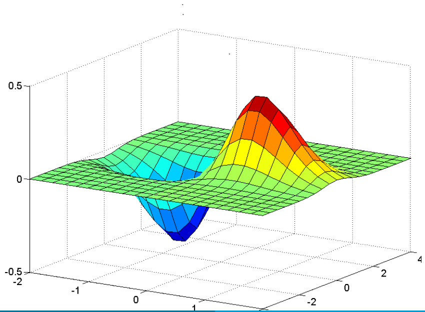
Tema 6: Problemas de contorno unidimensionales. Diferencias finitas

Métodos Numéricos Avanzados en Ingeniería

Máster en Ingeniería Matemática y Computación

Alicia Cordero, Neus Garrido, Juan R. Torregrosa

LA UNIVERSIDAD
EN INTERNET



Contenido

Diferencias finitas

A partir de la definición de derivada o del desarrollo de Taylor de una función $f(x)$, podemos deducir las siguientes aproximaciones de la derivada:

Diferencia progresiva

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}, \quad \text{o bien} \quad f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + O(h).$$

Diferencia regresiva

$$f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}, \quad \text{o bien} \quad f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + O(h).$$

Diferencia central

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}, \quad \text{o bien} \quad f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + O(h^2).$$

Análogamente, para la segunda derivada podemos obtener:

Diferencia progresiva

$$f''(x) \approx \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}, \quad \text{ó} \quad f''(x) = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2} + O(h).$$

Diferencia regresiva

$$f''(x) \approx \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{h^2}, \quad \text{ó} \quad f''(x) = \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{h^2} + O(h).$$

Diferencia central

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}, \quad \text{ó} \quad f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2).$$

¡Diferentes aproximaciones de $f'(x)$, $f''(x)$, $f'''(x)$, ... pueden obtenerse a partir del desarrollo de Taylor, polinomios de interpolación, etc.!

Problema de contorno

$$y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x), \quad x \in [a,b], \quad y(a) = \alpha, y(b) = \beta$$

El método consiste en transformar nuestro problema en un sistema de ecuaciones lineales, cuyas incógnitas son los valores aproximados de $y(x)$ en los nodos elegidos del intervalo $[a,b]$.

- Transformación del problema
$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} = p(x)\frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + q(x)y(x) + r(x) + O(h^2),$$
- Discretización y aproximación
$$h = \frac{b-a}{N+1}, \quad x_i = a + ih, i = 0,1,2,\ldots,N+1, \qquad y_i \approx y(x_i)$$
$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = p(x_i)\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + q(x_i)y_i + r(x_i), \quad i = 1,2,\ldots,N$$
o equivalentemente
$$-\left(1 + \frac{h}{2}p(x_i)\right)y_{i-1} + (2 + h^2 q(x_i))y_i - \left(1 - \frac{h}{2}p(x_i)\right)y_{i+1} = -h^2 r(x_i), \quad i = 1,2,\ldots,N$$
- Forma matricial y resolución
$$Ay = d,$$

Método de diferencias finitas

Matriz de coeficientes

$$\begin{pmatrix} 2+h^2q(x_1) & -1+\frac{h}{2}p(x_1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1-\frac{h}{2}p(x_2) & 2+h^2q(x_2) & -1+\frac{h}{2}p(x_2) & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1-\frac{h}{2}p(x_3) & 2+h^2q(x_3) & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2+h^2q(x_{N-1}) & -1+\frac{h}{2}p(x_{N-1}) \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1-\frac{h}{2}p(x_N) & 2+h^2q(x_N) \end{pmatrix}$$

Términos independientes

$$\begin{pmatrix} -h^2r(x_1)+(1+\frac{h}{2}p(x_1))\alpha \\ -h^2r(x_2) \\ \vdots \\ -h^2r(x_{N-1}) \\ -h^2r(x_N)+(1-\frac{h}{2}p(x_N))\beta \end{pmatrix},$$

Incógnitas

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}$$

- ENTRADA funciones $p(x)$, $q(x)$, $r(x)$; extremos a, b; condiciones contorno α, β; número de puntos N.
- SALIDA aproximaciones y_i de $y(x_i)$ para $i = 0, 1, 2, \ldots, N+1$.

