Métodos Numéricos

Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
- Problemas de valor inicial:
Métodos Multipaso y Métodos Predictor-Corrector
- Problemas de Valor en la Frontera

Diego Passarella

Universidad Nacional de Quilmes

2^{do} Cuatrimestre de 2014

Repaso - Métodos de alto orden

Los métodos de alto orden, como por ejemplo, los de la familia *Runge-Kutta* se basan en realizar diversas evaluaciones de $f(y,x)$ a lo largo del intervalo $[x_i, x_{i+1}]$. Son métodos de un paso, pero suelen necesitar la evaluación de $f(y,x)$ en puntos tales como $x_i, x_i + h/2, x_i + (3/4)h, \cdots, x_i + h (= x_{i+1})$.
En estos métodos, la derivada temporal siempre suele ser discretizada por una aproximación tipo Euler.

Los métodos multipaso involucran la evaluación de $f(y,x)$ en diversos puntos del dominio $[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, \cdots, x_{i+p}]$ y/o también consideran aproximaciones de la derivada temporal de mayor orden (equivalente a más pasos involucrados).

Métodos Multipaso para PVI

Tal como se mencionó anteriormente, los métodos multipaso (mmp) ofrecen la posibilidad de resolver PVI con un alto orden. Esto métodos se basan en la evaluación de $f(y,x)$ en varios puntos del dominio. La fórmula general del los mmp es:

$$y_{n+1} = \sum_{j=0}^{p} a_j y_{n-j} + h \sum_{j=0}^{p} b_j f_{n-j} + h b_{-1} f_{n+1}, \quad n = p, p+1, \cdots$$

donde $p+1$ es el nro de pasos y $f_n = f(y_n, x_n)$.
Se deben dar los p+1 valores iniciales $y_0, y_1, \cdots, y_p$. y_0 es la CI, mientras que $y_1, \cdots, y_p$ son valores de la solución que se deden obtener por métodos adecuados *(por ejemplo RK de orden igual o superior al mmp)*.

Métodos Multipaso

Algunas fórmulas más comunes de los mmp basadas en una aproximación de alto orden de $f(y,x)$:

Adams-Bashforth de 3^{er} orden (AB3):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}\left(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}\right)$$

Es un método de *tres pasos*, de *tercer orden* y *explícito*.
Surge de utilizar un P_2 de $f(y,x)$ en los puntos t_{n-2}, t_{n-1}, t_n.

Adams-Moulton de 4^{to} orden (AM4):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}\right)$$

Es un método de *tres pasos*, de *cuarto orden* e *implícito*.
Surge de utilizar un P_3 de $f(y,x)$ en los puntos $t_{n-2}, t_{n-1}, t_n, t_{n+1}$.

Métodos Multipaso

Métodos que surgen al aproximar dy/dt por esquemas de mayor orden que una derivada tipo Euler:

Diferencia Regresiva de Orden 2 (BDF2):

Se considera la aproximación: (recordar clase de derivadas)

$$\frac{-y_{n-1} + 4y_n - 3y_{n+1}}{2h} \simeq \left(\frac{dy}{dt}\right)_{(x_{n+1})} = f_{n+1}$$

de forma que el esquema queda:

$$y_{n+1} = \frac{-1}{3} y_{n-1} + \frac{4}{3} y_n - \frac{2h}{3} f_{n+1}$$

Es una fórmula de *dos pasos*, *segundo orden* e *implícita*.

Métodos Multipaso

Diferencia Regresiva de Orden 3 (BDF3):

De forma equivalente al BDF2, se puede plantear una aproximación descentrada de la derivada temporal que sea de orden 3 de aproximación. A partir de ella surge la siguiente fórmula:

$$y_{n+1} = \frac{11}{18} y_n - \frac{9}{11} y_{n-1} + \frac{2}{11} y_{n-2} + \frac{6h}{11} f_{n+1}$$

Es una fórmula de *tres pasos*, *tercer orden* e *implícita*.

Métodos Predictor-Corrector

En la resolución de fórmulas implícitas se necesita encontrar un cero de una ecuación no lineal (siempre que $f(y,x)$ sea no lineal). Esto debe hacerse en cada paso de tiempo $(y_n \to y_{n+1})$.

Por ejemplo, para resolver el θ-método, se puede plantear el siguiente punto fijo.

$$y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + h\left(\theta f(y_n, x_n) + (1-\theta) f(y_{n+1}^{(k)}, x_{n+1})\right)$$

Se puede demostrar que si $y_{n+1}^{(0)}$ se elige convenientemente, con una sola iteración de punto fijo se obtiene una solución numérica $y_{n+1}^{(1)}$ cuya precisión es del mismo orden de error que la solución y_{n+1} del método implícito original.

