Certamen N°1 Computación Científica I
SCT - Lu.3.11.14

Nombre:______________________________ Rol:____________________

Instrucciones: *Usted tiene 90 minutos para responder el Certamen.*
Usted tiene que mostrar todo su trabajo para obtener todos los puntos.
*Puntos parciales serán entregados a preguntas incompletas. Respuestas finales sin desarrollo o **sin nombre** reciben 0 puntos. ¡Buena Suerte!*

1. **[25 puntos]** Considere el siguiente BVP, definido para $x \in [0,1]$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -4y - 5\frac{dy}{dx}$$
$$y(0) = 1$$
$$y(1) = 0$$

OBS: Realice e indique sus cálculos con al menos 3 decimales de precisión.

(a) **[5 puntos]** Tranforme el BVP a IVP utilizando como condiciones iniciales $y(0) = 1$ y $\frac{dy}{dx}(0) = s$. Llamaremos a la solución numérica de este problema $w(s,x)$ y definiremos la función $F(s) = y(1) - w(s,1)$. ¿Cuáles son los valores propios asociados al sistema? ¿Cuál es la restricción de estabilidad para el máximo paso de tiempo Δt, para el método de Euler Explícito?

Respuesta:
Considerando $y_1 = y$ y $y_2 = \frac{dy}{dx}$, imponiendo $\frac{dy}{dx}(0) = s$ se tiene

$$\begin{pmatrix} \frac{dy_1}{dx} \\ \frac{dy_2}{dx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2 \\ -4y_1 - 5y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} y_1(0) \qquad = 1$$
$$y_2(0) = s$$

Los valores propios del sistema son los valores propios asociados a la matriz $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}$, que corresponden a los ceros del polinomio característico $\det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ -4 & -5-\lambda \end{pmatrix} = \lambda(5+\lambda) + 4 = (\lambda+1)(\lambda+4)$ Los valores propios son entonces $\lambda_1 = -1$, $\lambda_2 = -4$. La condición de estabilidad está dada por $|\lambda \Delta t - 1| < 1$, lo cual evaluando en los valores propios se cumple cuando $\Delta t < 1/2$.

(b) **[5 puntos]** Utilizando el método de Euler Explícito con $\Delta t = \frac{1}{3}$, resuelva el problema obtenido en (a) para $s = 0$ y verifique que $w(0,1) \approx 0.41$, y por tanto $F(0) < 0$.

Respuesta:
Aplicando el método de Euler Explícito, $u_{n+1} = u_n + \Delta t \dot{u_n}$, para tenemos:

$$W(0, 0.000) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ 0.000 \end{pmatrix}$$
$$W(0, 0.333) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ 0.000 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.000 \\ 0.000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -1.333 \end{pmatrix}$$
$$W(0, 0.666) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -1.333 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.000 \\ -1.333 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.555 \\ -0.444 \end{pmatrix}$$
$$W(0, 1.000) = \begin{pmatrix} 0.555 \\ -0.444 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.555 \\ -0.444 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.407 \\ -0.444 \end{pmatrix}$$

Luego $w(0,1) = 0.407$ y $F(0) = y(1) - w(0,1) = 0 - 0.407 = -0.407 < 0$.

(c) **[5 puntos]** Utilizando el método de Euler Explícito con $\Delta t = \frac{1}{3}$, resuelva el problema obtenido en (a) para $s = -5$ y verifique que $w(-5,1) \approx -0.15$, y por tanto $F(-5) > 0$.

Respuesta:

$$W(0,0.000) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -5.000 \end{pmatrix}$$
$$W(0,0.333) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -5.000 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.000 \\ -5.000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.667 \\ 2.000 \end{pmatrix}$$
$$W(0,0.666) = \begin{pmatrix} -0.667 \\ 2.000 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -0.667 \\ 2.000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.000 \\ -0.444 \end{pmatrix}$$
$$W(0,1.000) = \begin{pmatrix} 0.000 \\ -0.444 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.000 \\ -0.444 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.148 \\ 0.296 \end{pmatrix}$$

Luego $w(-5,1) = -0.148$ y $F(-5) = y(1) - w(-5,1) = 0 + 0.148 = 0.148 > 0$.

