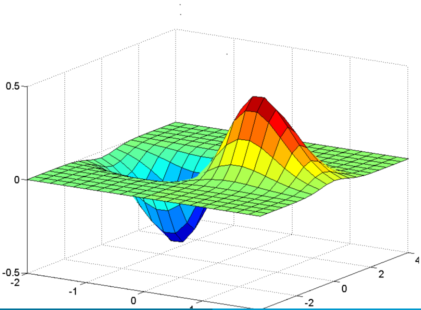
Tema 2: Introducción al Cálculo Numérico: Preliminares

Métodos Numéricos Avanzados en Ingeniería

Máster en Ingeniería Matemática y Computación

Alicia Cordero, Neus Garrido, Juan R. Torregrosa

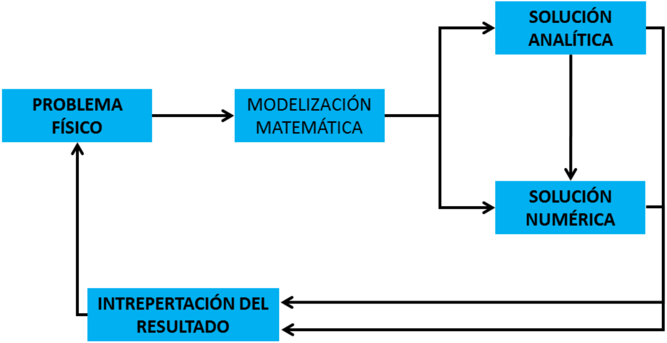
LA UNIVERSIDAD
EN INTERNET



1. ¿Dónde interviene el Cálculo Numérico?
2. ¿Qué problemas vamos a resolver?
3. Tipos de errores

Todo problema matemático admite sólo dos posibilidades:

- Tiene solución analítica, es decir, solución exacta,
- No tiene solución analítica, o no sabemos encontrarla, por lo que debemos recurrir a una solución numérica, es decir, solución aproximada



- Longitud de arco

$$L = \int_0^1 \sqrt{1+\cos^2 x}dx$$

- Función de Bessel

$$J_n(x) = \frac{1}{x}\int_0^{\pi} \cos\left(x\sin\theta - n\theta\right)d\theta$$

- Función error

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt$$

- Función de distribución normal en un proceso de fabricación

$$\phi(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^x e^{-t^2/2}dt$$

¿Qué podemos hacer si nuestra función no tiene una exprtesión explícita? Conocemos la función en algunos puntos

La fuerza total ejercida por el mástil de un velero

$$F = \int_0^{30} f(z)dz$$

z es la distancia vertical a la cubierta.

Se utiliza un modelo a escala en un túnel de viento para medir la fuerza ejercida por el mástil en diferentes puntos del mismo. En la siguiente tabla se observan dichas mediciones en función de la distancia respecto a la cubierta:

z	0	3	6	9	12	15	18	21	24	27	30
f(z)	190	141	104	77.5	57.4	42.5	31.5	23.3	17.3	12.8	9.5

El cálculo de la fuerza total, es decir, de una integral definida cuyo integrando no posee una expresión analítica, es imprescindible para un correcto diseño del mástil.

Son problemas descritos por una ecuación diferencial de cualquier orden, o un sistema de ecuaciones diferenciales, con condiciones en el instante inicial.

Permiten modelizar la intensidad que atraviesa un circuito eléctrico, la variación en el tiempo de poblaciones de individuos en un ecosistema, la velocidad de desintegración del radio, el movimiento de los satélites artificiales, ... y una gran cantidad de problemas físicos, donde tenemos una o varias funciones incógnitas que dependen, en general, de la variable independiente tiempo.

Ejemplo 1

$$y'' + y'^2 + 2t\sin(y) + 7y = \cos t - e^{-t}, \quad t \in [0,5], \quad y(0) = 1, y'(0) = -2$$

Ejemplo 2

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y_1' & = & y_1^2 - y_2^3 - \cos t - e^{-t}, \\ y_2' & = & 3y_1 - \ln y_2 + 1 \end{array} \right. \qquad t \in [0,1], \quad y_1(0) = 2, y_2(0) = 3$$

Son problemas descritos por una ecuación diferencial de cualquier orden con condiciones en los extremos del intervalo, donde estudiamos el problema.

