Elementos de Cálculo Numérico

Juan Pablo Pinasco (`jpinasco@dm.uba.ar//gmail.com`)

Departamento de Matemática e IMAS,
FCEyN, UBA - CONICET

2020

Parte I

Próxima clase

Hoy:

- Diferencias finitas

Próxima:

- PDEs no está en ADR, sí en el Burden, ver `http://cms.dm.uba.ar/academico/materias/verano2020/elementos_calculo_numerico_M/v2020/clase4.pdf` aunque no lo voy a hacer exactamente así.

Parte II

Problemas de contorno

Nos interesan ahora ecuaciones diferenciales de la forma

$$u''(x) = p(x)u'(t) + q(x)u(x) + f(x), \qquad x \in (0,1)$$

con condiciones de borde Dirichlet,

$$u(0) = a, \qquad u(1) = c$$

Hay también condiciones Neumann,

$$u'(0) = a, \qquad u'(1) = c$$

entre otras, en general:

$$sen(\theta)u(0) + cos(\theta)u'(0) = a,$$

$$sen(\phi)u(1) + cos(\phi)u'(1) = c$$

Para resolver el problema, tomamos un paso $h = 1/M$, y consideramos los puntos

$$\{x_j \ : \ 0 \leq j \leq M\}$$

En particular, para $j = 0$ tenemos $x = 0$; para $j = M$, $x = 1$.

Tenemos que encontrar numéricamente u, y para eso queremos calcular un vector $(u_0, u_1, \ldots, u_m)$ tal que

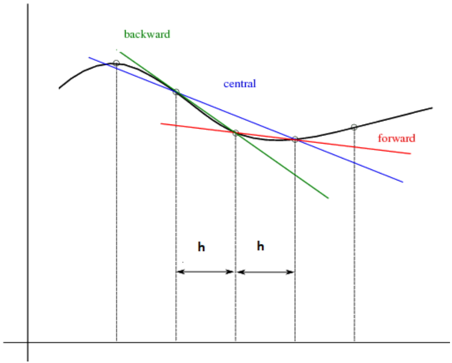
$$u_j \approx u(x_j) \ : \ 1 \leq j \leq M - 1$$

$$u_0 = a, \qquad u_M = c.$$

Veamos cómo se relacionan los $(u_0, u_1, \ldots, u_M)$ dada la ecuación diferencial.

Tenemos que ver cómo vamos a calcular u'_j y u''_j. Tenemos distintas opciones:

- Forward: $u'_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{h}$
- Backward: $u'_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{h}$
- Centrada: $u'_j = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}$



Para u'' le restamos la backward a la forward y dividimos por h:

$$u''_j = \frac{1}{h}\left(\frac{u_{j+1} - u_j}{h} - \frac{u_j - u_{j-1}}{h}\right)$$

$$u''(x_j) = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2}$$

Los coeficientes los llamamos

- $p_j = p(x_j)$
- $q_j = q(x_j)$
- $f_j = f(x_j)$

Veamos el nodo j, $x_j = jh$. Reemplazando en la ecuación

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

Multiplicando por h^2 y reagrupando,

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

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

$j = 1$ $$-(2 + h^2 q_1) u_1 + \left(1 - \tfrac{h}{2} p_2\right) u_2 = h^2 f_1 - \left(1 + \tfrac{h}{2} p_1\right) a$$

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

$j = M - 1$ $$(1 + \tfrac{h}{2} p_{M-1}) u_{M-2} - (2 + h^2 q_j) u_{M-1} = h^2 f_{M-1} - (1 - \tfrac{h}{2} p_{M-1}) c$$

7.- Forma matricial:

$$\begin{pmatrix} -(2+h^2q_1) & (1-\frac{h}{2}p_2)\cdots & \\ & \cdots & \\ \cdots(1+\frac{h}{2}p_j) & -(2+h^2q_j) & (1-\frac{h}{2}p_j)\cdots \\ & \cdots & \\ & \cdots(1+\frac{h}{2}p_{M-1}) & -(2+h^2q_{M-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \cdots \\ u_j \\ \cdots \\ u_{M-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dagger \\ \cdots \\ h^2 f_j \\ \cdots \\ \ddagger \end{pmatrix}$$

$$\dagger = h^2 f_0 - (1+\tfrac{h}{2}p_1)a$$

$$\ddagger = h^2 f_M - (1-\tfrac{h}{2}p_{M-1})c$$

En definitiva,

$$A_h u_h = b$$

$$u_h = A_h^{-1} b$$

Teorema

Sea $h < \text{máx}\{p(x)/2 \ : \ 0 < x < 1\}$, *y* $q > 0$. *Entonces la matriz es inversible.*

Dem: Para todo j se cumple que $|a_{jj}| > \sum_{k \neq j} |a_{jk}|$. Entonces todos los autovalores son distintos de cero.

Explicación: Sea λ cualquier autovalor, v_λ un autovector. Sea $w = v/v_j$, con v_j la coordenada de mayor módulo.

Como $Aw = \lambda w$,

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

y como la coordenada j de w es igual a 1, tenemos

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

$$|\lambda - a_{jj}| = |\sum_{k \neq j} a_{jk} w_k| \leq \sum_{k \neq j} |a_{jk}|$$

Puede ser $\lambda = 0$? No, tenemos un absurdo, valía

$$|a_{jj}| > \sum_{k \neq j} |a_{jk}|$$

Estamos arañando un mundo de problemas, cómo estimar autovalores de una matriz a partir de sus coeficientes. Esto es apenas una aproximación a los teoremas tipo Gerschorin.