(d) [**5 puntos**] Los resultados anteriores indican que s está mucho más cerca de -5 que de 0, con lo cual el método de la bisección sería ineficiente. Una mejor aproximación s_{sec} a partir de 2 valores conocidos s_r y s_l tales que $F(s_r)F(s_l) < 0$, es utilizar el método de la secante:

$$s_{sec} = \frac{F(s_r)s_l - F(s_l)s_r}{F(s_r) - F(s_l)}$$

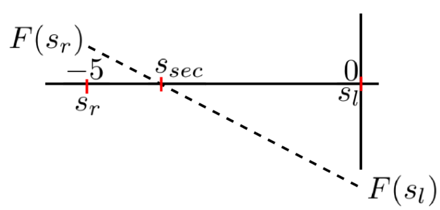
¿Qué valor para s_{sec} obtenemos utilizando los resultados de (b) y (c)? Realice un gráfico para explicar su resultado.

Respuesta:

Tomando $s_l = 0$ con $F(s_l) = -0.407$ y $s_r = -5$ con $F(s_r) = 0.148$, se obtiene

$$s_{sec} = \frac{(-5)\cdot(0) - (-0.407)\cdot(-5)}{(0.148) - (-0.407)} = -3.667$$

La figura solicitada es la siguiente



(e) [**5 puntos**] Utilizando el método de Euler Explícito con $\Delta t = \frac{1}{3}$, resuelva el problema obtenido en (a) para s_{sec} y verifique que $w(s_{sec}, 1) \approx 0$, y por tanto $F(s) \approx 0$.

Respuesta:

Tomando $s_{sec} = -3.667$ se tiene

$$W(0,0.000) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -3.66 \end{pmatrix}$$
$$W(0,0.333) = \begin{pmatrix} 1.000 \\ -3.66 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.000 \\ -3.66 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.222 \\ 1.111 \end{pmatrix}$$
$$W(0,0.666) = \begin{pmatrix} -0.222 \\ 1.111 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -0.222 \\ 1.111 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.148 \\ -0.444 \end{pmatrix}$$
$$W(0,1.000) = \begin{pmatrix} 0.148 \\ -0.444 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.148 \\ -0.444 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.000 \\ 0.099 \end{pmatrix}$$

Luego $w(-3.667,1) = 0.407$ y $F(0) = y(1) - w(3.667,1) = 0 - 0.000 = 0.000$.

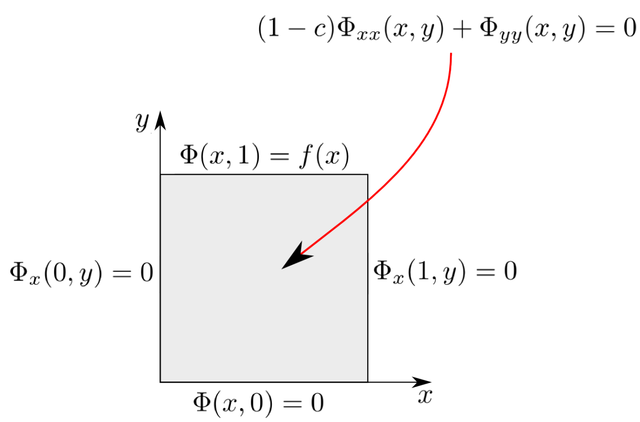
NOMBRE:____ ROL:________________________________

2. **[25 puntos]** Considere $x, y \in [0,1]$ para la siguiente EDP con condiciones de frontera mixtas:

$$(1-c)\Phi_{xx}(x,y) + \Phi_{yy}(x,y) = 0 \tag{1}$$
$$\Phi_x(0,y) = 0 \tag{2}$$
$$\Phi_x(1,y) = 0 \tag{3}$$
$$\Phi(x,0) = 0 \tag{4}$$
$$\Phi(x,1) = f(x) \tag{5}$$

OBS: En sus desarrollos utilice la notación $\Phi_{i,j} = \Phi(i\Delta x, j\Delta y)$.

