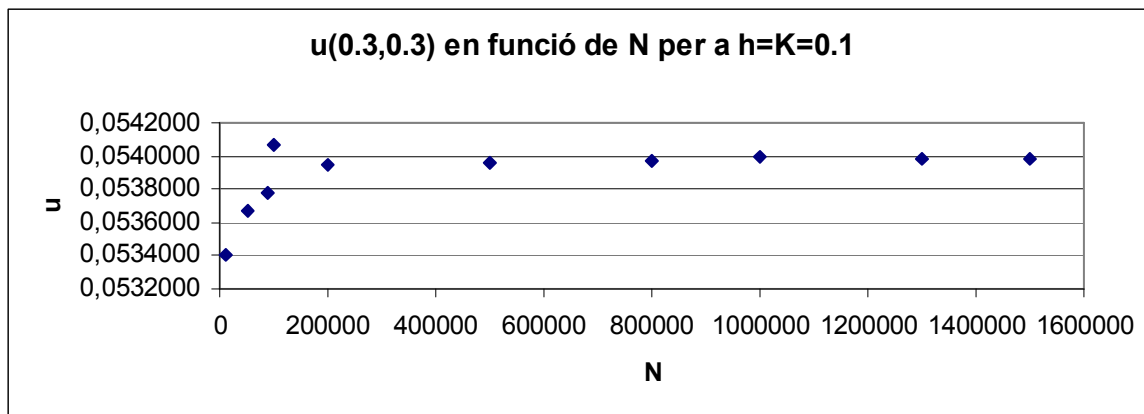


Fig 5.2.4c₁

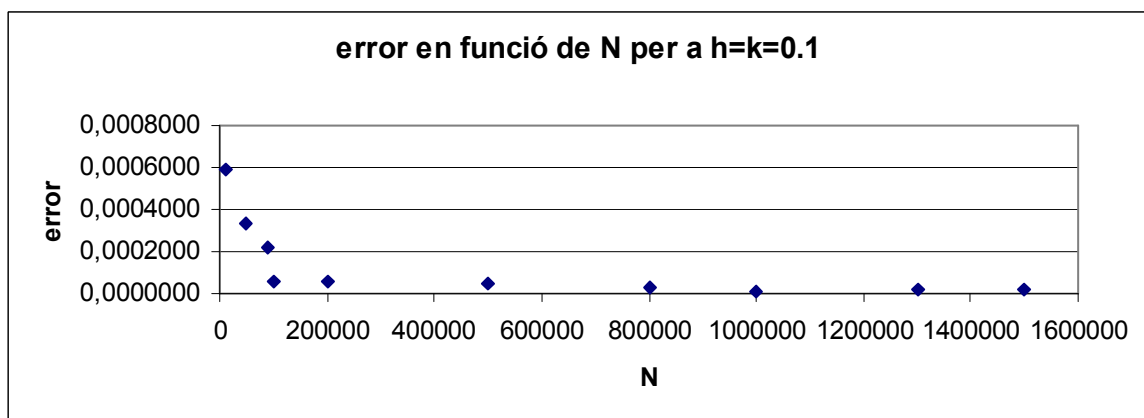


Fig 5.2.4c₂

N	u(0.8,0.8)	error
30000	1,0249045	0,0009045
50000	1,0232243	0,0007757
80000	1,0244967	0,0004967
90000	1,0243413	0,0003412
100000	1,0241254	0,0001254
300000	1,0238810	0,0001190
500000	1,0239095	0,0000905
700000	1,0239591	0,0000409
900000	1,0240172	0,0000172
1300000	1,0240099	0,0000099

