

Resolución numérica de ecuaciones
diferenciales. Historia y algunos problemas
actuales

Ricardo G. Durán

Departamento de Matemática
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

CNEA

3 de Octubre de 2008

<http://mate.dm.uba.ar/~rduran/>

RESUMEN

- Un poco de historia.
- Cálculo variacional. El problema de la braquistocrona.
- Métodos de elementos finitos y diferencias finitas.
- Conexión entre ambos métodos.

- Problemas actuales.
- Estimaciones a priori y a posteriori.
- Algunos ejemplos numéricos.

RESOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES

Las soluciones llamadas “exactas” (o sea, dadas por expresiones explícitas) pueden obtenerse solamente en casos muy particulares.

IDEA BÁSICA DE LOS MÉTODOS NUMÉRICOS:

APROXIMAR POR POLINOMIOS O FUNCIONES POLINOMIALES A TROZOS

POR EJEMPLO: POLIGONALES

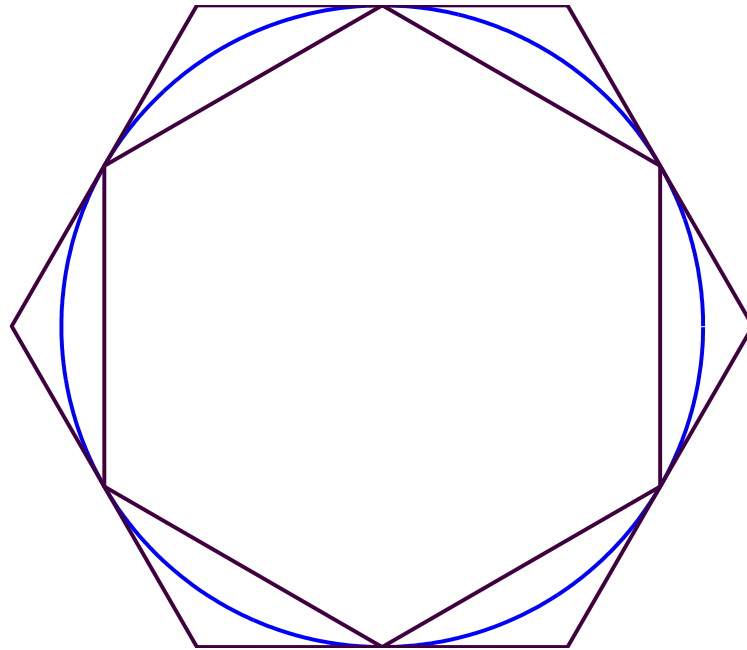
LA IDEA ES MUY ANTIGUA!!

POR EJEMPLO:

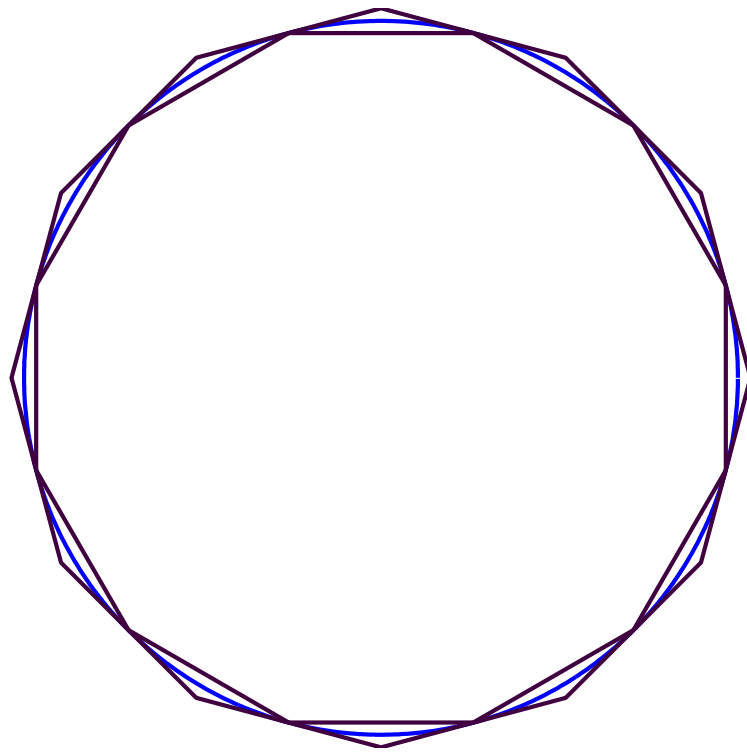
Arquimedes la utilizó para calcular π



6 LADOS



12 LADOS



MÉTODOS NUMÉRICOS PARA ECUACIONES DIFERENCIALES

1. ELEMENTOS FINITOS:

Se basa en la formulación variacional o débil de las ecuaciones diferenciales.

