Cálculo Numérico - Elementos de Cálculo Numérico

Métodos de un paso - Diferencias finitas

Clase dictada por: Mercedes Pérez Millán

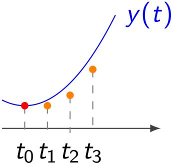
(Dto. de Matemática–FCEyN–Universidad de Buenos Aires,
IMAS-CONICET)

2 de sepiembre de 2024

Problema de valores iniciales

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

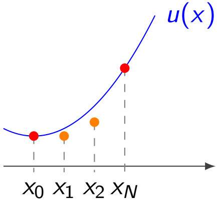
$$(y_0, y_1, y_2, y_3, \dots) \sim (y(t_0), y(t_1), y(t_2), y(t_3), \dots)$$



$$\begin{cases} y''(t) = f(t, y(t), y'(t)) \\ y(t_0) = y_0, y'(t_0) = y'_0 \end{cases} \quad \underset{y_1 = y, y_2 = y'}{\Rightarrow} \quad \begin{cases} y'_1(t) = y_2(t) \\ y'_2(t) = f(t, y_1(t), y_2(t)) \\ y_1(t_0) = y_0, y_2(t_0) = y'_0 \end{cases}$$

Problema de valores de contorno

$$\begin{cases} u''(x) = p(x)u'(x) + q(x)u(x) + f(x) \\ u(a) = \alpha, \; u(b) = \beta \end{cases}$$



$$(u_0, u_1, u_2, \ldots, u_N) \sim (u(x_0), u(x_1), u(x_2), \ldots, u(x_N))$$

Partimos de un problema de valores de contorno:

$$\begin{cases} u''(x) = p(x)u'(x) + q(x)u(x) + f(x) \\ u(a) = \alpha, \; u(b) = \beta \end{cases}$$

Buscamos $(u_0, \ldots, u_N)$ de forma tal que $u_j \sim u(x_j)$ para $1 \leq j \leq N - 1$.

Teorema:

Dada la ecuación de segundo orden $u''(x) = p(x)u'(x) + q(x)u(x) + f(x)$ con $a \leq x \leq b$ y valores en la frontera $u(a) = \alpha$, $u(b) = \beta$. Si p, q, f son continuas en $[a, b]$ y $q > 0$, entonces el problema tiene única solución.

Sea $n \in \mathbb{N}$, tomamos un paso $h = (b - a)/N$ y consideramos los puntos $x_j = a + jh$ para $j = 0, \dots, N$ (notar que $x_0 = a, x_N = b$). Definimos $u_0 = \alpha$, $u_N = \beta$ y aproximamos las derivadas de u.

Discretizaciones usuales de u'

- Forward: $u'(x_j) \sim \dfrac{u(x_{j+1}) - u(x_j)}{h}$
- Backward: $u'(x_j) \sim \dfrac{u(x_j) - u(x_{j-1})}{h}$
- Centrada: $u'(x_j) \sim \dfrac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h}$

Discretizaciones usuales de u''

$$
\begin{array}{rl}
u(x+h) &= u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u'''(x) + \frac{h^4}{24}u^{(iv)}(\xi_1) \\
+ \qquad u(x-h) &= u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u'''(x) + \frac{h^4}{24}u^{(iv)}(\xi_2) \\
\hline
u(x+h)+u(x-h) &= 2u(x) + h^2u''(x) + \frac{h^4}{24}(u^{(iv)}(\xi_1) + u^{(iv)}(\xi_2))
\end{array}
$$

$$
\Rightarrow u''(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} - \underbrace{\frac{h^2}{24}(u^{(iv)}(\xi_1) + u^{(iv)}(\xi_2))}_{O(h^2)}
$$

Tenemos

$$\begin{cases} u''(x) = p(x)u'(x) + q(x)u(x) + f(x) \\ u(a) = \alpha, \ u(b) = \beta. \end{cases}$$

Llamamos $p_j = p(x_j)$, $q_j = q(x_j)$, $f_j = f(x_j)$ y usando diferencias centradas para u' proponemos entonces:

$$\begin{cases} u_0 = \alpha, \\ u_N = \beta, \\ \dfrac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = p_j \dfrac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} + q_j u_j + f_j. \end{cases}$$

¿Para qué j's vale esta expresión? ¿Cómo encuentro los valores de $u_1, \ldots, u_{N-1}$?