Taula 5.2.4d

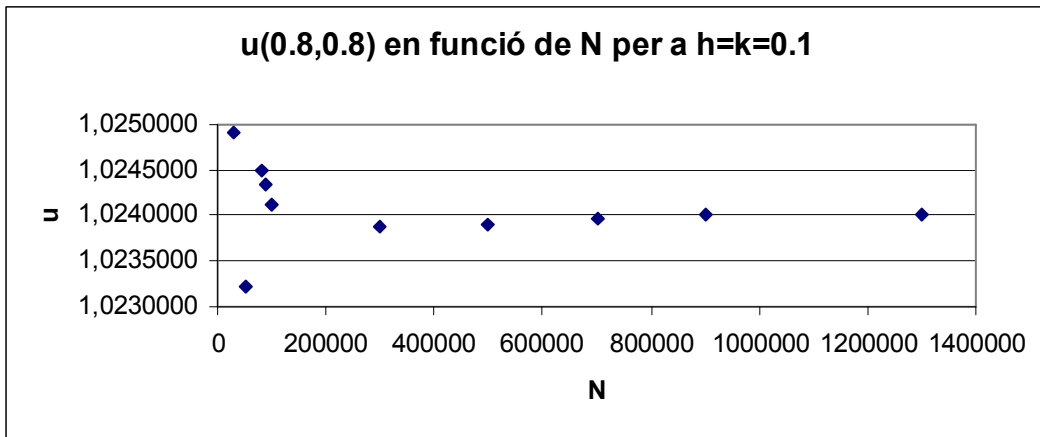


Fig 5.2.4d₁

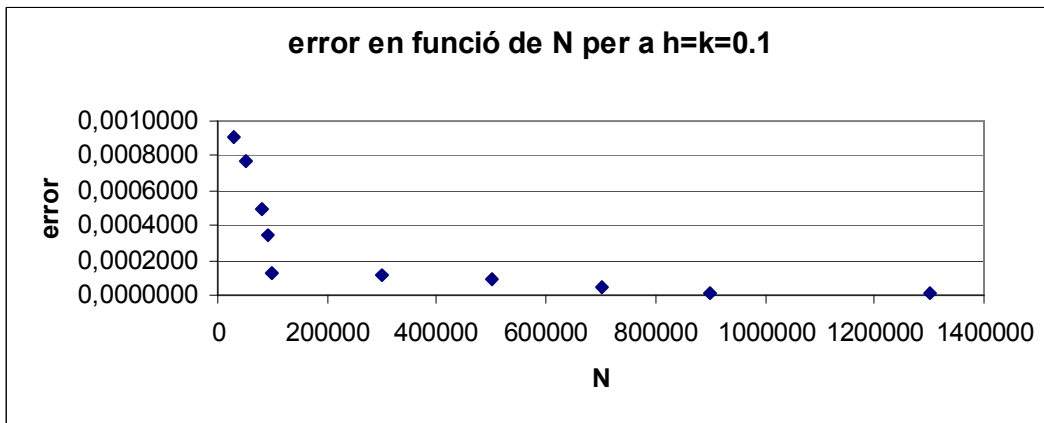


Fig 5.2.4d₂

5.2.5. Resolució de l'equació diferencial parabòlica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 2(1 + y^2)$$

El camp $u(x, y) = x^2(1 + y^2)$ és solució d'aquesta equació. Per comprovar-ho només cal derivar dues vegades el camp u respecte de x . El valor exacte de u en $(0.5, 0.5)$ és:

$$u(0.5, 0.5) = 0.3125$$

Fixem el nombre d'iteracions, $N=100.000$, i estudiem la solució aproximada en funció de h . Els resultats es presenten en la Taula 5.2.5a i en la figura 5.2.5a.

h	u(0.5,0.5)	error
0,5	0,3097125	0,0027875
0,25	0,3105919	0,0019810
0,125	0,3133720	0,0008720
0,1	0,3133670	0,0008670
0,01	0,3110660	0,0014340

Taula 5.2.5a

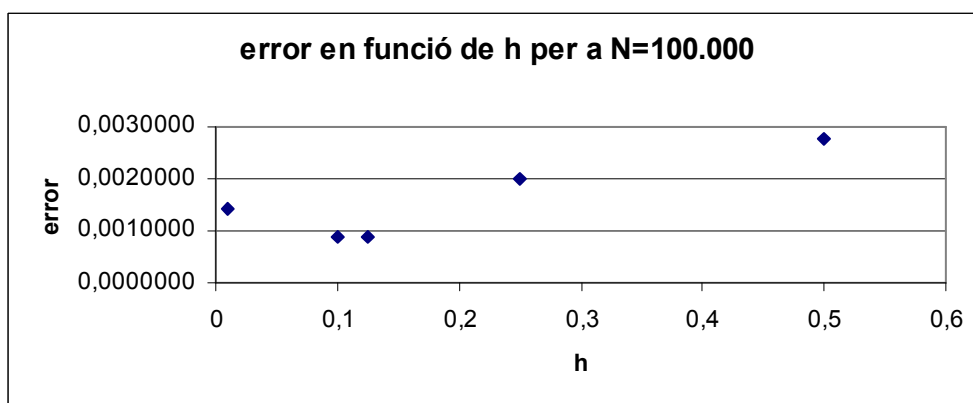


Fig 5.2.5a

Fixem ara el paràmetre $h=0.1$ i estudiem el valor aproximat de $u(0.5, 0.5)$ en funció del nombre d'iteracions N . Presentem els resultats en la taula 5.2.5b i en les figures 5.2.5b₁ i 5.2.5b₂.

N	u(0.5,0.5)	error
10000	0,3066125	0,0058875
50000	0,3157865	0,0032865
100000	0,3133673	0,0008673
300000	0,3121091	0,0003909
500000	0,3120679	0,0004321
800000	0,3126990	0,0001990
1100000	0,3125619	0,0000619
1300000	0,3124576	0,0000424

