Métodos Numéricos para la Informática

Métodos numéricos para la resolución de problemas de contorno (II)

I. Arregui

Noviembre, 2014

Métodos numéricos para la resolución de problemas de contorno

Métodos de diferencias finitas en problemas unidimensionales

- Problemas estacionarios
- Problemas evolutivos

Método de diferencias finitas: problema estacionario

Dados:

$$
\begin{aligned}
&a, b \in \mathbb{R}, \quad a < b \\
&f, c \in \mathscr{C}([a,b]) \\
&\alpha, \beta \in \mathbb{R}
\end{aligned}
$$

buscamos una función $u \in \mathscr{C}^2([a,b])$ tal que:

$$
\begin{cases}
-u'' + c(x)\, u = f(x), & \forall x \in (a,b) \\
u(a) = \alpha & \text{(condición de contorno)} \\
u(b) = \beta & \text{(condición de contorno)}
\end{cases}
$$

- Sabemos que si $c \geq 0$ en $[a,b]$, el problema admite una única solución
- Vamos a buscar una **aproximación** de la solución en un conjunto discreto de puntos (**nodos**) en $[a,b]$

Método de diferencias finitas: discretización

Llamaremos **malla** a una discretización del dominio; puede ser:

- **uniforme**: dado $N > 1$,

$$h = \frac{b-a}{N+1} > 0\,, \qquad x_i = a + ih\,, \quad i = 0, 1, \ldots, N+1$$

- **no uniforme**:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N < x_{N+1} = b$$

Los puntos x_i se denominan **nodos**. En cada uno de ellos tomaremos una aproximación de la solución:

$$u_i \approx u(x_i)\,, \qquad\qquad i = 0, 1, \ldots, N+1$$

o evaluaremos, en general, cualquier función conocida:

$$c_i = c(x_i)\,, \qquad f_i = f(x_i)\,, \qquad\qquad i = 0, 1, \ldots, N+1$$

Método de diferencias finitas: discretización

Consideraremos una malla uniforme. Si escribimos la ecuación en cada uno de los nodos interiores de la malla:

$$-u''(x_i) + c(x_i)\,u(x_i) = f(x_i)\,, \qquad i = 1, 2, \ldots, N$$

y sustituimos la expresión de la derivada segunda, obtenemos:

$$-\frac{u(x_{i-1}) - 2u(x_i) + u(x_{i+1})}{h^2} + c(x_i)\,u(x_i) = f(x_i) + C_i h^2\,, \qquad i = 1, 2, \ldots, N$$

$$\begin{array}{lr}
(i=1) & -\dfrac{u(x_0)}{h^2} + \dfrac{2u(x_1)}{h^2} - \dfrac{u(x_2)}{h^2} \quad + c(x_1)u(x_1) = f(x_1) + C_1 h^2 \\
(i=2,\ldots,N-1) & -\dfrac{u(x_{i-1})}{h^2} + \dfrac{2u(x_i)}{h^2} - \dfrac{u(x_{i+1})}{h^2} \quad + c(x_i)u(x_i) = f(x_i) + C_i h^2 \\
(i=N) & -\dfrac{u(x_{N-1})}{h^2} + \dfrac{2u(x_N)}{h^2} - \dfrac{u(x_{N+1})}{h^2} + c(x_N)u(x_N) = f(x_N) + C_N h^2
\end{array}$$

donde $u(x_0) = \alpha, \;\; u(x_{N+1}) = \beta$

Método de diferencias finitas: S.E.L.

En forma matricial, el sistema de ecuaciones lineales se escribe:
$A_h u_h = b_h + \varepsilon_h$, donde:

$$A_h = \begin{bmatrix} \frac{2}{h^2} + c(x_1) & -\frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + c(x_2) & -\frac{1}{h^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + c(x_3) & -\frac{1}{h^2} & \dots & 0 \\ & \dots & & \dots & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{2}{h^2} + c(x_N) \end{bmatrix}$$

$$u_h = \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_N) \end{bmatrix} \qquad b_h = \begin{bmatrix} f(x_1) + \frac{\alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_N) + \frac{\beta}{h^2} \end{bmatrix} \qquad \varepsilon_h = h^2 \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_N \end{bmatrix}$$

Método de diferencias finitas: S.E.L.