Permiten modelizar numerosos problemas físicos como la distribución de potencial eléctrico entre dos cuerpos, la deflección de un sólido sobre el que actuan diferentes fuerzas, la distribución de calor en una barra metálica, etc. Solemos tener una función incógnita que depende de una variable independiente.

Ejemplo 3

$$y'' + xyy' - xy^2 = x\sin x, \quad x \in [-1,1], \quad y(-1) = 0, y(1) = 2$$

Ejemplo 4

$$2yy'' = y'^2 - 4y^2, \quad x \in [\pi/4, \pi/2], \quad y'(\pi/4) = 1, y'(\pi/2) = 0$$

Ecuaciones integrales

Ecuaciones en las que la función incógnita está dentro de una integral. Debemos discretizar la ecuación integral, utilizando fórmulas de cuadratura (Simpson, Romberg, Gauss, ...), para convertir dicha ecuación en un sistema lineal o no lineal.

- Transferencia de energía por radiación
- Viscoelasticidad
- Campos electromagnéticos
- Vibraciones

- Ecuación de Hammerstein

$$y(s) = u(s) + \int_a^b G(s,t)h(y(t))dt, \quad s \in [a,b]$$

- Ecuación de Fredholm

$$f(x) = \int_a^b K(x,t)\varphi(t)dt, \quad t \in [a,b]$$

- Ecuación de Volterra

$$f(x) = \int_a^x K(x,t)\varphi(t)dt, \quad t \in [a,b]$$

Problemas de contorno multidimensional

En este contexto nos vamos a encontrar con problemas tan importantes como los de convección-difusión, problemas que modelizan diferentes tipos de ondas, acústicas, electromagnéticas, etc. y las ecuaciones de Laplace y de Poisson.

Estos problemas vienen descritos por una ecuación en derivadas parciales y condiciones de contorno e iniciales. Suele haber una función incógnita u que depende, como máximo de las tres variables espaciales x, y y z y de la variable temporal t.

Ejemplo 5. Distribución de temperatura en una varilla de longitud L

$$u_t = \alpha^2 u_{xx}, \quad 0 \leq x \leq L, t \geq 0,$$

Condiciones de contorno $u(0,t) = u(L,t) = 0$, $t > 0$,
Condición inicial $u(x,0) = f(x)$, $x \in [0,L]$.

Ejemplo 6.Problema de difusión en un cuerpo plano

$$u_t(x,y,t) = \alpha^2 u_{xx}(x,y,t) + \beta^2 u_{yy}(x,y,t), \quad (x,y) \in R = [a,b] \times [c,d],\ t \geq 0$$

$$u(x,y,0) = f(x,y),$$
$$u(a,y,t) = h_1(y,t),\ u(b,y,t) = h_2(y,t),\ u(x,c,t)) = h_3(x,t),\ u(x,d,t)) = h_4(x,t).$$

Ejemplo particularmente interesante de problema parabólico.

Ecuación de Burgers

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\,\frac{\partial u}{\partial x} = c\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad a < x < b, \quad t > 0$$

$$u(x,0) = f(x), \;\; a < x < b,$$

$$u(a,t) = g_1(t), \quad u(b,t) = g_2(t), \quad t > 0$$

- Dinámica de fluidos
- Flujo de tráfico
- Dinámica de gases (turbulencias)

Problemas de contorno multidimensional

Las ondas de un equipo de música, las ondas sísmicas, las ondas que provoca una piedra en el agua, las ondas de la luz, las ondas de aparatos electrónicos y otros muchos ejemplos se pueden modelizar mediante las llamadas ecuaciones hiperbólicas.

Ejemplo 7

$$u_{tt}(x,t) = \alpha^2 u_{xx}(x,t), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0,$$

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, t > 0; \quad u(x,0) = f(x), u_t(x,0) = g(x), x \in [0,L]$$

donde α es un número real en el que intervienen constantes físicas, $f(x)$ y $g(x)$ son funciones reales.