Taula 5.2.5b

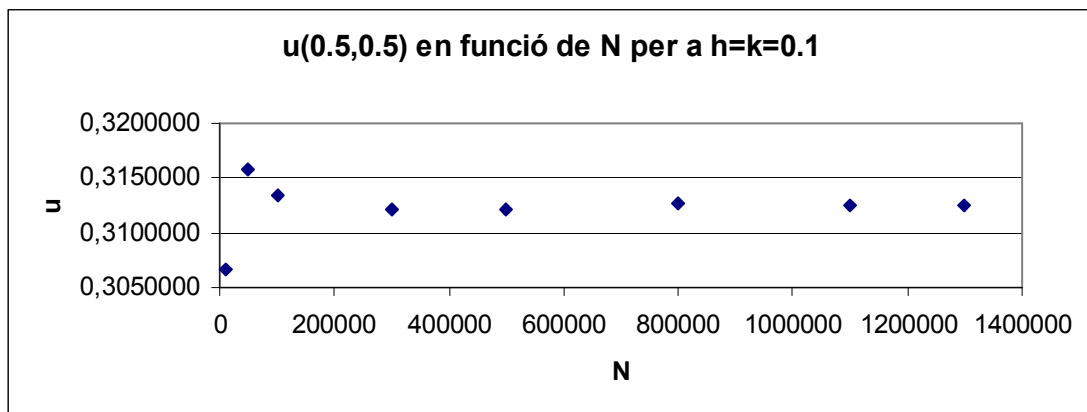


Fig 5.2.5b₁

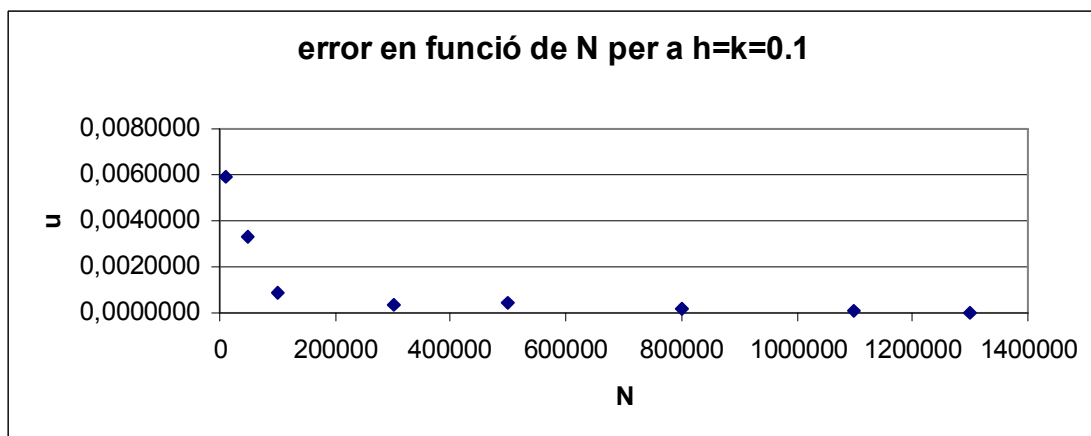


Fig 5.2.5b₂

5.2.6. Resolució de l'equació diferencial parabòlica no homogènia:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial u}{\partial y} = x^2$$

És senzill comprovar que el camp $u(x, y) = x^2 y + x^3$ és solució d'aquesta equació diferencial. Per tant la solució exacta en $(0.5, 0.5)$ és:

$$u(0.5, 0.5) = 0.25$$

Fixem el valor de $h=0.1$ i estudiem la solució aproximada de $u(0.5, 0.5)$ en funció de N . (taula 5.2.6 i figures 5.2.5a i 5.2.5b).

N	u(0.5,0.5)	error
10000	0,2481319	0,0018681
50000	0,2505036	0,0005036
100000	0,2504283	0,0004283
300000	0,2501588	0,0001588
600000	0,2500620	0,0000620
1100000	0,2500456	0,0000456
1200000	0,2500215	0,0000215
1300000	0,2500237	0,0000237