Si h es pequeño, el vector ε_h es despreciable frente a los demás

Consideramos el problema aproximado: $A_h\overline{u_h} = b_h$, donde:

$$\overline{u_h} = \begin{bmatrix} u_{h,1} \\ u_{h,2} \\ \vdots \\ u_{h,N} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ \vdots \\ u(x_N) \end{bmatrix} = u_h$$

Propiedad

Si $c \geq 0$ *y* $u \in \mathscr{C}^4([a,b])$, *entonces,*

$$\|u_h - \overline{u_h}\|_\infty \leq \frac{h^2}{96} \max_{x\in[a,b]} \left|u^{iv}(x)\right|$$

Condiciones de contorno tipo Dirichlet (I)

Una primera forma de imponer las condiciones tipo Dirichlet:

$$u(a) = \alpha\,, \qquad u(b) = \beta$$

es la descrita anteriormente:

$$\begin{array}{ll}
(i=1) & -\dfrac{u_0}{h^2} + \dfrac{2u_1}{h^2} - \dfrac{u_2}{h^2} + c_1 u_1 = f(x_1) \\
(i=2,\ldots,N-1) & -\dfrac{u_{i-1}}{h^2} + \dfrac{2u_i}{h^2} - \dfrac{u_{i+1}}{h^2} + c_i u_i = f(x_i) \\
(i=N) & -\dfrac{u_{N-1}}{h^2} + \dfrac{2u_N}{h^2} - \dfrac{u_{N+1}}{h^2} + c_N u_N = f(x_N)
\end{array}$$

Como conocemos los valores $u_0 = \alpha$ y $u_{N+1} = \beta$, llevamos esta información al segundo miembro:

$$\begin{bmatrix}
\frac{2}{h^2}+c_1 & -1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\
-1 & \frac{2}{h^2}+c_2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\
0 & -1 & \frac{2}{h^2}+c_3 & -1 & \ldots & 0 \\
 & & & & \ldots & \\
0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \frac{2}{h^2}+c_N
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \ldots \\ u_N \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \ldots \\ f(x_N) \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix} \alpha/h^2 \\ 0 \\ 0 \\ \ldots \\ \beta/h^2 \end{bmatrix}$$

Las incógnitas son las aproximaciones de la solución en los nodos interiores

Condiciones de contorno tipo Dirichlet (II)

Una segunda forma de imponer las condiciones Dirichlet consiste en incluir los valores en la frontera entre las incógnitas:

$$
\begin{array}{lll}
(i=0) & u_0 & = \alpha \\
(i=1) & -\dfrac{u_0}{h^2} + \dfrac{2u_1}{h^2} - \dfrac{u_2}{h^2} \quad + c_1 u_1 & = f(x_1) \\
(i=2,\ldots,N-1) & -\dfrac{u_{i-1}}{h^2} + \dfrac{2u_i}{h^2} - \dfrac{u_{i+1}}{h^2} \quad + c_i u_i & = f(x_i) \\
(i=N) & -\dfrac{u_{N-1}}{h^2} + \dfrac{2u_N}{h^2} - \dfrac{u_{N+1}}{h^2} + c_N u_N & = f(x_N) \\
(i=N+1) & u_{N+1} & = \beta
\end{array}
$$