- Paso 1 $h = \dfrac{b-a}{N+1}$; tomar $x = a + h$;
  $dp_1 = 2 + h^2 q(x)$, $ds_1 = -1 + \dfrac{h}{2} p(x)$, $d_1 = -h^2 r(x) + (1 + \dfrac{h}{2} p(x))\alpha$,
- Paso 2 Para $i = 2, 3, \ldots, N-1$, tomar $x = a + ih$;
  $dp_i = 2 + h^2 q(x)$, $ds_i = -1 + \dfrac{h}{2} p(x)$, $di_{i-1} = -1 - \dfrac{h}{2} p(x)$, $d_i = -h^2 r(x)$,
- Paso 3 Tomar $x = b - h$,
  $dp_N = 2 + h^2 q(x)$, $di_{N-1} = -1 - \dfrac{h}{2} p(x)$, $d_N = -h^2 r(x) + (1 - \dfrac{h}{2} p(x))\beta$,
- Paso 4 Llamada al algoritmo de Crout para resolver el sistema,
  $y = Crout(dp, ds, di, d)$.

Permite resolver sistemas lineales $Ax = d$, con A matriz tridiagonal, de manera óptima en cuanto al número de operaciones. Se basa en la factorización de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1n-1} & a_{n-1n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

en $A = LU$, donde

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & l_{32} & l_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & l_{n-1n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & l_{nn-1} & l_{nn} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & u_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & u_{n-1n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Igualando término a término los elementos de A y los de LU, obtenemos:

Método de Crout

- $i = 1$ $\qquad l_{11} = a_{11}, \quad u_{12} = a_{12}/l_{11},$
- Para $i = 2, 3, \ldots, n-1$ $\qquad \begin{array}{l} l_{ii-1} = a_{ii-1}, \\ l_{ii} = a_{ii} - l_{ii-1}u_{i-1i}, \\ u_{ii+1} = a_{ii+1}/l_{ii}, \end{array}$
- $i = n$ $\qquad l_{nn-1} = a_{nn-1}, \quad l_{nn} = a_{nn} - l_{nn-1}u_{n-1n},$

Transformación del sistema

$$Ax = d \Leftrightarrow LUx = d \Leftrightarrow \left.\begin{array}{r} Lz = d \\ Ux = z \end{array}\right\}$$

$Lz = d \quad \leftarrow \quad$ Sustitución directa

$Ux = z \quad \leftarrow \quad$ Sustitución inversa

- function sol=Crout(a,b,c,d)
  n=length(a);
- % Obtención de las matrices L y U tales que $A = LU$
```
l(1)=a(1);
u(1)=b(1)/l(1);
for i=2:n-1
        l(i)=a(i)-c(i-1)*u(i-1);
        u(i)=b(i)/l(i);
end
l(n)=a(n)-c(n-1)*u(n-1);
```
- % Solución del sistema $Lz = d$
```
z(1)=d(1)/l(1);
for i=2:n
        z(i)=(1/l(i))*(d(i)-c(i-1)*z(i-1));
end
```
- % Solución del sistema $Ux = z$
```
x(n)=z(n);
for i=n-1:-1:1
        x(i)=z(i)-u(i)*x(i+1);
end
sol=x(:);
```

Ejemplo

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{29} \\ x_{30} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Matriz de coeficientes mal condicionada, sensible a errores de redondeo.

- Algoritmo de Gauss $\rightarrow$ 9890 productos-cocientes.
  Recordemos que el número de productos-cocientes que requiere el método de Gauss para resolver un sistema lineal de tamaño $n \times n$ es $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$.

- Algoritmo de Crout $\rightarrow$ 523 productos-cocientes. El coste computacional de resolver un sistema lineal de tamaño $n \times n$ es de $5n - 4$ productos-cocientes.