10.- Error de truncado local

En todos los casos se calcula igual: Taylor, tachar lo que se pueda, y lo que queda es el error. Por ejemplo, para backward,

$$u'(x_j) - \frac{u(x_j) - u(x_j - h)}{h}$$

$$= u'(x_j) - \frac{u(x_j) - [u(x_j) - hu'(x_j) + h^2u''(x_j)/2 + O(h^3)]}{h}$$

$$= u'(x_j) - \frac{\cancel{u(x_j)} - [\cancel{u(x_j)} - hu'(x_j) + h^2u''(x_j)/2 + O(h^3)]}{h}$$

$$= u'(x_j) + \frac{[-\cancel{h}u'(x_j) + h^{\cancel{2}}u''(x_j)/2 + O(h^{\cancel{3}2})]}{\cancel{h}}$$

$$= u'(x_j) - u'(x_j) + hu''(x_j)/2 + O(h^2)$$

La centrada da mejor [**ejercicio!**].

La solución verdadera en la ecuación para u_j cumple

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

Hacemos Taylor,

$$u(x_{j+1}) = u(x_j) + hu'(x_j) + \frac{h^2}{2} u''(x_j) + \frac{h^3}{6} u'''(x_j) + O(h^4)$$

$$u(x_{j-1}) = u(x_j) - hu'(x_j) + \frac{h^2}{2} u''(x_j) - \frac{h^3}{6} u'''(x_j) + O(h^4)$$

y vamos a reemplazarlo en

$$\frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1})}{h^2}$$

$$\frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h}$$

12.- Error de truncado local

$$u(x_{j+1}) = u(x_j) + hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + O(h^4)$$
$$u(x_{j-1}) = u(x_j) - hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) - \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + O(h^4)$$

Reemplazo en $\frac{u(x_{j+1})-2u(x_j)+u(x_{j-1})}{h^2}$ y queda:

$$\frac{u(x_j)+hu'(x_j)+\frac{h^2}{2}u''(x_j)+\frac{h^3}{6}u'''(x_j)-2u(x_j)+u(x_j)-hu'(x_j)+\frac{h^2}{2}u''(x_j)-\frac{h^3}{6}u'''(x_j)+O(h^4)}{h^2}$$

Tacho algunas cosas,

$$\frac{\cancel{u(x_j)}+hu'(x_j)+\frac{h^2}{2}u''(x_j)+\frac{h^3}{6}u'''(x_j)\cancel{-2u(x_j)}+\cancel{u(x_j)}-hu'(x_j)+\frac{h^2}{2}u''(x_j)-\frac{h^3}{6}u'''(x_j)+O(h^4)}{h^2}$$

y queda

$$\frac{hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + \frac{h^3}{6}u'''(x_j) - hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) - \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + O(h^4)}{h^2}$$

Sigo tachando,

$$\frac{\cancel{hu'(x_j)} + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + \cancel{\frac{h^3}{6}u'''(x_j)} - \cancel{hu'(x_j)} + \frac{h^2}{2}u''(x_j) - \cancel{\frac{h^3}{6}u'''(x_j)} + O(h^4)}{h^2}$$

cambio de hoja

tenía:

$$\frac{\cancel{h u'(x_j)} + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + \cancel{\frac{h^3}{6}u'''(x_j)} - \cancel{h u'(x_j)} + \frac{h^2}{2}u''(x_j) - \cancel{\frac{h^3}{6}u'''(x_j)} + O(h^4)}{h^2}$$

eso es

$$\frac{\frac{h^2}{2}u''(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + O(h^4)}{h^2}$$

y si tacho un h^2, me queda, por fin,

$$\frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1})}{h^2} = u''(x_j) + O(h^2)$$

Ejercicio: chequeen que reemplazando los desarrollos de Taylor de $u(x_{j+1}$ y $u(x_{j-1})$ queda

$$\frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h} = u'(x_j) + O(h^2)$$

Ahora reemplazamos

$$\frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1})}{h^2} = u''(x_j) + O(h^2)$$

$$\frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h} = u'(x_j) + O(h^2)$$

en el esquema numérico

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

y queda

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

$$u''(x_j) - p_j u'(x_j) - q_j u(x_j) = f_j$$

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

Reemplazando la solución verdadera en la ecuación para u_j, tenemos

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

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

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

$$A_h u_h = b_b$$

$$A_h u = b_h + \tau_h$$

donde τ_h es el vector de errores de truncado.

Entonces

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

16.- Errores

Hay detalles que completar: ¿por qué una solución de la recurrencia da una buena aproximación de una solución de la ecuación?

Estamos viendo que $u(x_j)$ se parece a u_j porque ambas satisfacen ecuaciones en diferencias parecidas, y siempre hay una solución al invertir A_h. Podría haber problemas [posible trabajo para el punto extra]:

- Que no exista solución para la ecuación.
- Que A_h no sea inversible.
- Que A_h sea inversible pero algún autovalor tienda a cero con h.

Esto nos lleva a las definiciones de estabilidad, consistencia y convergencia:

- El método es **estable** si existe A_h^{-1}, y $\|A_h^{-1}\| \leq C$ para todo h suficientemente chico.
- El método es **consistente** si $\tau_h \to 0$.
- El método es **convegente** si $\|u - u_h\| \to 0$.

Teorema (Lax)

Si un método es consistente y estable, entonces es convergente.

• Las condiciones anteriores están en términos de normas de vectores y de matrices. Lo vemos en un par de clases.

• Pedimos $\|A_h^{-1}\| \leq C$ para todo h chico. ¿Qué pasa si la constante depende de h? Por ejemplo, $C = 1/h$.

• Resolver esto implica invertir matrices. ¿Hay otro camino que lo evite?

Sí, hay otra forma.