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\
-\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2}+c_1 & -\frac{1}{h^2} & 0 & 0 & \ldots & 0 \\
0 & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2}+c_2 & -\frac{1}{h^2} & 0 & \ldots & 0 \\
0 & 0 & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2}+c_3 & -\frac{1}{h^2} & \ldots & 0 \\
 & \ldots & \ldots & & & \ldots & \\
0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \frac{2}{h^2}+c_N & -\frac{1}{h^2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \ldots \\ u_N \\ u_{N+1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\alpha \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \ldots \\ f(x_N) \\ \beta
\end{bmatrix}
$$

Condiciones de contorno tipo Neumann

Queremos imponer el flujo (derivada) de la solución en la frontera derecha:

$$u'(b) = \beta$$

Si aproximamos la derivada mediante una aproximación de primer orden, tenemos:

$$\beta = u'(x_{N+1}) \approx \frac{u_{N+1} - u_N}{h}$$

de donde: $u_{N+1} = u_N + \beta\, h$

Si queremos imponer la condición en la frontera izquierda,

$$\alpha = u'(x_0) \approx \frac{u_1 - u_0}{h} \quad \Longrightarrow \quad u_0 = u_1 - \alpha\, h$$

Método de diferencias finitas: ejemplo 1

Buscamos la función u solución del problema de contorno:

$$\begin{cases} -u'' = \sin(\pi + x)\,, & x \in (0, \pi) \\ u(0) = u(\pi) = 0 \end{cases}$$

Sabemos que la solución es $u(x) = \sin(\pi + x)$.

Discretización: $N = 3$

$$x_0 = 0\,, \quad x_1 = \frac{\pi}{4}\,, \quad x_2 = \frac{\pi}{2}\,, \quad x_3 = \frac{3\pi}{4}\,, \quad x_4 = \pi$$

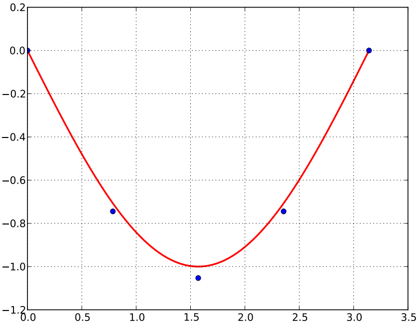
Sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{aligned} -\frac{-2u_1 + u_2}{\pi^2/16} &= \sin(\pi + \pi/4) = -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{u_1 - 2u_2 + u_3}{\pi^2/16} &= \sin(\pi + \pi/2) = -1 \\ -\frac{u_2 - 2u_3}{\pi^2/16} &= \sin(\pi + 3\pi/4) = -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{aligned}$$

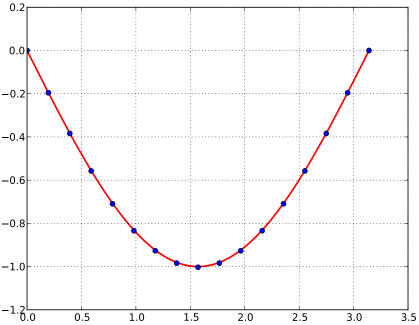
Además, $u_0 = u_4 = 0$

Método de diferencias finitas: ejemplo 1

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0{,}43617 \\ -0{,}61685 \\ -0{,}43617 \end{bmatrix}$$



$N = 3$



$N = 15$

Método de diferencias finitas: ejemplo 2

Una viga simplemente apoyada y sometida a una carga $p(x)$ puede modelizarse mediante los problemas de contorno:

$$\begin{cases} -EIu''(x) = p(x) \\ u(0) = u(L) = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} -w''(x) = u(x) \\ w(0) = w(L) = 0 \end{cases}$$

donde u es el momento flector y w es el desplazamiento en cada punto de la viga.