(a) [**5 puntos**] Realice un diagrama del problema e indique el rango de valores de c en el cual la EDP es elíptica.
Respuesta:
Es posible realizar el siguiente diagrama del problema:



La ecuación tiene coeficientes $A = (1-c)$, $B = 0$ y $C = 1$, por lo cual se tiene $B^2 - 4AC < 0$ solamente si $-4(1-c) < 0$, es decir, si $c < 1$.
Realizamos la dicretización utilizando N_x+1 y N_y+1 puntos en las direcciones x e y, obtienendo $x_i = i\Delta x$ y $y_j = j\Delta y$, con $\Delta_x = 1/N_x$ y $\Delta_y = 1/N_y$.

(b) [**5 puntos**] Realice la discretización de la EDP (sólo la ecuación (1)), utilizando diferencias finitas centradas de segundo orden. Exprese el resultado general ($\Delta x \neq \Delta y$). Simplifique y agrupe cuando sea posible.
Respuesta:
Puesto que tenemos

$$\begin{aligned}
\Phi_{xx}(x_i, y_i) &= \frac{\Phi(x_{i+1}, y_j) - 2\Phi(x_i, y_j) + \Phi(x_{i-1}, y_j)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \\
&= \frac{\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \\
\Phi_{yy}(x_i, y_i) &= \frac{\Phi(x_i, y_{j+1}) - 2\Phi(x_i, y_j) + \Phi(x_i, y_{j-1})}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2) \\
&= \frac{\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2)
\end{aligned}$$

Se tiene que

$$\begin{aligned}
0 &= (1-c)\Phi_{xx}(x_i, y_i) + \Phi_{yy}(x_i, y_i) \\
&= (1-c)\frac{\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{ij} + \Phi_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{ij} + \Phi_{i,j-1}}{\Delta y^2}
\end{aligned}$$

y agrupando, obtenemos

$$-2\left(\frac{1-c}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)\Phi_{i,j} + \frac{1-c}{\Delta x^2}\Phi_{i+1,j} + \frac{1-c}{\Delta x^2}\Phi_{i-1,j} + \frac{1}{\Delta y^2}\Phi_{i,j+1} + \frac{1}{\Delta y^2}\Phi_{i,j-1} = 0$$

(c) **[5 puntos]** Realice la discretización de las condiciones de frontera en x (ecuaciones (2) y (3)), utilizando diferencias finitas de primer orden. Simplifique y agrupe cuando sea posible.

Respuesta:

Reemplazando en los puntos de la discretización, con $j = 0, .., N_x$, se obtiene

$$0 = \Phi_x(0, y_j) = \Phi_x(x_0, y_j) = \frac{\Phi(x_1, y_j) - \Phi(x_0, y_j)}{\Delta x} + O(\Delta x) = \frac{\Phi_{1,j} - \Phi_{0,j}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

Luego la condición es $\Phi_{1,j} - \Phi_{0,j} = 0$.

En $x = 1 = x_{N_x}$ e y_j, para $j \in \{0, 1, 2..., N_y\}$, se tiene:

$$0 = \Phi_x(1, y_j) = \Phi_x(x_{N_x}, y_j) = \frac{\Phi(x_{N_x}, y_j) - \Phi(x_{N_x-1}, y_j)}{\Delta x} + O(\Delta x) = \frac{\Phi_{N_x,j} - \Phi_{N_x-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$

Luego la condición es $\Phi_{N_x,j} - \Phi_{N_x-1,j} = 0$.

(d) **[5 puntos]** Realice la discretización de las condiciones de frontera en y (ecuaciones (4) y (5)). Simplifique y agrupe cuando sea posible.

Respuesta:

Reemplazando en los puntos de la discretización, con $i \in \{0, .., N_x\}$, se obtiene

$$\begin{aligned}\Phi(x_i, 0) &= \Phi(x_i, x_0) = \Phi_{i,0} = 0\\ \Phi(x_i, 1) &= \Phi(x_i, y_{Ny}) = \Phi_{i,N_y} = f(x_i)\end{aligned}$$

(e) **[5 puntos]** Indique explícitamente y resuelva el sistema lineal que se obtiene al considerar $c = \frac{1}{3}$, $\Delta x = \frac{1}{3}$, $\Delta y = \frac{1}{2}$ y $f(x) = \cos(2\pi x) - 1$.