Ejemplo

$$y'' = -\frac{2}{x}y' + \frac{2}{x^2}y + \frac{\sin(\ln x)}{x^2}, \quad x \in [1,2], \quad y(1) = 1, y(2) = 2.$$

x_i	y_i	$y(x_i)$	$\lvert y(x_i) - y_i \rvert$
1.0	1.0000	1.0000	-
1.1	1.0926	1.0926	2.88e-5
1.2	1.1870	1.1870	4.17e-5
1.3	1.2833	1.2833	4.55e-5
1.4	1.3814	1.3814	4.39e-5
1.5	1.4811	1.4811	3.92e-5
1.6	1.5823	1.5823	3.26e-5
1.7	1.5850	1.5850	2.49e-5
1.8	1.7888	1.7888	1.68e-5
1.9	1.8939	1.8939	8.41e-6
2.0	2.0000	2.0000	-

¡ El error máximo está alrededor de 10^{-5} !

Problemas no lineales de segundo orden

Problemas descritos por una ecuación diferencial de segundo orden

$$y'' = f(x, y, y'), \quad x \in [a, b]$$

y condiciones, por ejemplo, tipo Dirichlet: $y(a) = \alpha$, $y(b) = \beta$. La función f no lineal en y ó y'.

Métodos para aproximar la solución del problema:

- Método de disparo
- Método de diferencias finitas

Problema

$$y'' = f(x, y, y'), \quad x \in [a, b], \quad y(a) = \alpha, y(b) = \beta.$$

- Transformación del problema

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} = f\left(x, y(x), \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}\right) + O(h^2)$$

- Discretización y aproximación del problema

$$h = \frac{b-a}{N+1}, \qquad x_i = a + ih, \ i = 0, 1, 2, \ldots, N, N+1,$$

$$y_i \approx y(x_i), \ i = 0, 1, 2, \ldots, N, N+1,$$

$$y_0 = \alpha, \quad y_{N+1} = \beta$$

$$-\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + f\left(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N$$

- Sistema no lineal $N \times N$

$$\left.\begin{array}{c} 2y_1 - y_2 + h^2 f(x_1, y_1, (y_2-\alpha)/2h) - \alpha = 0 \\ -y_1 + 2y_2 - y_3 + h^2 f(x_2, y_2, (y_3 - y_1)/2h) = 0 \\ \vdots \\ -y_{N-2} + 2y_{N-1} - y_N + h^2 f(x_{N-1}, y_{N-1}, (y_N - y_{N-2})/2h) = 0 \\ -y_{N-1} + 2y_N + h^2 f(x_N, y_N, (\beta - y_{N-1})/2h) - \beta = 0 \end{array}\right\}$$

Método de Newton para resolver sistemas no lineales $F(y) = 0$.

- Aproximación inicial $y^{(0)}$
- Fórmula iterativa

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} - [F'(y^{(k)})]^{-1} F(y^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

  ó equivalentemente

  $y^{(k+1)} = y^{(k)} + z,$ donde z es la solución del sistema lineal $F'(y^{(k)})z = -F(y^{(k)})$,

  donde F' es la matriz jacobiana de la función F que describe el sistema.
- Criterio de parada

$$\|y^{(k+1)} - y^{(k)}\| < tol \quad \text{o bien} \quad \|y^{(k+1)} - y^{(k)}\| + \|F(y^{(k+1)})\| < tol$$

En nuestro caso, la matriz jacobiana es la matriz tridiagonal $F'(y)$:

$$\begin{pmatrix} 2+h^2 f_y(x_1,y_1,\frac{y_2-\alpha}{2h}) & -1+\frac{h}{2}f_{y'}(x_1,y_1,\frac{y_2-\alpha}{2h}) & \cdots & 0 \\ -1-\frac{h}{2}f_{y'}(x_2,y_2,\frac{y_3-y_1}{2h}) & 2+h^2 f_y(x_2,y_2,\frac{y_3-y_1}{2h}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1+\frac{h}{2}f_{y'}(x_{N-1},y_{N-1},\frac{y_N-y_{N-2}}{2h}) \\ 0 & 0 & \cdots & 2+h^2 f_y(x_N,y_N,\frac{\beta-y_{N-1}}{2h}) \end{pmatrix}$$

mientras que, en cada iteración debemos resolver el sistema lineal

$$F'(y^{(k)})z = -\begin{pmatrix} 2y_1-y_2+h^2 f(x_1,y_1,(y_2-\alpha)/2h)-\alpha \\ -y_1+2y_2-y_3+h^2 f(x_2,y_2,(y_3-y_1)/2h) \\ \vdots \\ -y_{N-2}+2y_{N-1}-y_N+h^2 f(x_{N-1},y_{N-1},(y_N-y_{N-2})/2h) \\ -y_{N-1}+2y_N+h^2 f(x_N,y_N,(\beta-y_{N-1})/2h)-\beta \end{pmatrix}$$