Multiplicamos por h^2 y reagrupamos,

$$u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1} - \frac{h}{2} p_j [u_{j+1} - u_{j-1}] - h^2 q_j u_j = h^2 f_j$$

$$\left(1 + \frac{h}{2} p_j\right) u_{j-1} - (2 + h^2 q_j) u_j + \left(1 - \frac{h}{2} p_j\right) u_{j+1} = h^2 f_j$$

$j=1$ $\quad - (2 + h^2 q_1) u_1 + \left(1 - \frac{h}{2} p_1\right) u_2 = h^2 f_1 - \left(1 + \frac{h}{2} p_1\right) \alpha$

$j=2{:}N-2$ $\quad (1 + \frac{h}{2} p_j) u_{j-1} - (2 + h^2 q_j) u_j + (1 - \frac{h}{2} p_j) u_{j+1} = h^2 f_j$

$j=N-1$ $\quad (1 + \frac{h}{2} p_{N-1}) u_{N-2} - (2 + h^2 q_{N-1}) u_{N-1} = h^2 f_{N-1} - (1 - \frac{h}{2} p_{N-1}) \beta$

En forma matricial:

$$
\underbrace{\begin{pmatrix}
-(2+h^2q_1) & 1-\frac{h}{2}p_2 & & & \\
1+\frac{h}{2}p_2 & -(2+h^2q_2) & (1-\frac{h}{2}p_2) & & \\
\ddots & \ddots & & & \\
& \ddots & \ddots & & \\
& 1+\frac{h}{2}p_{N-2} & -(2+h^2q_{N-2}) & 1-\frac{h}{2}p_{N-2} & \\
& & (1+\frac{h}{2}p_{N-1}) & -(2+h^2q_{N-1})
\end{pmatrix}}_{A_h}
\underbrace{\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix}}_{u_h}
=
\underbrace{\begin{pmatrix} h^2 f_1 - (1+\frac{h}{2}p_1)\alpha \\ h^2 f_2 \\ \vdots \\ h^2 f_{N-2} \\ h^2 f_{N-1} - (1-\frac{h}{2}p_{N-1})\beta \end{pmatrix}}_{b_h}
$$

Es decir,

$$A_h u_h = b_h$$

Teorema 1:

Si $q > 0$ y $h < 2/M$ con $M = \max\{|p(x)| \ : \ a < x < b\}$, entonces la matriz es inversible.

Teorema 2:

Sea $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1,\cdots,N}$ tal que $|a_{jj}| > \sum_{k\neq j} |a_{jk}|$. Entonces todos los autovalores son distintos de cero.

Dem: Sea λ cualquier autovalor y v un autovector asociado. Sea v_j la (o una) coordenada de mayor módulo. Si $w = v/v_j$:

$$|w_i| = |v_i/v_j| \leq 1, \quad w_j = 1 \quad \text{y} \quad Aw = \lambda w$$

$$\Rightarrow \sum_{k\neq j} a_{jk} w_k + a_{jj} = \sum_{k\neq j} a_{jk} w_k + a_{jj} w_j = \lambda w_j = \lambda.$$

Si fuera $\lambda = 0$ tendríamos $-a_{jj} = \sum_{k\neq j} a_{jk} w_k$. Tomando módulo, por desigualdad triangular, llegamos a un absurdo.