Respuesta:

Se tiene $N_x = 3$ y $N_y = 2$, con lo cual el número de incógnitas es de $(3+1) \times (2+1) = 12$. Sin embargo, debido a las condiciones de frontera, la gran mayoría de estas incógnitas tienen un valor conocido.

La condiciones de frontera en $y = 0$ entregan:

$$\begin{aligned}\Phi_{0,0} &= 0\\ \Phi_{1,0} &= 0\\ \Phi_{2,0} &= 0\\ \Phi_{3,0} &= 0\end{aligned}$$

La condiciones de frontera en $y = 1$ entregan:

$$\begin{aligned}\Phi_{0,2} &= \cos(2\pi x_0) - 1 = \cos(0) - 1 = 0\\ \Phi_{1,2} &= \cos(2\pi x_1) - 1 = \cos(2\pi/3) - 1 = -1.5\\ \Phi_{2,2} &= \cos(2\pi x_2) - 1 = \cos(4\pi/3) - 1 = -1.5\\ \Phi_{3,2} &= \cos(2\pi x_3) - 1 = \cos(2\pi) - 1 = 0\end{aligned}$$

La condición de frontera en x sólo es necesaria en $j = 1$ puesto que los otros valores son ya conocidos:

$$\begin{aligned}\Phi_{1,1} - \Phi_{0,1} &= 0\\ \Phi_{2,1} - \Phi_{3,1} &= 0\end{aligned}$$

Luego las únicas incógnitas desconocidas son $\Phi_{1,1}$ y $\Phi_{2,1}$, que se obtiene mediante el esquema numérico para (1,1) y (2,1):

$$-2\left(\frac{1-c}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)\Phi_{1,1} + \frac{1-c}{\Delta x^2}\Phi_{2,1} + \frac{1-c}{\Delta x^2}\Phi_{0,1} + \frac{1}{\Delta y^2}\Phi_{1,2} + \frac{1}{\Delta y^2}\Phi_{1,0} = 0$$
$$-2\left(\frac{1-c}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}\right)\Phi_{2,1} + \frac{1-c}{\Delta x^2}\Phi_{3,1} + \frac{1-c}{\Delta x^2}\Phi_{1,1} + \frac{1}{\Delta y^2}\Phi_{2,2} + \frac{1}{\Delta y^2}\Phi_{2,0} = 0$$

Luego, utilizando los valores conocidos de $\Phi_{i,j}$, $c = \frac{1}{3}$, $\Delta x = \frac{1}{3}$, $\Delta y = \frac{1}{2}$ se tiene

$$
\begin{aligned}
-14\Phi_{1,1} + 6\Phi_{2,1} &= -4\Phi_{1,2} = 6 \\
6\Phi_{1,1} - 14\Phi_{2,1} + &= -4\Phi_{2,2} = 6
\end{aligned}
$$

Con lo cual, por simetría se tiene $\Phi_{1,1} = \Phi_{2,1}$ y luego $\Phi_{1,1} = \Phi_{1,2} = -0.75$

(f) [**Bonus: 5 puntos**] Resuelva explícitamente en función de c. ¿Qué pasa si $c = 1$?
Respuesta:
Puesto que esta pregunta es un bono, la dejaremos como tarea al estudiante aplicado.

3. **[25 puntos]** Considere el siguiente IVP: $\ddot{y}(t) + \alpha^2 y(t) = 0$ con $y(0) = 0$ y $\dot{y}(0) = \alpha$.

(a) **[5 puntos]** Realize un cambio de variables de tal forma que se obtenga un sistema de ecuaciones diferenciales. **Respuesta**

$$y_1(t) = y(t) \implies \dot{y_1}(t) = \dot{y}(t) = y_2(t) \tag{6}$$

$$y_2(t) = \dot{y}(t) \implies \dot{y_2}(t) = \dot{y}(t) = -\alpha^2 \cdot y_1(t) \tag{7}$$

(b) **[15 puntos]** Seleccione un ODE-solver numérico (por ejemplo: Euler, backward-euler, RK2, RK4, etc) que sea estable para el problema anterior. Debe indicar claramente la razón de la elección y el Δt máximo a utilizar. **Respuesta**

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\alpha^2 & 0 \end{bmatrix}}_{J} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \tag{8}$$

que implica, a su vez, que los valores propios de J se obtienen para $\lambda^2 + \alpha^2 = 0$, es decir, $\lambda_+ = \alpha \cdot i$ y $\lambda_- = -\alpha \cdot i$ $\therefore$ se utilizará backward euler, debido a su región de estabilidad $\implies$ Δt no está acotado por al región de estabilidad en este caso.

