Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

Facultad de Ciencias - UNAM

3 de abril de 2018





1. EDO con condiciones de frontera

2. Método de disparo

Contenido 3 de abril de 2018 2 / 34

- 1. EDO con condiciones de frontera
 - 1.1 Consideraciones
- 2. Método de disparo

En problemas con ED con valores en dos puntos, las condiciones auxiliares asociadas con la ecuación diferencial, denominadas condiciones de frontera, se especifican en dos valores diferentes de x

$$y''=f(x,y,y'), \qquad y(a)=lpha, \qquad y(b)=eta$$

Esta aparentemente pequeña modificación de los problemas de valor inicial tiene una repercusión mayor: hace que los problemas de los valores en la frontera sean considerablemente más difíciles de resolver.

En un problema de ED con valor inicial comenzamos en el punto donde se dieron los valores iniciales y avanzar la solución hacia adelante en la medida en que sea necesario.

Esta técnica no funciona para problemas de valores en la frontera, ya que no hay suficientes condiciones iniciales disponibles en ninguno de los extremos para producir una solución única.

Una manera de superar la falta de condiciones iniciales es "adivinar/suponer" los valores perdidos.

Es muy poco probable que la solución resultante satisfaga las condiciones de frontera en el otro extremo, pero al inspeccionar la diferencia podemos estimar qué cambios habrá que reazliar en las condiciones iniciales antes de integrar nuevamente.

El método de disparo

Este procedimiento iterativo se conoce como el método de disparo.

El nombre se deriva de la analogía con el tiro al blanco: haz un tiro y observa donde golpea al objetivo; luego corrije el objetivo y vuelva a disparar.

Método de diferencias finitas

Otro método para resolver problemas de ED con valores en la frontera es el método de diferencias finitas, donde las ED son aproximadas por diferencias finitas en puntos de una malla uniformemente espaciados.

Como consecuencia, una ED se transforma en un conjunto de ecuaciones algebraicas simultáneas.

Sistemas no lineales

Los dos métodos mencionados tienen un problema común: generan un conjunto de ecuaciones no lineales, si las ecuaciones diferenciales son no lineales.

Solución de sistemas no lineales

Los métodos para resolver ecuaciones no lineales son procedimientos iterativos que pueden consumir una gran cantidad de recursos computacionales.

Por lo que resolver problemas de ED no lineales CDF no es barato. Otra complicación es que los métodos iterativos necesitan valores de partida razonablemente buenos para converger.

1. EDO con condiciones de frontera

- 2. Método de disparo
 - 2.1 Definición del método de disparo
 - 2.2 Ejemplo

Método de disparo 3 de abril de 2018 12 / 34

Método de disparo

El problema más simple de condiciones en la frontera es una EDO2 con una condición especificada en x = a y otra en x = b.

$$y''=f(x,y,y')$$
 $y(a)=lpha, \quad y(b)=eta$ (1)

Hagamos el intento de cambiar la ecuación (1) en un problema de valores iniciales

$$y''=f(x,y,y')$$
 $y(a)=lpha, \quad y'(a)=u$ (2

El punto importante es encontrar el valor correcto de u.

Esto podría hacerse por ensayo y error: Supongo u y resuelvo el problema de valor inicial avanzando desde x=a hasta b.

• Si la solución coincide con la condición de frontera prescrita $y(b) = \beta$, ya la hicimos!!

- Si la solución coincide con la condición de frontera prescrita $y(b) = \beta$, ya la hicimos!!
- De lo contrario tenemos que ajustar el valor de u y volver a intentarlo.

- Si la solución coincide con la condición de frontera prescrita $y(b) = \beta$, ya la hicimos!!
- De lo contrario tenemos que ajustar el valor de u y volver a intentarlo.

- Si la solución coincide con la condición de frontera prescrita $y(b) = \beta$, ya la hicimos!!
- De lo contrario tenemos que ajustar el valor de u y volver a intentarlo.

Claramente, este procedimiento es muy tedioso.

Podemos ser más sistemáticos si nos damos cuenta de que para encontrar el valor correcto de u, es un problema de búsqueda de raíces.

Como la solución del problema de valor inicial depende de u, el valor calculado de y(b) es una función de u; es decir

$$y(b) = \theta(u)$$

$$y(b) = \theta(u)$$

donde u es una raíz de

$$r(u) = \theta(u) - \beta = 0 \tag{3}$$

donde r(u) es el residual de frontera: es la diferencia entre el valor de frontera calculado y el que se especifica en x=b.

Podemos resolver la ecuación (3) a partir de cualquiera de los métodos discutidos en el Tema 2 de Operaciones Matemáticas Básicas, pero toma en cuenta que:

Podemos resolver la ecuación (3) a partir de cualquiera de los métodos discutidos en el Tema 2 de Operaciones Matemáticas Básicas, pero toma en cuenta que:

• El método de bisección no debe de utilizarse ya que involucra demasiadas evaluaciones de $\theta(u)$.

Podemos resolver la ecuación (3) a partir de cualquiera de los métodos discutidos en el Tema 2 de Operaciones Matemáticas Básicas, pero toma en cuenta que:

- El método de bisección no debe de utilizarse ya que involucra demasiadas evaluaciones de $\theta(u)$.
- El método de Newton-Rapshon requiere que conozcamos $d\theta/du$, lo que no podría hacerse de manera sencilla.

Calculando raíces

Toma en cuenta que si la ED es lineal, cualquier método para calcular la raíz necesitará solamente una interpolación para determinar el valor de u.

Ejemplo

Hagamos un ejercicio para revisar el método. Sea la siguiente EDO-2

$$u'' = -\frac{\pi^2}{4}(u+1) \tag{4}$$

y las CDF son u(0) = 0 y u(1) = 1.