2. DIFERENCIAS FINITAS:

Se basa en reemplazar derivadas por cocientes incrementales.

Gottfried Wilhelm von LEIBNIZ (1646-1716)

ES BIEN SABIDO QUE DESARROLLÓ EL CÁLCULO AL MISMO TIEMPO QUE NEWTON.

PERO ES MENOS CONOCIDO LO SIGUIENTE:

Extracto del abstract de

Trzesicki K., "LEIBNIZ'S IDEAS IN INFORMATICS": Filozofia Nauki (Philosophy of Science) vol: 14, number: 3(55), 21-48 , 2006.

LEIBNIZ MAY BE CONSIDERED AS THE FIRST COMPUTER SCIENTIST. HE MADE MAJOR CONTRIBUTIONS TO ENGINEERING AND INFORMATION SCIENCE. HE INVENTED THE BINARY SYSTEM, FUNDAMENTAL FOR VIRTUALLY ALL MODERN COMPUTER ARCHITECTURES. HE BUILT A DECIMAL BASED MACHINE THAT EXECUTED ALL FOUR ARITHMETICAL OPERATIONS AND OUTLINED A BINARY COMPUTER.

CÁLCULO VARIACIONAL

EL PROBLEMA DE LA BRAQUISTOCRONA

Dados dos puntos A y B a distinta altura el problema consiste en encontrar la curva que minimiza el tiempo de caída de una partícula al desplazarse de A a B bajo la acción de la gravedad. Esta curva se conoce con el nombre de braquistocrona (del griego: braquistos (el más corto), cronos (tiempo))

Este problema fue planteado por Galileo (1564-1642) en 1638, quien dió una solución errónea creyendo que estas curvas eran arcos de circunferencia.

En 1696 fue resuelto por Johann Bernoulli (1667-1748) quien antes de presentar su solución desafió a sus colegas a resolverlo.

Varios de los más célebres matemáticos del siglo XVII:

Jacob BERNOULLI (1654-1705)

NEWTON (1642-1727)

LEIBNIZ (1646-1716)

L'HOSPITAL (1661-1704)

resolvieron el problema de distintas formas.

Las ideas y métodos introducidos dieron comienzo a lo que hoy conocemos como “Cálculo de Variaciones” .

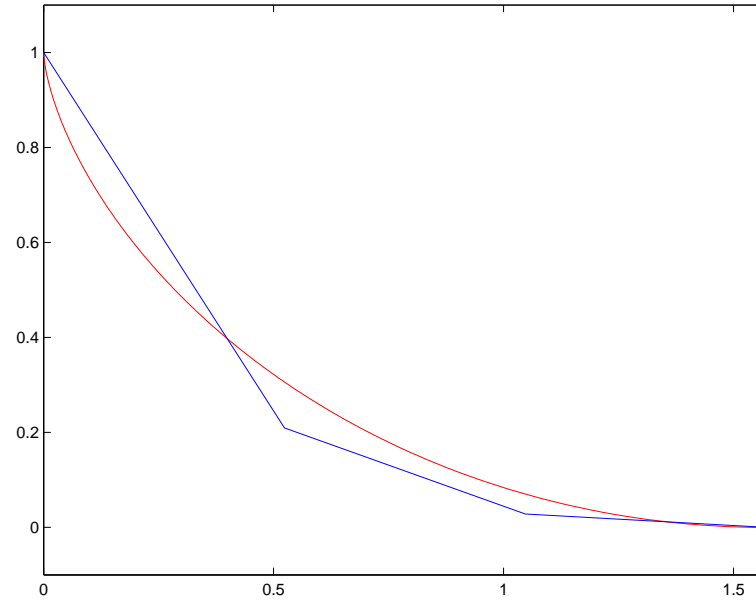
IDEA DE LEIBNIZ

En una carta a Johann Bernoulli, Leibniz muestra que la $y = y(x)$ buscada debe ser solución de una ecuación diferencial (lo que hoy conocemos como ecuación de Euler asociada al funcional)

La idea que usa Leibniz para encontrar esta ecuación diferencial es análoga a la que hoy se utiliza en el método de Elementos Finitos:

REEMPLAZAR LA FUNCIÓN BUSCADA POR UNA POLIGONAL !!