Métodos Predictor-Corrector

De forma general, si el método implícito es de orden p, el iterante inicial $y_{n+1}^{(0)}$ debería ser generado por un método explícito de orden $p-1$ *como mínimo*.
Por ejemplo, si se combina θ-método ($\theta = 1/2$, orden 2) con Euler Explícito (orden 1), se llega al método de Euler Mejorado:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(y_n, x_n), \qquad \text{EE: predictor}$$

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + h\left(\theta f_n + (1-\theta) f(y_{n+1}^{(0)}, x_{n+1})\right), \qquad \theta\text{-M: corrector}$$

Otras combinaciones posibles son (por ejemplo):

P: AB3 (explícito, 3er orden)

C: AM4 (implícito, 4to orden)

Problemas de Valor en la Frontera

Los problemas de valor en la frontera tratan la resolución de EDO's donde la función incógnita varía a lo largo de una dimensión espacial. Generalmente se trata de problemas de segundo orden. El caso particular para 1-D es:

$$\frac{d}{dx}\left(-c\frac{dy}{dx}\right) = f, \qquad x \in [0, L]$$

Las condiciones de contorno (CC) más comunes para este problema son:

$y(0) = y_0, \qquad y(L) = y_L$, (cond. Dirichlet en 0 y L) ó

$y(0) = y_0, \qquad \frac{dy}{dx}|_{x=L} = \phi_L$, (cond. Dirichlet en 0 y Neumann L)

El problema no posee solución única si se define con dos CC Neumann.

PVF - Diferencias Finitas

Recordatorios de derivadas 1^{ra} y 2^{da}:

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

$$y_{i+1}' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

Notar que la derivada 2^{da} también se puede obtener considerando (por ejemplo), la derivada 1^{ra} progresiva en i e $i-1$ y luego la derivada regresiva de y_n'' en i.

PVF - Diferencias Finitas

En el caso que la función c sea constante, se puede aproximar la derivada segunda por:

$$\frac{d}{dx}\left(-c\frac{dy}{dx}\right)_i \approx -c\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

Si $c = c(y, x)$, es mucho más conveniente la expresión conservativa:

$$\frac{d}{dx}\left(-c\frac{dy}{dx}\right)_i \approx -\frac{c_i y_{i+1} - (c_i + c_{i-1})\, y_i + c_{i-1} y_{i-1}}{h^2}$$

Para $c(y, x)$ conocida, este tipo de esquemas hace que la resolución de un PVF sea equivalente a resolver un SEL

PVF - Diferencias Finitas

Caso y(0) = y_0, y(L) = y_N, f = f(x)

Hay que resolver las $N-1$ incógnitas interiores del dominio

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \end{pmatrix} = -\frac{h^2}{c} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ y_N \end{pmatrix}$$

Ejemplos de PVF

Tracción/compresión de una barra uniaxial:

$$-\frac{d}{dx}\left(-E(x).A(x)\frac{du}{dx}\right) = f$$

donde $u(x)$ es el desplazamiento de cada punto de la barra, E es el módulo de elasticidad, A la sección transversal de la barra y f una fuerza distribuida. Si la masa propia de la barra no es despreciable y su peso actúa en la misma dirección que la tracción, se puede escribir, $f = m.g$.

Las CC pueden ser:

- $u(0) = 0$, $u(L) = u_L$ (empotramiento + desplazamiento fijo)
- $u(0) = 0$, $E.A\frac{du}{dx}|_{x=L} = F_L$ (empotramiento + fuerza aplicada)

Ejemplos de PVF

Conducción del calor:

$$-\frac{d}{dx}\left(-k(x)\frac{dT}{dx}\right) = Q$$

donde $T(x)$ es la temperatura, k la conductividad del calor y Q una fuente de calor distribuida.
Las CC pueden ser:

- $T(0/L) = T_0$, Temperatura prefijada
- $-k\frac{dT}{dx} = h_{conv}\left(T_w - T_{ref}\right)$, Flujo de calor convectivo
- $-k\frac{dT}{dx} = 0$, Aislación térmica

Transmisión del calor

Considerar una pared compuesta por tres capas de espesores y conductividades térmicas correspondientes: (e1,e2,e3) = (5, 3.5, 2.5), (k1,k2,k3) = (50, 30, 70).
Si la temperatura en el extremo izquierdo está fija a 100C,
Encontrar:

1. La distribución de temperaturas a lo largo de toda la pared si el extremo derecho está a 35C.
2. Idem a 1) pero extremo derecho cede calor por convección con un coeficiente $h_{conv} = 50$ y la T de referencia es 35C. Comparar y analizar los resultados.