Taula 5.2.6

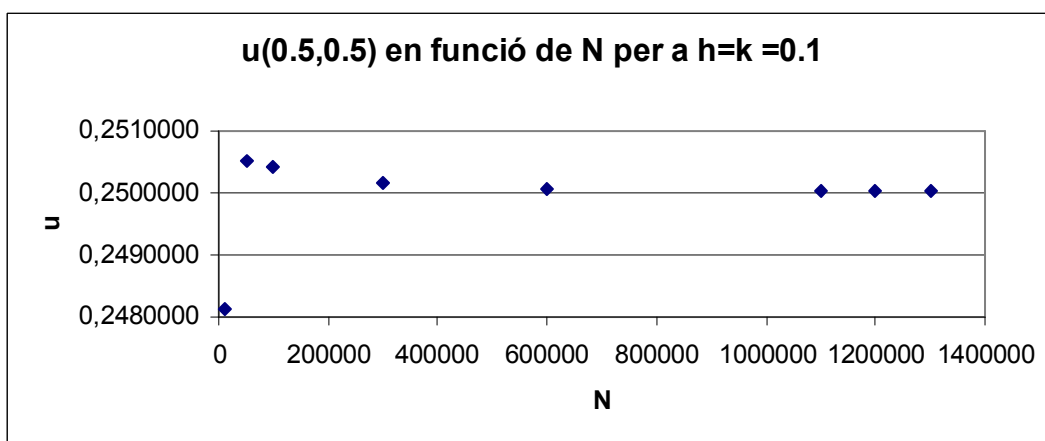


Fig 5.2.6a

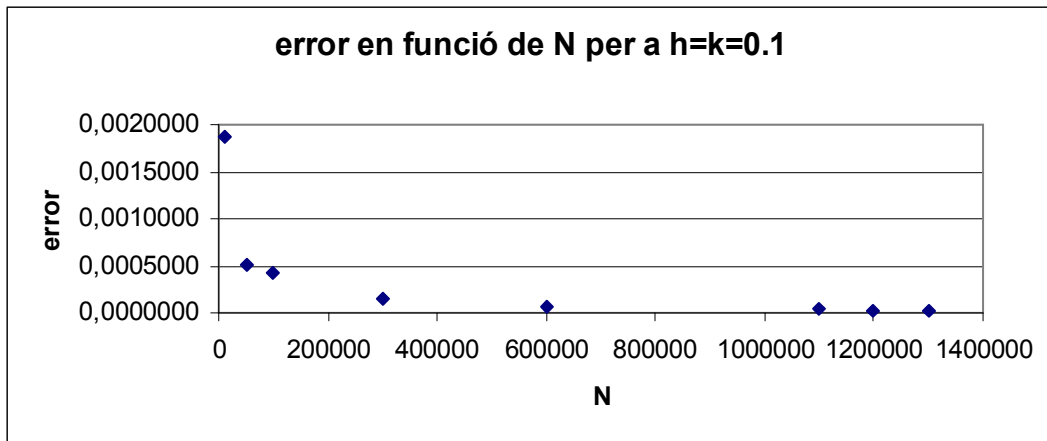


Fig 5.2.6b

5.3. Conseqüències

Aquests experiments numèrics mostren que les tècniques de simulació *Monte Carlo* són una ferramenta adequada tant des del punt de vista pedagògic, per a visualitzar la dinàmica que representa l'equació diferencial (vegeu l'exemple 5.2.1, figures 5.2.1 a₁, b₁, c₁) com des del punt de vista computacional per a resoldre problemes reals amb un mètode senzill conceptualment, i que és fàcil de programar en un codi d'ordinador. (vegeu els exemples 5.2.2 al 5.2.6). Tanmateix, com que les iteracions *Monte Carlo* són independents entre elles, el codi desenvolupat és altament paral·lelitzable.

Les figures que hem representat en aquest capítol mostren la tendència en l'error comès en la resolució numèrica en funció del nombre d'iteracions i de la discretització utilitzats en la resolució. Per a aprofundir en l'anàlisi de l'error comès vegeu la referència [8].

Capítol 6. Conclusions

En aquest treball s'ha abordat la resolució d'equacions diferencials en derivades parcials mitjançant les tècniques de simulació *Monte Carlo*. L'objectiu del treball ha sigut doble: d'una banda presentar un mètode alternatiu de resolució que siga senzill des del punt de vista conceptual (i que ha estat poc explotat en l'àmbit didàctic), i d'altra banda desenvolupar l'esquema de resolució i els algorismes de computació que calen per al càlcul de la solució de qualsevol equació diferencial en derivades parcials bé de tipus el·líptic, bé de tipus parabòlic.

Una de les característiques que destaca d'aquest plantejament és que permet visualitzar el comportament de la dinàmica continguda en la equació diferencial tal com s'ha presentat en l'apartat 5.2.1.

Tanmateix, s'han desenvolupat codis de computació que permeten abordar la resolució numèrica de les equacions el·líptiques i parabòliques. En els apartats 5.2.1 al 5.2.6 es presenta un conjunt ampli d'exemples numèrics que permet fer-nos una idea de la bondat i precisió del tractament *Monte Carlo*.

Una part dels continguts presentats poden donar lloc a un projecte de laboratori que es pot oferir a estudiants dels últims cursos de carreres tècniques. [7]

Annex 1. Construcció de l'estimador.

Al realitzar un experiment obtenim una sèrie de resultats que són estudiats per l'Estadística Descriptiva a fi de sintetitzar la informació obtinguda mitjançant una sèrie de paràmetres (com la mitjana, la desviació típica..) o de representacions gràfiques, que posen de manifest les característiques més significatives del fenomen.

Un fenomen s'anomena *determinista* si el resultat es previsible, tret d'errors de càlcul. No obstant això, en molts altres casos, el resultat no es previsible per molt que intentem reproduir les condicions en les quals el portem a terme. Per exemple, llançar un dau o una moneda. Aquests fenòmens s'anomenen *indeterministes*.

Un fenomen o experiment indeterminista s'anomena *aleatori* si pot donar lloc a diversos resultats tal que les freqüències relatives que presenten en una successió de realitzacions independents tendeixen a estabilitzar-se al voltant de certes quantitats numèriques en augmentar el nombre de repeticions efectuades. La *Teoria de Probabilitats* elabora els esquemes o models d'aquests fenòmens relacionant cadascun dels resultats possibles amb una mesura numèrica, la *probabilitat*.

En la formulació axiomàtica de la *Teoria de Probabilitats*, hom defineix una distribució de probabilitat per a un conjunt finit de successos incompatibles $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots, \omega_n\}$ com un conjunt de nombres reals $\{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ tal que:

$$\begin{aligned} \forall k \quad p_k &\geq 0 \\ \sum_{k=1}^n p_k &= 1 \\ p(A \subset \Omega) &= \sum_{\omega_k \in A} p_k \end{aligned}$$

on $p(A)$ representa la probabilitat del succés compost A , format per un subconjunt de successos elementals.

De forma anàloga, quan Ω és un conjunt infinit de successos caracteritzats per un nombre real x , que pot prendre valors en un interval de la recta real $I \subset R$, hom defineix una funció densitat de probabilitat $f(x)$ tal que

$$\forall x \in I \quad f(x) \geq 0$$

$$p(x \in I) = \int_I f(x) dx = 1$$

La probabilitat de que x prengui un valor comprès entre a i b és donada per

$$p(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x) dx$$

La variable x característica del succés s'anomena *variable aleatòria*.

El cas discret pot obtenir-se com un cas particular en el qual la funció densitat es del tipus:

$$f(x) = \sum_{k=1}^n p_k \delta(x - x_k)$$

on $\delta(\cdot)$ és la distribució delta de Dirac.