DE ESTA MANERA EL PROBLEMA DE MINIMIZACIÓN INICIAL SE TRANSFORMA EN UN PROBLEMA DE MINIMIZACIÓN EN DIMENSIÓN FINITA EL CUAL PUEDE RESOLVERSE COMPUTACIONALMENTE!



Leibniz consideró los casos de uno y de dos nodos internos y encontró la posición de estos nodos para que el tiempo de caída fuera mínimo (esto es lo que hoy llamamos “aproximación numérica”).

Luego hizo decrecer formalmente la longitud de los intervalos (o sea, aumentó la cantidad de nodos) y obtuvo la ecuación diferencial.

Observemos que la idea es la de los métodos numéricos pero con otro objetivo (encontrar la ecuación diferencial).

En general, a lo largo de la historia, los matemáticos han usado métodos de aproximación (lo que hoy llamamos “métodos numéricos”) para distintos objetivos: por ejemplo, para demostrar existencia de solución. Un caso típico es la demostración de existencia de solución de ecuaciones ordinarias mediante el Método de Euler.

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

HALLAR

$$y : [0, L] \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad y(0) = 1 \quad , \quad y(L) = 0$$

que minimice

$$T = T(y) = \int_0^L \sqrt{\frac{1 + y'(x)^2}{2g(1 - y(x))}} dx$$

Dado N se introducen una partición

$$x_j = \frac{jL}{N}, j = 0, \dots, N$$

y el espacio de poligonales asociado,

$$\mathcal{S}_N = \left\{ y \in C^0([0, L]) : y|_{[x_j, x_{j+1}]} \in \mathcal{P}_1([x_j, x_{j+1}]) \forall j \right\}.$$

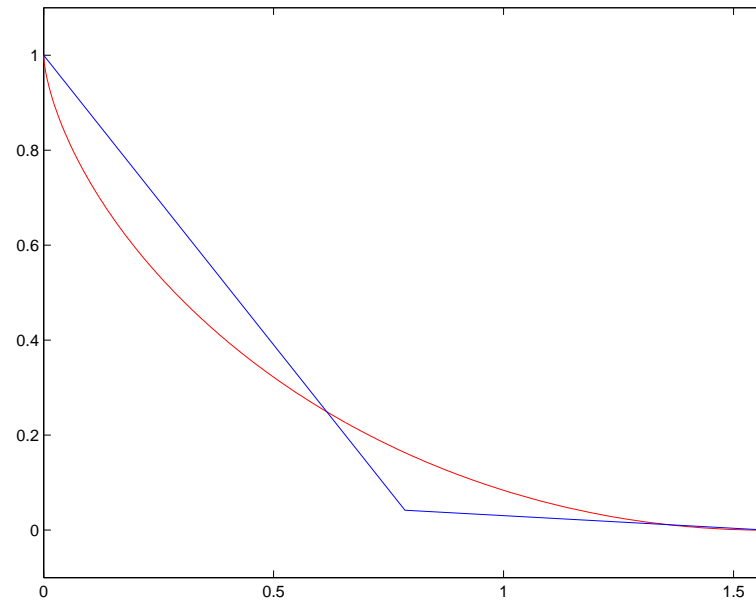
y se busca $y_N \in \mathcal{S}_N$ tal que

$$T(y_N) = \min_{y \in \mathcal{S}_N} T(y) = \min_{y \in \mathcal{S}_N} \int_0^L \sqrt{\frac{1 + y'(x)^2}{2g(1 - y(x))}} dx$$