- ENTRADA funciones f, f_y, $f_{y'}$; extremos a, b; condiciones contorno α, β; número de puntos N; tolerancia tol; número máximo de iteraciones $maxiter$.
- SALIDA aproximaciones y_i de $y(x_i)$ para $i = 1, 2, \ldots, N$; o mensaje de fracaso.
- Paso 1 Aproximación inicial, $h = \dfrac{b-a}{N+1}$; $y_i = \alpha + i\frac{\beta-\alpha}{b-a}h$, $i = 1, 2, \ldots, N$
- Paso 2 Inicializar contador e incremento, $iter = 1$, $incre = tol + 1$;
- Paso 3 Mientras $iter < maxiter$ y $incre > tol$, hacer los pasos siguientes:
  - Paso 4 Tomar $x_1 = a + h$; $z_1 = (y_2 - \alpha)/2h$;
    $a_1 = 2 + h^2 f_y(x_1, y_1, z_1)$;
    $b_1 = -1 + (h/2) f_{y'}(x_1, y_1, z_1)$; $d_1 = -(2y_1 - y_2 + h^2 f(x_1, y_1, z_1) - \alpha)$;
  - Paso 5 Para $i = 2, 3, \ldots, N-1$, tomar $x_i = a + ih$, $z_i = (y_{i+1} - y_{i-1})/2h$.
    $a_i = 2 + h^2 f_y(x_i, y_i, z_i)$; $b_i = -1 + (h/2) f_{y'}(x_i, y_i, z_i)$;
    $c_i = -1 - (h/2) f_{y'}(x_i, y_i, z_i)$;
    $d_i = -(2y_i - y_{i+1} - y_{i-1} + h^2 f(x_i, y_i, z_i))$;
  - Paso 6 Tomar $x_N = b - h$; $z_N = (\beta - y_{N-1})/2h$;
    $a_N = 2 + h^2 f_y(x_N, y_N, z_N)$;
    $c_N = -1 - (h/2) f_{y'}(x_N, y_N, z_N)$;
    $d_N = -(2y_N - y_{N-1} + h^2 f(x_N, y_N, z_N) - \beta)$;
  - Paso 7 $z = Crout(a, b, c, d)$;
  - Paso 8 $y = y + z$;
  - Paso 9 $incre = \|z\|$; $iter = iter + 1$;
- Paso 10 Analizar por qué el programa se ha salido del bucle.

Ejemplo

$$y'' = \frac{1}{8}(32 + 2x^3 - yy'), \quad x \in [1,3], \quad y(1) = 17, y(3) = \frac{43}{3}.$$

x_i	y_i	$y(x_i)$	$\lvert y(x_i) - y_i \rvert$
1.0	17.000000	17.000000	-
1.1	15.754503	15.755455	9.52e-4
1.2	14.771740	14.773333	1.59e-3
1.3	13.995677	13.997692	2.02e-3
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1.9	12.028814	12.031053	2.24e-3
2.0	11.997915	12.000000	2.09e-3
2.1	12.027142	12.029048	1.91e-3
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
2.8	13.553885	13.554286	4.01e-4
2.9	13.927046	13.927241	1.95e-4
3.0	14.333333	14.333333	-

¡Mediante la extrapolación de Richardson, se pueden refinar los resultados hasta obtener un error máximo de 10^{-10}

- Problema 1 Representamos por u el potencial electroestático entre dos esferas metálicas concéntricas de radios R_1 y R_2 ($R_1 < R_2$), tales que el potencial de la esfera interior se mantiene constante a V_1 voltios y el de la esfera exterior a 0 voltios. El potencial en la región entre las dos esferas está gobernado por la ecuación

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{du}{dr} = 0, \quad r \in [R_1, R_2], \quad u(R_1) = V_1, u(R_2) = 0.$$

Supongamos que $R_1 = 2mm$, $R_2 = 4mm$ y $V_1 = 110$ voltios.