Error de truncado local

Volvemos al problema original:

$$\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = p_j \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} + q_j u_j + f_j.$$

Si reemplazamos $u(x_j)$ por u_j en la ecuación en diferencias obtenemos:

$$\frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1})}{h^2} = p_j \frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h} + q_j u(x_j) + f_j + \tau_j.$$

Pero “vimos” que

$$\frac{u(x_j + h) - 2u(x_j) + u(x_j - h)}{h^2} = u''(x_j) + O(h^2)$$

$$\frac{u(x_j + h) - u(x_j - h)}{2h} = u'(x_j) + O(h^2)$$

Reemplazamos y reagrupamos

$$u''(x_j) + O(h^2) = p_j(u'(x_j) + O(h^2)) + q_j u(x_j) + f_j + \tau_j.$$

$$u''(x_j) + O(h^2) = p_j u'(x_j) + \underbrace{p_j O(h^2)}_{=O(h^2)} + q_j u(x_j) + f_j + \tau_j.$$

Pero la solución verdadera u cumple

$$u''(x_j) = p_j u'(x_j) + q_j u(x_j) + f_j.$$

Por lo tanto

$$\tau_j = O(h^2).$$

Error de truncado local

Tenemos dos ecuaciones, una para u y otra para u_h:

$$A_h u_h = b_h,$$

$$A_h u = b_h + \tau_h,$$

donde τ_h es el vector de errores de truncado.

Entonces

$$u - u_h = A_h^{-1} \tau_h$$

Teorema:

Si existe A_h^{-1}, $\|A_h^{-1}\| \leq C$ para todo h suficientemente chico (i.e. el método es estable) y $\tau_h \to 0$ (i.e. el método es consistente), entonces $\|u - u_h\| \to 0$ (el método es convergente).

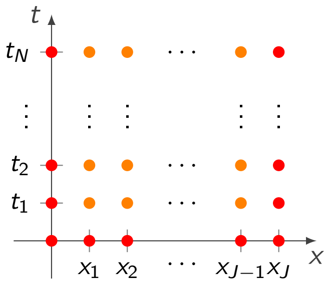
Ecuaciones de evolución en derivadas parciales

Ejemplo: Ecuación del calor

$$
\begin{aligned}
u_t(x,t) &= \alpha u_{xx}(x,t) \quad & x \in (0,L), t > 0\\
u(x,0) &= g(x) & x \in [0,L]\\
u(0,t) &= u(L,t) = 0 & t > 0,
\end{aligned}
$$

y consideramos $\alpha = 1$.

Vamos a discretizar el dominio: $x_j = jh$, $h = \Delta_x = \frac{L}{J}$, $t_n = nk$, $k = \Delta_t = \frac{T_f}{N}$.



Queremos aproximar $u(x_j, t_n) \sim u_j^n$.

Con la discretización usual de la derivada segunda y diferencias forward para la primera tenemos:

$$\begin{cases} \dfrac{u_j^{n+1} - u_j^n}{k} = \dfrac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}, \text{ para } 1 \le j \le J-1, 1 \le n \le N-1, \\ u_j^0 = g(x_j), \quad 0 \le j \le J, \\ u_0^n = u_J^n = 0, \quad 0 \le n \le N, \end{cases}$$

Podemos despejar:

$$u_j^{n+1} = \frac{k}{h^2} u_{j-1}^n + (1 - \frac{2k}{h^2}) u_j^n + \frac{k}{h^2} u_{j+1}^n$$

$j=1$ $\quad u_1^{n+1} = 0 + (1 - \frac{2k}{h^2}) u_1^n + \frac{k}{h^2} u_2^n$

$j=2:N-2$ $\quad u_j^{n+1} = \frac{k}{h^2} u_{j-1}^n + (1 - \frac{2k}{h^2}) u_j^n + \frac{k}{h^2} u_{j+1}^n$

$j=J-1$ $\quad u_{J-1}^{n+1} = \frac{k}{h^2} u_{J-2}^n + (1 - \frac{2k}{h^2}) u_{J-1}^n + 0$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+2} \\ \vdots \\ u_{J-2}^{n+1} \\ u_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix}}_{u^{n+1}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1-\frac{2k}{h^2} & \frac{k}{h^2} & & & \\ \frac{k}{h^2} & 1-\frac{2k}{h^2} & \frac{k}{h^2} & & \\ \ddots & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & \frac{k}{h^2} & 1-\frac{2k}{h^2} & \frac{k}{h^2} & \\ & & \frac{k}{h^2} & 1-\frac{2k}{h^2} & \end{pmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ \vdots \\ u_{J-2}^n \\ u_{J-1}^n \end{pmatrix}}_{u^n}$$

El error de truncado se obtiene al reemplazar la solución numérica por la real en el esquema, es decir,

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

donde T es dicho error de truncado.