Ejemplo 8

Consideremos la siguiente ecuación en derivadas parciales, conocida como la ecuación del telégrafo

$$u_{tt} + u_t + 2u = u_{xx}, \qquad 0 < x < 1, \ t > 0$$

con las condiciones de contorno $u(0,t) = u(1,t) = 0$ y las condiciones iniciales $u(x,0) = \text{sen}(\pi x)$ y $u_t(x,0) = 0$.

A diferencia de los ejemplos anteriores, el siguiente sería un problema hiperbólico bidimensional

Ejemplo 9

$$u_{tt}(x,t) = \alpha^2 u_{xx}(x,y,t) + \beta^2 u_{yy}(x,y,t), \quad (x,y) \in R = [a,b] \times [c,d],\ t \geq 0$$

condiciones de contorno

$u(a,y,t) = h_1(y,t), \quad t \geq 0,$
$u(b,y,t) = h_2(y,t), \quad t \geq 0,$
$u(x,c,t)) = h_3(x,t), \quad t \geq 0,$
$u(x,d,t)) = h_4(x,t), \quad t \geq 0,$

condiciones iniciales

$u(x,y,0) = f(x,y), (x,y) \in R = [a,b] \times [c,d],$
$u_t(x,y,0) = g(x,y), (x,y) \in R = [a,b] \times [c,d].$

Problemas de contorno multidimensional

Otro grupo dentro de este tipo de problemas son los descritos por ecuaciones elípticas. Estas ecuaciones surgen de manera natural en el estudio de problemas físicos independientes del tiempo, como la distribución de calor en una región plana, la energía potencial de un punto en el plano bajo la acción de fuerzas gravitacionales y problemas estacionarios acerca de fluidos incompresibles.

Ejemplo 10

$$\nabla^2 u(x,y) \equiv u_{xx}(x,y) + u_{yy}(x,y) = f(x,y), \quad (x,y) \in R,$$

$$u(x,y) = g(x,y) \text{ para } (x,y) \in S$$

donde $R = \{(x,y) : a < x < b,\ c < y < d\}$ y S es la frontera de R

Ejemplo 11. Ecuación de Helmholtz

$$u_{xx} + u_{yy} = -4u, \quad 0 < x < 1,\ 0 < y < 1$$

con las condiciones de contorno

$$\begin{array}{lll} u(x,0) = \cos(2x), & u(x,1) = \cos(2x) + \text{sen}2, & x \in [0,1] \\ u(0,y) = \text{sen}(2y) + 1, & u(1,y) = \text{sen}(2y) + \cos 2, & y \in [0,1] \end{array}$$

Todo sistema lineal de n ecuaciones con n incógnitas se escribe de la forma

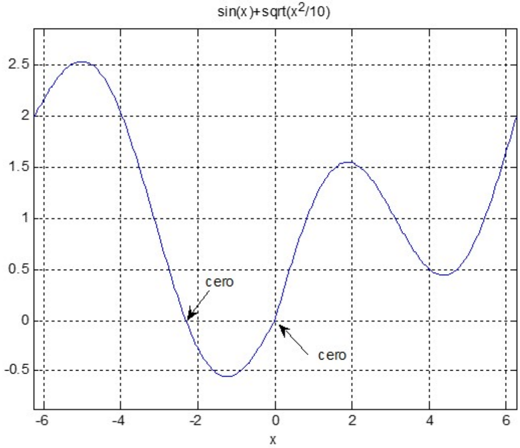
$$Ax = b,$$

donde A es la matriz de coeficientes de tamaño $n \times n$ y b es el vector de términos independientes de tamaño $n \times 1$.

- Métodos directos Sólo útiles cuando n es pequeña.
  - Si A es invertible, $x = A^{-1}b$
  - Método de Cramer
  - Método de eliminación de Gauss: pivotación parcial, factorización LU, ...
- Métodos iterativos $x = Hx + d$, H matriz $n \times n$, $d \in \mathbb{R}^n$. Son interesantes cuando n es grande.
  - Métodos iterativos estacionarios: Jacobi, Gauss-Seidel, ...
  - Métodos de direcciones alternadas
  - Métodos de gradiente conjugado
- Precondicionadores Debemos usarlos cuando la matriz A está mal condicionada. cond(A) ó rcond(A) comandos de Matlab que miden el mal condicionamiento de A.