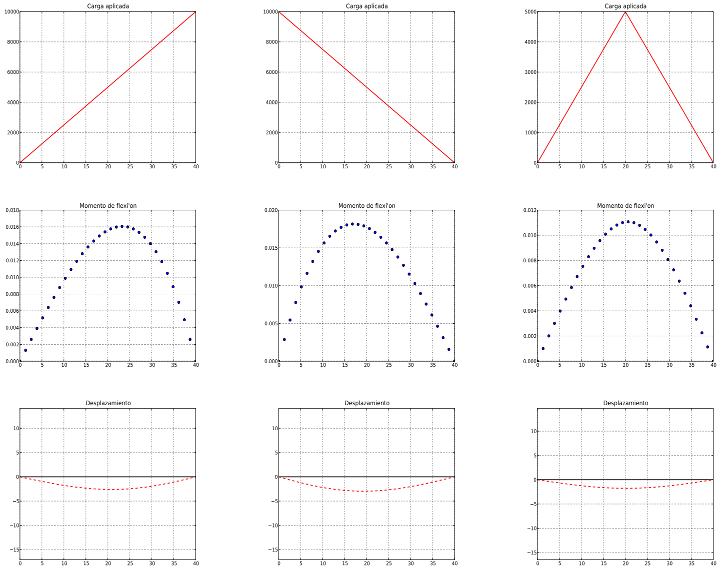
Supondremos tres situaciones:

(a) $p(x) = \dfrac{2p_{\text{máx}}}{L}x$

(b) $p(x) = \dfrac{2p_{\text{máx}}}{L}(L-x)$

(c) $p(x) = \begin{cases} \dfrac{2p_{\text{máx}}}{L}x, & \text{si } x \leq L/2 \\ \dfrac{2p_{\text{máx}}}{L}(L-x), & \text{si } x \geq L/2 \end{cases}$

Método de diferencias finitas: ejemplo 2



Método de diferencias finitas: problema evolutivo

Dados:

- $a, b, T, \alpha \in \mathbb{R}, \quad a < b, \quad T > 0$
- $f, g \in \mathscr{C}([0, T])$
- $u_0 \in \mathscr{C}([a, b])$

buscamos una función $u \in \mathscr{C}^2([a, b] \times [0, T])$ tal que:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \alpha \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, & \forall x \in (a, b) \\ u(a, t) = f(t) & \text{(condición de contorno)} \\ u(b, t) = g(t) & \text{(condición de contorno)} \\ u(x, 0) = u_0(x) & \text{(condición inicial)} \end{cases}$$

Diferencias finitas, esquema ETCE

Esquema explícito en tiempo y centrado en espacio

Dados $N > 1$ y $k = \Delta t > 0$, definimos:

$$t^n = nk\,, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$h = \frac{b-a}{N+1}\,, \qquad x_i = ih\,, \quad i = 0, 1, \ldots, N+1$$

y una malla:

$$\{(x_i, t^n) \,/\, t^n = nk, x_i = ih;\; n = 0, 1, 2, \ldots;\; i = 0, 1, \ldots, N+1\}$$

El objetivo es aproximar la función u en todos los puntos de la malla:

$$u_i^n \approx u(x_i, t^n)$$

Aproximaremos las derivadas parciales de la siguiente forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^n) \approx \frac{u(x_i, t^{n+1}) - u(x_i, t^n)}{k} \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^n) \approx \frac{u(x_{i+1}, t^n) - 2u(x_i, t^n) + u(x_{i-1}, t^n)}{h^2} \approx \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2}$$

Diferencias finitas, esquema ETCE

Entrando con estas aproximaciones en la EDP, obtenemos:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k} = \frac{\alpha}{h^2}\left(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n\right), \quad i = 1, 2, \ldots, N$$

y, despejando,

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\alpha k}{h^2}\left(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n\right), \quad i = 1, 2, \ldots, N$$

- Se trata de un método explícito: conocidas las aproximaciones en el instante t^n, podemos calcular directamente las aproximaciones en el instante t^{n+1}
- En el primer paso, utilizaremos la condición inicial u_0
- En todo momento conocemos los valores de $u_0^n = f(t^n)$ y $u_{N+1}^n = g(t^n)$