Ejemplo

Hagamos un ejercicio para revisar el método. Sea la siguiente EDO-2

$$u'' = -\frac{\pi^2}{4}(u+1) \tag{4}$$

y las CDF son u(0) = 0 y u(1) = 1.

Definimos $y_1=u$ y $y_2=u'$, por lo que tenemos ahora

$$egin{aligned} rac{dy_1}{dx} &= y_2 \ rac{dy_2}{dx} &= -rac{\pi^2}{4}(y_1+1) \end{aligned}$$

Método de disparo Ejemplo 3 de abril de 2018 22 / 34

Asumimos que la ecuación tiene los valores iniciales $y_1(0) = 0$ y $y_2(0) = \alpha$.

Asumimos que la ecuación tiene los valores iniciales $y_1(0) = 0$ y $y_2(0) = \alpha$.

El valor de lpha tendrá que ajustarse para que $f(lpha)=u_lpha(1)-1=0.$

Podemos combinar el método de la secante y resolver el sistema de 1-EDO como lo hemos venido haciendo.

Solución analítica de la EDO-CDF

El problema CDF se resuelve de manera exacta, la solución analítica es:

$$u(x) = \cos\left(\frac{x\pi}{2}\right) + 2\sin\left(\frac{x\pi}{2}\right) - 1$$
 (5)

Código para la solución I

Código 1: Código para el método de disparo

```
def F(y,x):
     F = np.zeros((2), dtype='float
   64′)
     F[0] = y[1]
     F[1] = - (np.pi * np.pi) / 4.*(y[
   01 + 1.
     return F
5
6
 def exacta(x):
     return np.cos(np.pi * (x/2.)) +
8
   2 * np.sin(np.pi * (x/2.)) - 1
```

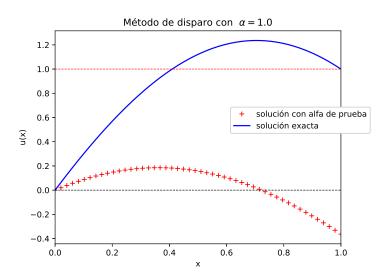
Código para la solución II

```
10
|y0| = np.array([0.0, 1.0])
12
|x| = \text{np.linspace}(0.0, 1.0)
14
y1 = odeint(F, y0, x)
16
17 for i in range (len (v1)):
      print ('{:1.6f} \t {:1.6f}'.
18
    format(x[i], y1[:,0][i]))
19
20|plt.plot(x,y1[:,0],'r+', label='
    solucion con alfa de prueba')
```

Código para la solución III

```
21 plt.plot(x, exacta(x), 'b-', label='
    solucion exacta')
22 plt.xlabel('x')
23 plt.ylabel('u(x)')
24 plt.title ('Metodo de disparo con $\
    alpha = 1.0$')
25 plt.xlim(0, 1)
26 plt.axhline(y = 0, color='k', lw=0.7
    5, ls='dashed')
27 plt.legend(loc='lower left', bbox-to
    -anchor = (0.5, 0.35))
28 plt.show()
```

Solución con $y0 = array([0.0, \alpha = 1.0])$



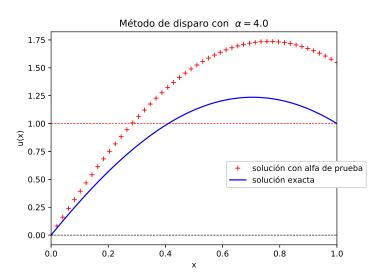
Método de disparo Ejemplo 3 de abril de 2018 28 / 34

Cambio en el parámetro

Como el valor de $\alpha=1$ nos devuelve una solución que comparada con la solución exacta, queda muy por debajo del valor de la condición de frontera del lado derecho.

Por lo que hay que modificar el valor, probamos ahora con un valor de $\alpha=4.0$, para ver qué es lo que ocurre.

Solución con $y0 = array([0.0, \alpha = 4.0])$



Método de disparo Ejemplo 3 de abril de 2018 30 / 34

Resultado por arriba

El cambio del valor de $\alpha = 4.0$ nos devuelve una solución que queda por arriba de lo esperado.

Pensar que si implementamos una rutina que esté incrementado el valor de α de manera automática hasta lograr el valor exacto, es quizá, la manera en la que no debemos de pensar.

El siguiente paso es encontrar el valor de la raíz en donde $f(\alpha) = u_{\alpha}(1) - 1 = 0$.

Revisando los valores que obtenemos para α :

$$u_{1.0}(1) = -0.3633$$

 $u_{4.0}(1) = 1.5464$

Por lo que necesariamente hay una raíz que debemos de utilizar para sustituirla en nuestro problema.

Interpolando para hallar la raíz

Dados los valores de la función en dos puntos, podemos utilizar la interpolación con python, de la siguiente manera:

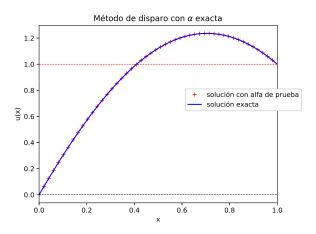
```
Código 2: Código para la interpolación

| xp = [1.0, 4.0] |
| fp = [-0.363380, 1.546479] |
| alfaexacta = np.interp(1.0, , )
| print (alfaexacta)
```

Revisa cómo deben de ir los argumentos xp, fp, tenemos que aplicar una interpolación inversa.

Método de disparo Ejemplo 3 de abril de 2018 33 / 34

Solución con y0=array([0.0,lpha=3.14159])



Método de disparo Ejemplo 3 de abril de 2018 34 / 34