(a) Aproxima el valor $u(3)$ utilizando el algoritmo de disparo lineal con $N = 20$ y $N = 40$.

(b) Transforma el problema de frontera en un sistema lineal de tamaño 9×9 y encuentra su solución.

(c) Compara los resultados de (a) y (b) con la solución exacta del problema

$$u(r) = \frac{V_1 R_1}{r}\frac{R_2 - r}{R_2 - R_1}.$$

- Problema 2 Consideremos el problema de contorno

$$y''' = f(x, y, y', y''), \quad x \in [a, b], \quad y(a) = \alpha, y'(a) = \beta, y''(b) = \gamma.$$

  (a) Diseña un método de disparo para resolver este problema aplicando el método de la secante.
  (b) Programa el método diseñado en Matlab.
  (c) Aplica el método construido al problema de contorno

$$x^3y''' - 4x^2y'' + 8xy' - 8y = 4\ln x, \quad x \in [1, 2], \quad y(1) = y'(1) = 0, y''(2) = 1.$$

- Problema 3 Consideremos el problema de contorno

$$y'' - yy' = e^{-x/2}, \quad x \in [1, 2], \quad y'(1) = 1, y'(2) = 1.$$

  (a) Transforma el problema en un sistema de ecuaciones no lineales de tamaño 11×11, teniendo en cuenta que en este problema $y(1)$ e $y(2)$ son incógnitas.
  (b) Resuelve el sistema anterior por el método de Newton.
  (c) Diseña, implementa en Matlab y aplica a este problema un método de disparo que se ajuste a las condiciones de contorno naturales del mismo.

- Problema 4 Consideremos el problema de contorno,

$$y'' = -yy' - 2\sin x - x\cos x + x\cos 2x - \frac{x^2\sin 2x}{2}, x \in [0,2],$$

con las condiciones mixtas $y(0) = 0$ e $y'(2) = \cos 2 - 2\sin 2$.

(a) Aproxima la solución del problema mediante el método de disparo con $N = 40$.

(b) Transforma el problema de contorno en un sistema no lineal de 10 ecuaciones con 10 incógnitas. Resuélvelo mediante el método de Newton.

(c) Compara los resultados obtenidos con el método de disparo y con diferencias finitas con la solución exacta $y(x) = x\cos x$.

(d) Representa el error exacto cometido en los apartados (a) y (b).

- Problema 5 Consideremos el problema de contorno,

$$y'' = \frac{y'}{x} + \frac{x^2}{y'}, \quad x \in [2,4], \quad y(2) = 0, y'(4) = 8\sqrt{2}.$$

  (a) Comprueba que la función $y = \frac{2}{5}x^2\sqrt{2x} - \frac{16}{5}$ es solución del problema de contorno.
  (b) Aplica el método de disparo, utilizando $N = 40$ y el método de Newton, para aproximar la solución del problema de contorno.
  (c) Representa el error exacto que cometemos en el apartado (b).

- Problema 6 Aproxima, mediante el método de disparo con secante y $N = 40$, la solución del problema de contorno

$$\left.\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= y - z \\ \frac{dy}{dt} &= x + y \\ \frac{dz}{dt} &= x + z \end{aligned}\right\}, \qquad t \in [0,1], \qquad x(0) = 1, y(0) = 2, z(1) = -2 + 4e$$

Referencias

- R. Burden, J. Faires, *Análisis Numérico*, Ed. Thompson, 2002.
- A. Cordero, J.L. Hueso, E. Martínez, J.R. Torregrosa, *Problemas resueltos de métodos numéricos*, Ed. Thompson, 2006.
- J. Mathews, K. Fink, *Métodos Numéricos con Matlab*, Ed. Prentice-Hall, 1999.