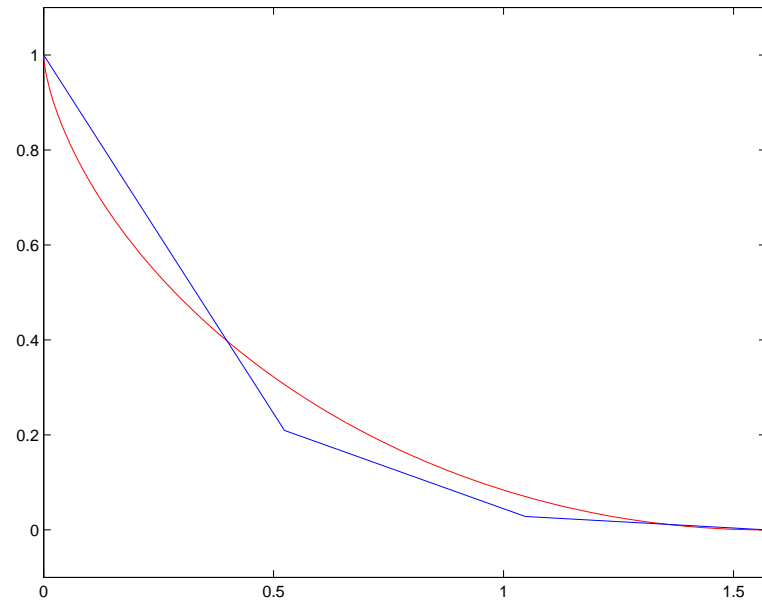
RESULTADOS NUMÉRICOS

$N =$ Número de nodos interiores

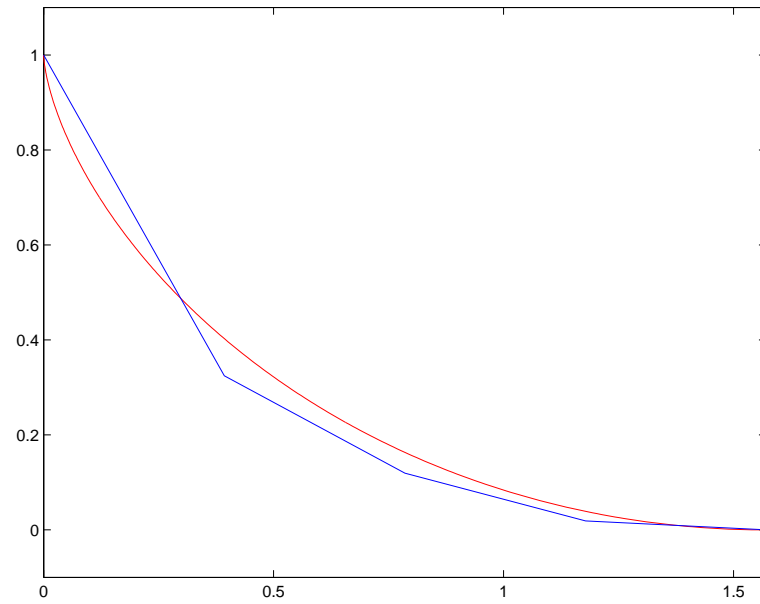
$$N = 1$$



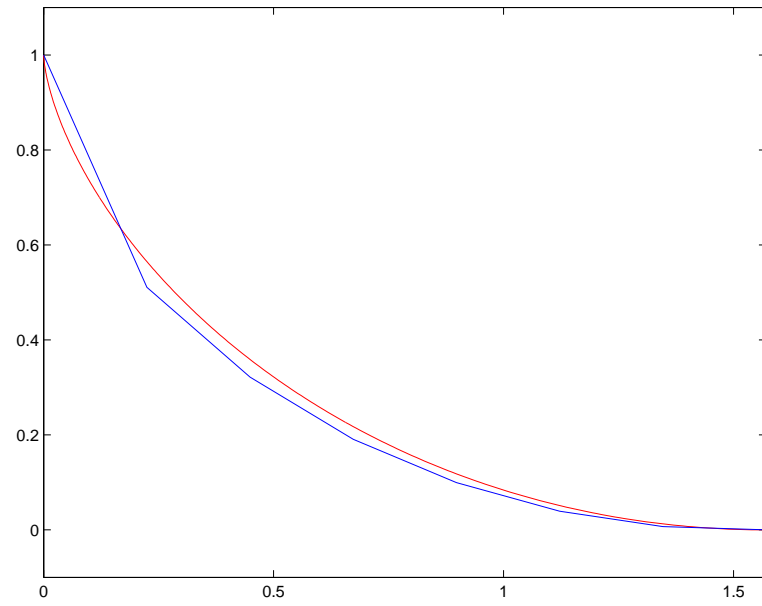
$$N = 2$$



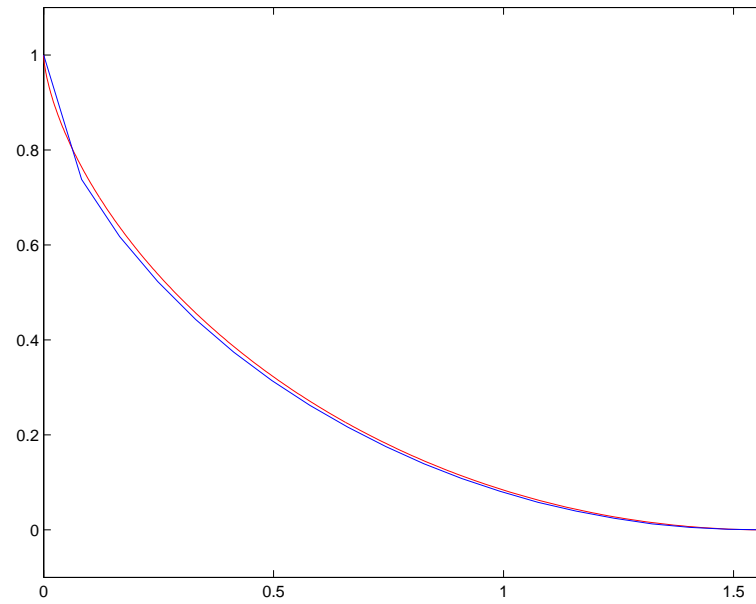
$N = 3$



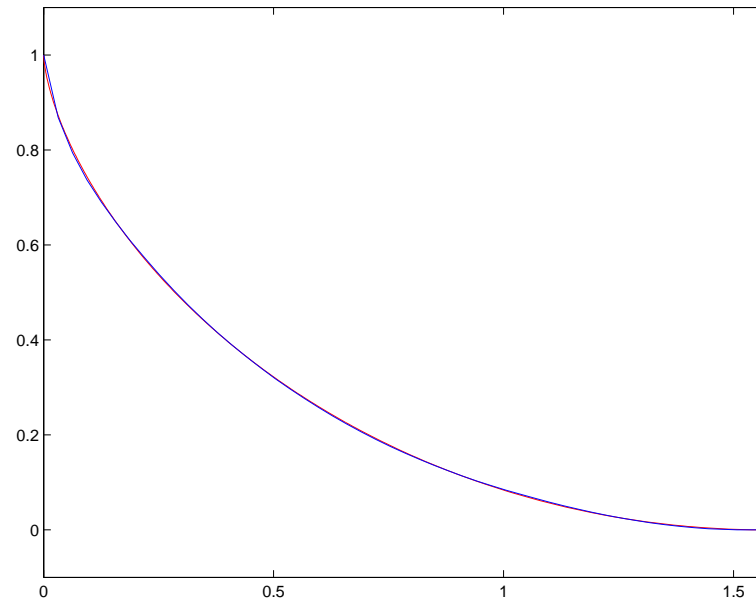
$$N = 6$$



$$N = 18$$



$$N = 49$$



ECUACIONES EN DERIVADAS PARCIALES

SE USAN LAS MISMAS IDEAS!

PROBLEMA DE DIRICHLET

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 0 && \text{en } \Omega \\ u &= f && \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

EQUIVALE A

$$\min_{u|_{\partial\Omega}=f} \int_{\Omega} |\nabla u|^2$$

Los métodos variacionales para resolver este problema y otros más generales (o para demostrar la existencia de solución) tienen una larga historia en el siglo XIX y principios del XX.

Por ejemplo Riemann trató de demostrar la existencia de solución de esta manera pero su prueba era errónea (Weierstrass encontró la falla). Esta demostración fue arreglada mucho después por Hilbert en 1901.