Qualsevol funció $\varphi(x)$ definida sobre l'interval I rep el nom de *funció aleatòria* i podria ser considerada com una nova variable aleatòria. L'*esperança matemàtica* o *valor esperat de φ* es defineix com:

$$E[\varphi] = \int_I dx f(x) \varphi(x)$$

En el cas particular en què φ és la identitat, l'equació anterior resulta:

$$E[x] = \int_I dx x f(x)$$

Un altre cas particular és aquell en què f és constant en I . Aleshores, la condició de normalització du a:

$$\frac{1}{|I|} = \int_I dx f(x) = \int_I dx \frac{1}{|I|} = \frac{1}{|I|} \int_I dx = \frac{1}{|I|} |I| = 1$$

és a dir, f és inversament proporcional a la longitud de l'interval I i $E[\varphi]$ coincideix amb el valor mitjà de la funció φ en I :

$$E[\varphi] = \frac{1}{|I|} \int_I dx \varphi(x)$$

Per al cas discret :

$$E[\varphi] = \int_I dx \left(\sum_{k=1}^n p_k \delta(x - x_k) \right) \varphi(x) = \sum_{k=1}^n p_k \varphi(x_k)$$

L'esperança és un operador lineal, això és, donades dues funcions aleatòries φ i ψ i dues constants a i b :

$$E[a\varphi + b\psi] = aE[\varphi] + bE[\psi]$$

Donada una funció de densitat $f(x)$ és possible generar N variables aleatòries independents seguint dita distribució:

$$x_1, x_2, \dots, x_N$$

Si definim la funció aleatòria

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \varphi(x_k)$$

resulta que Φ és un estimador de $E[\varphi]$.

Un *estimador* és una funció, el valor esperat de la qual coincideix amb el valor de la magnitud estimada:

$$E[\Phi] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N E[\varphi] = E[\varphi]$$

Emprem aquests conceptes per a justificar l'ús de l'expressió (4) del capítol 4 :

$$u(z) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left(\varphi(P_{m_k}^k) - \sum_{j=1}^{m_k-1} \frac{F(P_j^k)}{Q(P_j^k)} \right) \quad (1)$$

on $P_0^k, P_1^k, \dots, P_{m_k}^k$ representa el camí seguit en les K trajectòries *random*.

Partim de l'equació:

$$v_{i,j} = p_{i+1,j} v_{i+1,j} + p_{i+1,j+1} v_{i+1,j+1} + p_{i,j+1} v_{i,j+1} + p_{i-1,j} v_{i-1,j} + p_{i,j-1} v_{i,j-1} - \frac{F_{i,j}}{Q_{i,j}} \quad (2)$$

on $v_{ij} = u(x_i, y_j)$, és a dir, el valor de la funció u en el node i,j .

Suposem que fem una retícula elemental com la de la figura 1. Aquesta la representarem amb la notació de la figura 2.

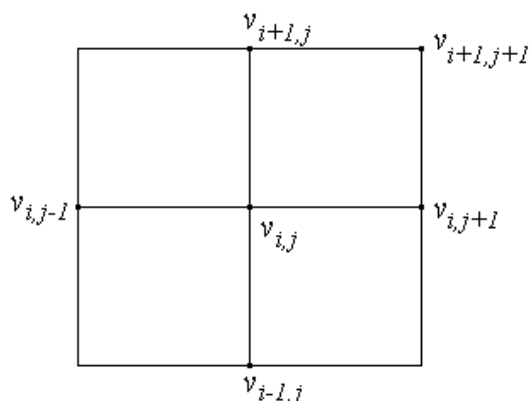


Figura 1

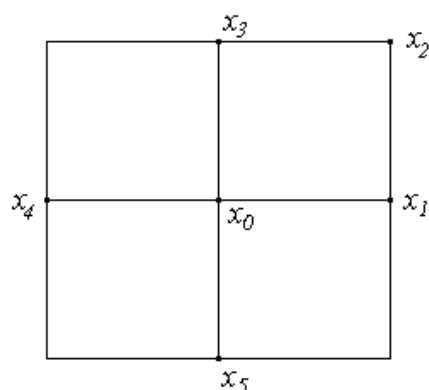
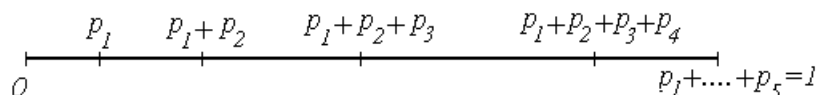


Figura 2

Partint de x_0 podem generar un camí *random* elemental que conclourà en algun dels nodes x_i . En el llenguatge de *Teoria de Probabilitats*, el nostre espai mostral seria $\Omega = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ amb probabilitats $\{p_1, p_2, p_3, p_4, p_5\}$.

Per avaluar la funció en $z = x_0$ generem un nombre aleatori (vegeu l'annex 2) $\alpha \in [0,1]$ segons la distribució de probabilitats $\{p_1, p_2, p_3, p_4, p_5\}$. És a dir:

- Sabem que les probabilitats de transició del node i,j a un node veí estan relacionades amb els coeficients de l'equació diferencial i poden calcular-se a partir d'aquests.
- Representem aquestes probabilitats en l'interval $[0,1]$



- Llancem un nombre aleatori a generat uniformement en l'interval $[0,1]$ i seleccionem el node de destí en funció del subinterval en què cau el nombre aleatori:

Per exemple, si $a \in [p_1, p_1 + p_2]$, el node de destí serà x_2 .

Per a obtenir l'expressió (1) considerem un *random walk* elemental, és a dir, suposem que hem fet un únic llançament i que el node de destí és x_1 .