(c) **[5 puntos]** Determine $y(1)$ númericamente. *Hint: ¡Utilice el máximo* Δt *posible!*

Respuesta En este caso no tenemos cota superior para Δt por motivos de estabilidad, por lo cual se utilizará $\Delta t = 1$.

$$y_1(1) = y_1(0) + \underbrace{1}_{\Delta t} \cdot y_2(1) = 0 + y_2(1) \tag{9}$$

$$y_2(1) = y_2(0) - \alpha^2 \cdot \underbrace{1}_{\Delta t} \cdot y_1(1) = \alpha - \alpha^2 \cdot y_1(t) \tag{10}$$

$$\implies y_1(1) = \alpha - \alpha^2 \cdot y_1(1) \tag{11}$$

$$\implies y_1(1) \cdot (1 + \alpha^2) = \alpha \tag{12}$$

$$\implies y_1(1) = \frac{\alpha}{(1 + \alpha^2)} \tag{13}$$

Nombre:________________________________ Rol:____________________

4. **[25 puntos]** Considere el siguiente Non-Linear-BVP: $u_{xx}(x) = \exp(u(x))$ con $u(-1) = u(1) = 0$.

   (a) **[5 puntos]** Demuestre que $u(x) = 0$ en $-1 < x < 1$ no es una solución. **Respuesta** $u(x) = 0$, reemplazando en $u_{xx}(x) = e^{u(x)}$, que implica que en el lado izquierdo tenemos $u_{xx} = 0$ y por el lado derecho tenemos $e^{u(x)} = e^0 = 1$. Donde claramente llegamos a la siguiente contradicción: $0 = 1$.
   $\therefore u(x) = 0$ no es una solución.

   (b) **[10 puntos]** Discretize la ecuación y proponga un método numérico para encontrar la solución. **Respuesta** Se utilizará diferencias finitas:

$$u_{xx}(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) - 2 \cdot u(x_i) + u(x_{i-1})}{\Delta x^2} \tag{14}$$

   De donde, despejando, obtenemos la siguiente representación:

$$\frac{u_{i+1} - 2 \cdot u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} = \exp(u_i) \tag{15}$$

   para $i = 1 : n-1$, con $u_0 = u(0)$ y $u_n = u(1)$. Se propone utilizar el método de Newton multivariadado, dada la naturaleza no lineal del problema, aunque una iteración de punto fijo sería interesante.

   (c) **[10 puntos]** Encuentre la solución numérica considerando una discretización de 3 puntos, $u(-1) \approx w_{-1}$, $u(0) \approx w_0$ y $u(1) \approx w_1$; y $u_0(x) = 0$ con initial guess. *Hint: Realice solo 2 iteraciones del nonlinear-solver.*

   Respuesta $u(-1) \approx w_{-1} = 0$, $u(0) \approx w_0$, $u(1) \approx w_1 = 0 \implies u_{xx}(0) = e^{u(0)}$. A demás de la discretización asumida tenemos que $\frac{w_{-1} - 2 \cdot w_0 + w_1}{1^2} = e^{w_0}$, que por las condiciones de borde implica que $-2 \cdot w_0 = e^{w_0}$.

   Utilizando $u_0(x) = 0 \implies w_0^{(0)} = 0 \implies w_0^{(n+1)} = -\frac{1}{2} \cdot \exp(w_0^{(n)})$. Donde, luego de dos iteraciones, finalmente obtenemos:

$$w_0^{(1)} = -\frac{1}{2} \cdot e^0 = -\frac{1}{2} \tag{16}$$

$$w_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \cdot e^{-\frac{1}{2}} = -0,3033 \tag{17}$$