Diferencias finitas, esquema ETCE: convergencia

Consistencia del método: la ecuación en diferencias tiende a la ecuación en derivadas parciales cuando $h \to 0$ y $k \to 0$

$$u(x_i, t^{n+1}) = u(x_i, t^n) + k\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^n) + \frac{k^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t^n) + \frac{k^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_i, t^n) + \ldots\ldots$$
$$u(x_{i\pm 1}, t^n) = u(x_i, t^n) \pm h\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^n) + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^n) \pm \frac{h^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t^n) + \ldots\ldots$$

y, sustituyendo en el esquema,

$$u_i^n + k\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_i^n + \frac{k^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_i^n + \ldots = u_i^n + \frac{\alpha k}{h^2}\left(h^2\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i^n + \frac{h^4}{12}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i^n + \ldots\right)$$
$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_i^n + \frac{k}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_i^n + \ldots = \alpha\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i^n + \frac{\alpha h^2}{12}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_i^n + \ldots$$
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^n) = \alpha\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^n)$$

Diferencias finitas, esquema ETCE: convergencia

Estabilidad: se dice que un método es estable cuando pequeñas variaciones en los datos producen pequeñas variaciones en la solución

Puede demostrarse que el esquema ETCE es **condicionalmente estable**: es estable si

$$\frac{\alpha k}{h^2} < \frac{1}{2} \quad \Longleftrightarrow \quad k < \frac{h^2}{2\alpha}$$

- Esta condición de estabilidad puede utilizarse para escoger el paso de tiempo, una vez conocido el paso de la discretización espacial

Según el teorema de Lax, un método numérico es convergente si es consistente y estable. Por lo tanto, el método ETCE es **condicionalmente convergente**

Diferencias finitas, esquemas ITCE

Esquema implícito en tiempo y centrado en espacio

Utilizamos las siguientes aproximaciones:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i,t^{n+1}) \approx \frac{u(x_i,t^{n+1})-u(x_i,t^n)}{k} \approx \frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{k}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i,t^{n+1}) \approx \frac{u(x_{i+1},t^{n+1})-2u(x_i,t^{n+1})+u(x_{i-1},t^{n+1})}{h^2} \approx \frac{u_{i+1}^{n+1}-2u_i^{n+1}+u_{i-1}^{n+1}}{h^2}$$

de donde obtenemos

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\alpha k}{h^2}\left(u_{i+1}^{n+1}-2u_i^{n+1}+u_{i-1}^{n+1}\right), \quad i=1,2,\ldots,N$$

o bien

$$-\frac{\alpha k}{h^2}u_{i-1}^{n+1} + \left(1+\frac{2\alpha k}{h^2}\right)u_i^{n+1} - \frac{\alpha k}{h^2}u_{i+1}^{n+1} = u_i^n, \quad i=1,2,\ldots,N$$

- Para calcular u_i^{n+1}, debemos resolver un sistema de ecuaciones (lineales)

Diferencias finitas, esquemas ITCE

En general, dado $\theta \in [0,1]$, planteamos las siguientes aproximaciones:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^{n+1/2}) \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{k}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^{n+1/2}) \approx (1-\theta)\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2} + \theta\frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2}$$

- Si $\theta = 0$, tenemos el método explícito (ETCE)
- Si $\theta > 0$, los esquemas obtenidos son implícitos
  - Si $\theta = 1/2$, el esquema se denomina método de Crank–Nicolson

Diferencias finitas, esquemas ITCE: convergencia

Los esquemas implícitos son **convergentes**

- si $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$
- o si $0 \leq \theta \leq \frac{1}{2}$ y $\frac{\alpha k}{h^2} < \frac{1}{2}$

Orden de convergencia:

- ETCE ($\theta = 0$): $O(h^2) + O(k)$
- ITCE ($\theta = 1$): $O(h^2) + O(k)$
- Crank–Nicolson: $O(h^2) + O(k^2)$