En la notació de la fig.2 l'expressió (2) s'escriu:

$$\begin{aligned}
 u(x_0) &= p_1 u(x_1) + p_2 u(x_2) + p_3 u(x_3) + p_4 u(x_4) + p_5 u(x_5) - \frac{F(x_0)}{Q(x_0)} = \\
 &= E[u] - \frac{F(x_0)}{Q(x_0)}
 \end{aligned}$$

on $E[u]$ és el valor esperat de u . Per a calcular-lo farem ús d'un estimador:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N u(x_k) \quad \text{sent } E[\Phi] = E[u].$$

Si fem un únic llançament:

$$\Phi = \frac{1}{1} \sum_{k=1}^1 u(x_k) = u(x_1) \quad \rightarrow \quad E[\Phi] = u(x_1).$$

Podem aproximar:

$$u(x_0) = E[\Phi] - \frac{F(x_0)}{Q(x_0)} = u(x_1) - \frac{F(x_0)}{Q(x_0)}$$

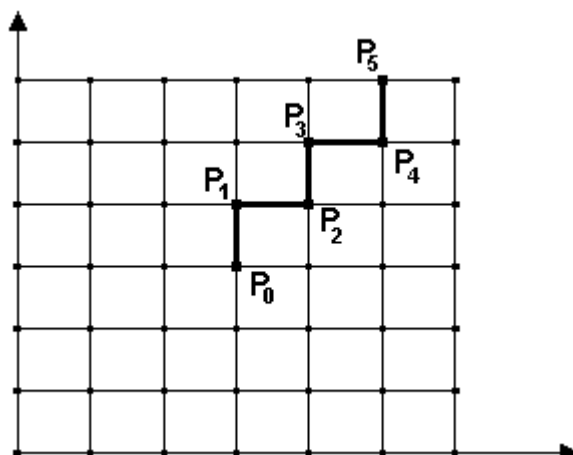


Figura 3.

Si ho generalitzem a una retícula més fina (fig.3), partint de $x_1 = P_1$, fem un altre llançament que ens dona com a node de destí P_2 .

$$u(P_1) = u(P_2) - \frac{F(P_1)}{Q(P_1)} \rightarrow u(z) = u(P_2) - \sum_{j=0}^1 \frac{F(P_j)}{Q(P_j)}$$

Podem repetir el mateix des de P_2 i així fins arribar a la frontera. Aleshores:

$$u(z) = u(P_m) - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{F(P_j)}{Q(P_j)}$$

on P_0, P_1, \dots, P_m son els nodes pels quals passem ($P_0 = x_0$ serà el punt de partida i P_m el punt de la frontera).

Repetim l'algorisme K vegades i prenem com a valor de $u(z)$ la mitjana dels valors obtinguts. Llavors:

$$u(z) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \left(u(P_m^k) - \sum_{j=0}^{m_k-1} \frac{F(P_j^k)}{Q(P_j^k)} \right)$$

on $(P_0^k, P_1^k, \dots, P_{m_k}^k)$ representen les K trajectòries *random*.

Annex 2. Generadors de nombres aleatoris

A2.1. Nombres aleatoris i pseudo aleatoris

Una seqüència de nombres aleatoris només pot obtenir-se mitjançant un procés físic que tinga un comportament intrínsecament aleatori, com ara un procés quàntic o un fenomen caòtic: així, un comptador Geiger situat prop d'una mostra radioactiva, o una mesura de la intensitat de la radiació còsmica podrien proporcionar-nos una cadena de nombres aleatoris.

No obstant això, les fonts que proporciona la naturalesa per a la generació de seqüències aleatòries són massa lentes per a les aplicacions a gran escala, i encara que existeixen bases de dades produïdes per aquests mètodes, es fan servir poc ja que es poden obtenir resultats equivalents utilitzant nombres pseudo aleatoris.

A2.2. Nombres pseudo aleatoris

Una alternativa a les seqüències aleatòries són els nombres pseudo aleatoris. Aquests poden obtenir-se per algorismes que són completament deterministes, però la seqüència de valors obtinguda és aleatòria per a un observador ignorant del procés de generació.

La major part dels generadors de nombres pseudo aleatoris produeixen una sèrie de nombres enters X_1, X_2, \dots, X_n en la qual cada valor X_{k+1} depèn només del valor anterior X_k .

Una forma senzilla d'obtenir els valors X_i és la següent:

$$X_{k+1} = aX_k + c \pmod{m} \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (1)$$

on $\{X_i\}$ és la seqüència de nombres pseudo aleatoris;

a , c i m són nombres enters positius triats de manera convenient;

X_0 és el valor inicial de la cadena (*llavor*);

\pmod{m} divideix $aX_i + c$ entre m i fa servir el residu.

La relació (1) pot escriure's

$$X_{k+1} = aX_k + c - m \left[\frac{aX_k + c}{m} \right] \quad k = 0, 1, \dots, n$$

on $[A]$ representa la part entera d' A .

Exemple: si $a=3$, $c=0$, $X_0=4$, $m=7$ la cadena de nombres que obtenim aplicant (1) és:

$$X_1 = 12 \pmod{7} = 5$$

$$X_2 = 15 \pmod{7} = 1$$

$$X_3 = 3 \pmod{7} = 3$$

$$X_4 = 9 \pmod{7} = 2$$

$$X_5 = 6 \pmod{7} = 6$$

$$X_6 = 18 \pmod{7} = 4$$

$$X_7 = 12 \pmod{7} = 5$$

D'aquest exemple podem deduir dues conseqüències aplicables a qualsevol generador congruent:

1. Cap valor de X_i excedeix el valor m .
2. La seqüència obtinguda és cíclica $X_{i+T} = X_i$.

El període o la longitud del cicle depèn de l'elecció dels paràmetres a , c i m . El període ha de ser suficientment gran perquè en cap moment s'esgoti el cicle; per exemple, en integració Monte Carlo podem necessitar avaluar fins a 10^6 punts, aleshores cal que $T > 10^6$, per a garantir uns resultats aleatoris.