Ejercicio: Ver que $T = O(k) + O(h^2)$.

Definición 1:

Decimos que el método es *consistente* si $T \underset{\substack{h\to 0\\ k\to 0}}{\longrightarrow} 0$.

Este método resulta consistente.

Definición 2:

Decimos que el método es *estable en norma* $|||.|||$ si existe una constante $C > 0$ (independiente de h, k, j, n, J, N) tal que $|||u^n||| \leq C|||u^0|||$.

Veamos cuándo este método es estable en norma infinito ($||v||_\infty = \max_j\{|v_j|\}$).

$$\begin{aligned}
||u_j^{n+1}||_\infty &= \max_j\{|\frac{k}{h^2}u_{j-1}^n + (1-\frac{2k}{h^2})u_j^n + \frac{k}{h^2}u_{j+1}^n|\} \\
&\leq \max_j\{\frac{k}{h^2}||u^n||_\infty + |1-\frac{2k}{h^2}|\ ||u^n||_\infty + \frac{k}{h^2}||u^n||_\infty\} \\
&= \left(|1-\frac{2k}{h^2}| + \frac{2k}{h^2}\right)||u^n||_\infty
\end{aligned}$$

Si $2k < h^2$

Si $\frac{2k}{h^2} < 1$ tenemos

$$||u_j^{n+1}||_\infty \leq ||u^n||_\infty.$$

Con este razonamiento concluimos:

$$||u_j^n||_\infty \leq ||u^0||_\infty,$$

y el método resulta estable, con $C = 1$.

Error

$$
\begin{array}{rcl}
u(x_j, t_{n+1}) & = & \frac{k}{h^2} u(x_{j-1}, t_n) + (1 - \frac{2k}{h^2}) u(x_j, t_n) + \frac{k}{h^2} u(x_{j+1}, t_n) + kT_j^n \\
- \quad u_j^{n+1} & = & \frac{k}{h^2} u_{j-1}^n + (1 - \frac{2k}{h^2}) u_j^n + \frac{k}{h^2} u_{j+1}^n \\
\hline
e_j^{n+1} & = & \frac{k}{h^2} e_{j-1}^n + (1 - \frac{2k}{h^2}) e_j^n + \frac{k}{h^2} e_{j+1}^n + kT_j^n
\end{array}
$$

Definición 3:

Decimos que el método es *converge* si $\max_{j,n} e_j^n \underset{\substack{h \to 0 \\ k \to 0}}{\longrightarrow} 0$.

Llamemos $E^n = \text{máx}_j\{|e_j^n|\}$ y $T^n = \text{máx}_j\{|T_j^n|\}$, entonces

$$E^{n+1} \leq \left(|1 - \frac{2k}{h^2}| + \frac{2k}{h^2}\right) E^n + kT^n$$

Si $\frac{2k}{h^2} < 1$, tenemos

$$E^{n+1} \leq E^n + kT^n$$

$$\begin{array}{ll}
n{=}0 & E^1 = 0 + kT^0 = kT^0, \\
n{=}1 & E^2 \leq E^1 + kT^1 = k(T^1 + T^0), \\
\ldots & \ldots \\
 & E^n \leq k(T^{n-1} + \cdots + T^1 + T^0) = k\sum_{0\leq i\leq n-1} \text{máx}_j\{|T_j^i|\} \\
 & \quad \leq kN\, \text{máx}_{j,i}\{|T_j^i|\} = T_F\, \text{máx}_{j,i}\{|T_j^i|\} \\
 & \quad = T_F(O(k) + O(h^2))
\end{array}$$