Encontrar las soluciones de la ecuacií $f(x) = 0$, donde $f : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es una función no lineal. También se llaman ceros de la función f.
Soluciones de la ecuación

$$\sin x + \sqrt{x^2/10} = 0.$$



Ejemplo 12. Corriente eléctrica

El flujo de corriente eléctrica, en función del tiempo, en un circuito consistente en una resistencia R, una inductancia L y una capacitancia C viene dado por la expresión

$$i(t) = e^{-Rt/2L} \cos\left(\sqrt{4L/C - R^2 t/(2L)}\right).$$

Determinar los primeros instantes de tiempo en los que la intensidad es nula.
Calcular el primer instante de tiempo en el que la intensidad es máxima.

Ejemplo 13. Ecuación de Colebrook-White

La ecuación de Colebrook-White es una de las formas de calcular el factor de fricción f_f de una tubería más precisas y de más amplio uso, pero es una función implícita que debe resolverse mediante técnicas iterativas

$$\frac{1}{\sqrt{f_f}} = -2.0 log_1 0 \left(\frac{\varepsilon_r}{3.7065} + \frac{2.5226}{Re\sqrt{f_f}} \right).$$

Consideremos el caso particular en que $Re = 4 \times 10^3$ y $\varepsilon_r = 10^{-4}$.

Queremos encontrar una solución $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ del sistema de ecuaciones no lineales

$$\left\{ \begin{array}{c} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \end{array} \right. \qquad F(x) = 0, \quad F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$$

siendo las f_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, las funciones coordenadas de F.

Ejemplo 14

$$\left\{ \begin{array}{lcl} 3x - \cos(yz) - 1/2 & = & 0 \\ x^2 - 625y^2 & = & 0 \\ e^{-xy} + 20z + (10\pi - 3)/3 & = & 0 \end{array} \right.$$

Error de redondeo

- Se originan por no disponer de precisión infinita para la representación de magnitudes
- Matlab trabaja, por defecto, con 32 dígitos de precisión en doble precisión. Podemos aumentar esa precisión utilizando los comandos digits y vpa.
  - pi32=vpa(pi);
  - digits(50);
  - pi50=vpa(pi);
  - dpi=abs(pi50-pi32);
  - vpa(dpi,4)=3.21e-40;
- Los errores de redondeo se van acumulando en las operaciones. Cuantas mas operaciones mayor error de redondeo.
- El error de redondeo puede hacer "inutil" el resultado proporcionado por el ordenador

Los desarrollos de Taylor permiten aproximar cualquier función $f \in \mathcal{C}^n[a,b]$ por un polinomio $P_n(x)$, dado un punto $x_0 \in [a,b]$

$$f(x) = P_n(x) + Error_n(x),$$

donde

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n,$$

$$Error_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)(x - x_0)^{n+1}, \quad \xi \text{ entre } x \text{ y } x_0.$$

El error de truncamiento generalmente se refiere al error involucrado al usar sumas finitas para aproximar una suma infinita, es decir, una serie.

Error de truncamiento

La función $f(x) = e^x$ está definida en cualquier $x \in \mathbb{R}$, mediante

$$e^x = 1 + x + x^2/2 + x^3/6 + x^4/24 + \ldots = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!} x^k$$

Si decimos que

$$e^3 = \sum_{k=0}^{30} \frac{1}{k!} 3^k$$

estamos cometiendo un error de truncamiento que coincide con la suma de los infinitos términos que hemos eliminado.

Utilizando el desarrollo de Taylor de la función $f(x)$ en el punto x_0 con un polinomio de grado 1, $P_1(x)$, resulta

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0),$$

y tomando $x = x_1$ resulta

$$f(x_1) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0),$$

de donde

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}.$$

Estamos cometiendo un error de truncamiento de orden 1, por lo que decimos que la aproximación de la derivada es de orden 1.

Otros errores

Si sol representa la solución exacta de un determinado problema y $aprox$ la solución aproximada, llamamos error real o error absoluto a

$$E = |sol - aprox|,$$

y error relativo a

$$E_r = \frac{|sol - aprox|}{|sol|}.$$

Decimos que el número $aprox$ aproxima a sol con t dígitos significativos si t es el número natural más grande tal que

$$E_r = \frac{|sol - aprox|}{|sol|} < 5 \cdot 10^{-t}.$$