El generador que acabem de descriure produeix valors en el rang $0, 1, 2, \dots, m-1$. Per a obtenir valors en l'interval $[0, 1)$ podem dividir els nombres obtinguts per m

$$U_i = \frac{X_i}{m} \quad i = 1, \dots, n$$

Un cas particular dels generadors lineals és aquell en què $c=0$

$$X_{k+1} = aX_k \pmod{m} \quad k = 0, 1, \dots, n$$

S'obté un període llarg amb una elecció adequada dels valors d' a i m . Nombrosos estudis sobre generadors lineals realitzats en els últims anys donen com a valors $a=7^5$, $m=2^{31}-1$.

Els generadors lineals tenen com a avantatges el fet que són molt ràpids i com a inconvenient la correlació entre valors de crides successives (podem observar que a un nombre molt xicotet li segueix un altre nombre també xicotet).

A2.3. Generadors no uniformes.

En l'apartat anterior hem vist com es generen nombres aleatoris segons una distribució de probabilitat uniforme. En aquest apartat veurem com es dissenya un algorisme que permetrà generar nombres aleatoris seguint una distribució de probabilitat determinada. Aquest cas es resol mitjançant nombres aleatoris generats uniformement. A continuació presentem dues formes de resolució del problema.

Mètode del canvi de variable.[5]

Siga x la variable aleatòria associada a la funció densitat de probabilitat $f(x)$. Fem el canvi de variable

$$y=h(x)$$

Ens podem preguntar quina serà la funció densitat de probabilitat associada a la nova variable y . Aquesta funció ha de satisfer

$$f(x)dx=g(y)dy$$

és a dir,

$$g(y) = f(x) \frac{dx}{dy} = f(h^{-1}(y)) \frac{dh^{-1}(y)}{dy}$$

on h^{-1} és la inversa de h .

En el cas que ens interessa $f(x)=I$ ja que tenim una distribució de probabilitat uniforme. La funció h transforma l'interval $[0,1]$ en un cert interval $[a,b]$ i, per tant,

$$\begin{aligned}h(0) &= a \\ h^{-1}(a) &= 0\end{aligned}$$

i, com que $f(x)=I$

$$g(y) = \frac{dh^{-1}(y)}{dy}$$

El que volem és determinar el canvi de variable adequat per a obtenir una distribució de probabilitat donada. Si l'equació anterior s'integra entre a i un valor arbitrari y , s'obté

$$\int_a^y g(y)dy = h^{-1}(y)$$

Aquesta expressió pot interpretar-se de la forma següent : donada una funció de probabilitat determinada $g(y)$ es defineix la funció acumulativa

$$G(Y) = \int_a^y g(y)dy$$

i la inversa d'aquesta funció és el canvi de variable que busquem. El mètode proposat és interessant si som capaços de calcular aquesta funció acumulativa i, a més, invertir-la.

Mètode d'acceptació-rebuig

Aquest mètode va ser inventat per Von Neumann i és aplicable només a funcions de densitat de probabilitat acotades i definides en un domini finit.

Siga $[a,b]$ el domini d'una funció de densitat de probabilitat i M una fita superior:

$$f(x) \leq M \quad x \in [a,b]$$

Fem ús de la distribució uniforme per a generar dos valors:

$$\begin{aligned}x &\in [a,b] \\ p &\in [0,M]\end{aligned}$$

El valor x s'accepta si $f(x) \geq p$. En el cas contrari, el rebutgem, la qual cosa significa que tornem a generar un parell (x, p) i repetim el procés anterior.

Distribució Normal

La distribució normal és el model estadístic més important ja que molts dels fenòmens empírics s'aproximen a ella.

El teorema central del límit ens diu que les variables aleatòries que poden expressar-se com a suma d'un gran nombre de variables aleatòries independents presenten una distribució normal.

Si tenim N variables $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ distribuïdes uniformement en $[0,1)$ amb $E(\xi_i)=0.5$ i $\text{Var}(\xi_i)=1/12$ definim [5]

$$y_N = \frac{\sum_{k=1}^N \xi_k - \frac{N}{2}}{\sqrt{\frac{N}{12}}}$$

Les variables y_N tenen esperança 0 i variancia 1. La distribució de probabilitat de y_N en quan $N > 6$ resulta indistingible a simple vista de la distribució normal (excepte per les cues de la distribució). Si no estem interessats en aquest punts podem obtenir un bon generador normal a partir de $N=12$.

Altra manera d'obtenir un generador normal és el mètode de Box-Müller:

Considerem la transformació entre dos nombres aleatoris ξ_1, ξ_2 amb distribució uniforme en $[0,1)$ i dues quantitats y_1, y_2

$$y_1 = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \cos 2\pi \xi_2$$

$$y_2 = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \sin 2\pi \xi_2$$

o, també

$$\xi_1 = \exp\left[-\frac{1}{2}(y_1^2 + y_2^2)\right]$$

$$\xi_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{y_2}{y_1}$$

Podem calcular el Jacobià de la transformació

$$\frac{\partial(\xi_1, \xi_2)}{\partial(y_1, y_2)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \xi_1}{\partial y_1} & \frac{\partial \xi_1}{\partial y_2} \\ \frac{\partial \xi_2}{\partial y_1} & \frac{\partial \xi_2}{\partial y_2} \end{vmatrix} = -\frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{y_1^2}{2}\right) \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{y_2^2}{2}\right)$$

on podem veure que cadascuna de les variables y_1, y_2 segueix una distribució normal.

En aquest treball hem utilitzat el generador uniforme de nombres aleatoris de Matlab. La figura 1 representa l'histograma de freqüències relatives per a 1000000 de nombres aleatoris obtinguts, en l'interval $[0,1]$, mitjançant el generador uniforme de Matlab.

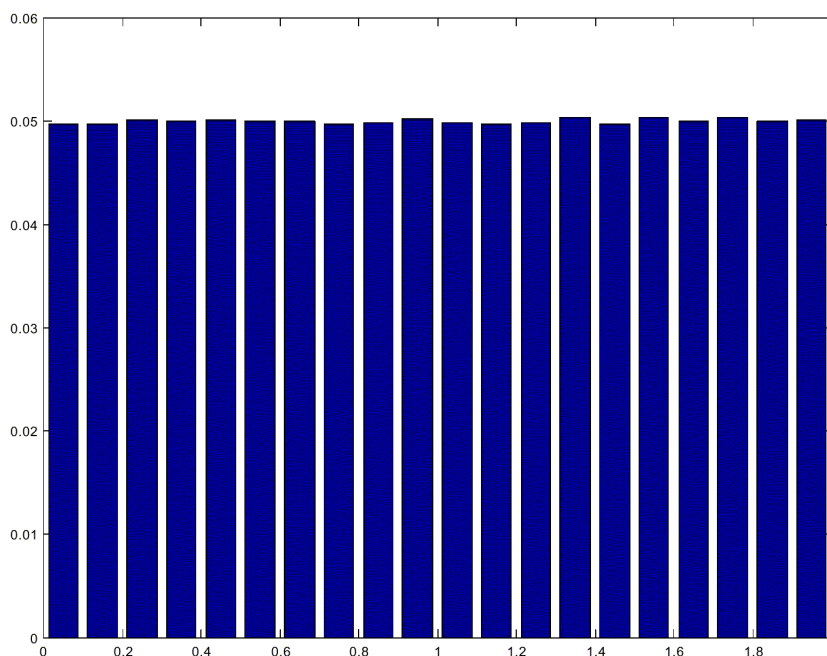


Figura 1

En la figura 2 representem l'histograma de freqüències relatives per a 1000000 de nombres aleatoris obtinguts, en l'interval [0,1], mitjançant el generador normal de Matlab.

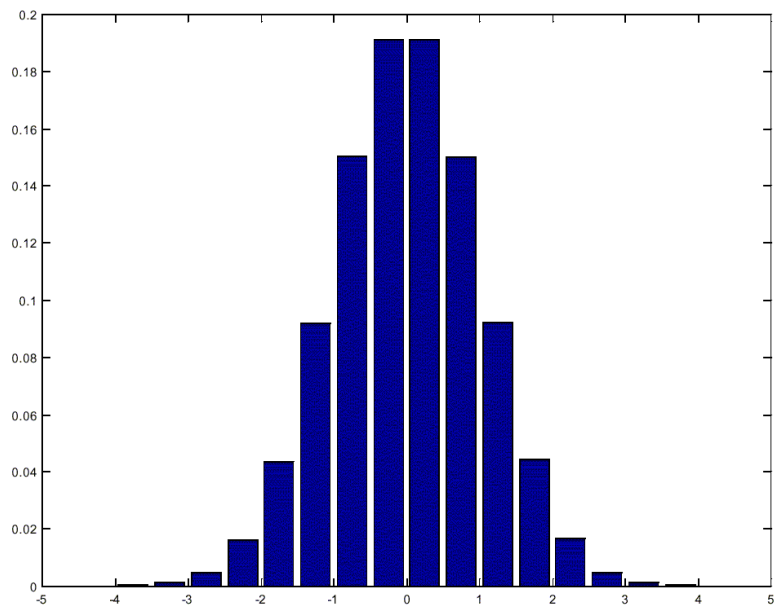


Figura 2

Bibliografia

- [1] Zwillinger, D. *Handbook of Differential Equations*. Academic Press, Inc. 1992. New York.
- [2] Farlow, S. J. *Partial differential equations. Scientists and Engineers*. Wiley International Editions.
- [3] Casas, E. *Introduccion a las ecuaciones en derivadas parciales*. Servicio de Publicaciones. Universidad de Cantabria.
- [4] Garabedian, P. R. *Partial differential equations*. Ams. Chelsea Publishing.
- [5] Guardiola, R. Higón, E. Ros, J. *Mètodes numèrics per a la Física*. Universitat de València. 1995.
- [6] Gimenez, F. Rubio, G. *Métodos numéricos para la resolución de EDO y EDP*. (Notes de classe). ETSEI.
- [7] Monreal, L. Fernández de Córdoba, P. Abraham, S. *Resolución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales mediante técnicas de simulación Monte Carlo. Una aproximación didáctica*. Actes de la II Conferència Internacional de Matemàtica Aplicada i Computació. Pinar del Río (Cuba): Març de 2001. (en premsa)
- [8] Carrasco, R. Fernández de Córdoba, P. : *Introducción a los métodos Monte Carlo*. Universitat Politècnica de València. SPUPV 96.3020.