Faltaba la noción de Integral de Lebesgue y de “Compleitud” (algo así como si tratáramos de demostrar la existencia de $\sqrt{2}$ usando sólo los números racionales).

Las formulaciones variacional y débil pueden utilizarse para obtener soluciones aproximadas.

IDEA: Reemplazar el conjunto de “Todas las funciones” (intratable desde el punto de vista práctico: es un espacio de dimensión infinita) por un conjunto de funciones particulares (de dimensión finita).

EJEMPLOS DE FUNCIONES APROXIMANTES:

Polinomios, polinomios a trozos (generalización de las poligonales que usaba Leibniz!), trigonométricas, o variantes que tengan que ver con el problema considerado.

Los trabajos más conocidos que comienzan a usar estos métodos para aproximar soluciones son los de

[Rayleigh \(1842 - 1919\)](#): Usa la forma variacional para problemas de autovalores en 1894.

[Ritz \(1878-1909\)](#): Usa la forma variacional en 1909.

[Galerkin \(1871-1945\)](#): Usa la forma débil en 1915.

Por esto, este tipo de aproximaciones se conocen como “de Ritz-Galerkin” .

Pero no usan las funciones polinomiales a trozos (las cuales tienen muchas ventajas desde el punto de vista práctico).

Por ejemplo para el problema de Dirichlet:

\mathcal{S}_N sucesión de espacios aproximantes

APROXIMACIONES DE RITZ: $u_N \in \mathcal{S}_N$ solución de

$$\min_{v \in \mathcal{S}_N} \int_{\Omega} |\nabla v|^2$$

APROXIMACIONES DE GALERKIN: $u_N \in \mathcal{S}_N$ solución de

$$\int_{\Omega} \nabla u_N \cdot \nabla v \, dx = 0 \quad \forall v \in \mathcal{S}_N$$

El segundo método es más general: puede aplicarse a ecuaciones que no provengan de una minimización.

EL MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS SE BASA EN ESTA IDEA Y UTILIZA FUNCIONES POLINOMIALES A TROZOS

MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

IDEA: REEMPLAZAR DERIVADAS POR COCIENTES INCREMENTALES

$$u'(x) \sim \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

$$u''(x) \sim \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}$$

ETC.....

TRABAJO FUNDAMENTAL:

COURANT-FRIEDRICHS-LEWY (1928)

Analizan la aproximación al problema de Dirichlet:

$$\begin{aligned} -\Delta u &= 0 && \text{en } \Omega \\ u &= f && \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

y también a problemas de evolución (ecuaciones del calor y de las ondas).

El análisis de métodos de diferencias finitas para problemas de evolución se basa en

CONSISTENCIA: La solución exacta satisface el esquema numérico salvo términos que tienden a cero cuando los incrementos Δx y Δt tienden a cero.

ESTABILIDAD: Los valores en un tiempo T están controlados por los iniciales.

TEOREMA DE EQUIVALENCIA DE LAX:

Si un método para un problema lineal bien planteado es **consistente**, entonces

ESTABILIDAD \Leftrightarrow **CONVERGENCIA**

CONEXIÓN ENTRE AMBOS MÉTODOS

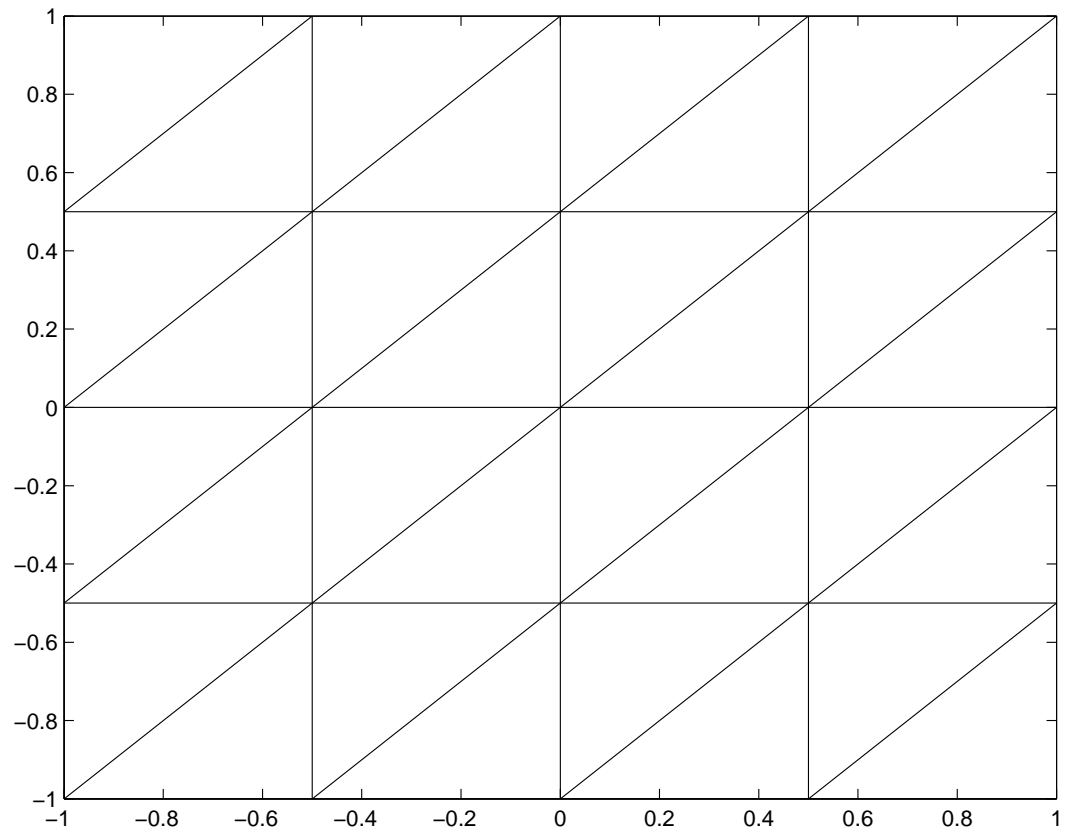
En su famoso paper de 1943,

“Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations”

Courant analiza el método variacional para el problema de Poisson

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f && \text{en } \Omega \\ u &= 0 && \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

y observa que utilizando las funciones lineales a trozos en una malla uniforme de triángulos



se obtiene el esquema de diferencias finitas de cinco puntos usual

$$\frac{-U_{j-1,k} + 2U_{j,k} - U_{j+1,k}}{h^2} + \frac{-U_{j,k-1} + 2U_{j,k} - U_{j,k+1}}{h^2} = f(x_j, y_k)$$

Salvo que el valor de f se aproxima por un promedio.

Courant hace un comentario de que esto sugiere una generalización que le parece ser interesante y tener muchas aplicaciones posibles:

USAR LAS FUNCIONES LINEALES A TROZOS PERO EN TRIANGULACIONES MAS GENERALES

If the variational problems contain derivatives not higher than the first order the method of finite difference can be subordinated to the Rayleigh-Ritz method by considering in the competition only functions ϕ which are linear in the meshes of a sub-division of our net into triangles formed by diagonals of the squares of the net. For such polyhedral functions the integrals become sums expressed by the finite number of values of ϕ in the net-points and the minimum conditions become our difference equations. Such an interpretation suggests a *wide generalization* which provides great flexibility and seems to have considerable practical value. Instead of starting with a quadratic or rectangular net we may consider from the outset any polyhedral surfaces with edges over an *arbitrarily chosen* (preferably triangular) *net*. Our integrals again become finite sums, and the minimum condition will be equations for the values of ϕ in the net-points. While these equations seem less simple than the original difference equations, we gain the enormous advantage of better adaptability to the data of the problem and thus we can often obtain good results with very little numerical calculation. (See appendix.)

Esto es exactamente el caso mas simple de lo que hoy se conoce como Método de Elementos Finitos.

Por esto, muchos consideran a Courant como el que introdujo el método.

Sin embargo, hay trabajos anteriores que utilizan el método:

En un artículo sobre historia del Método de Elementos Finitos, Babuska cita una referencia mucho más vieja donde se utilizan las funciones polinomiales a trozos: [Schellbach \(1851\)](#).

Posteriormente, especialmente a partir de ~ 1960 comenzó el desarrollo sistemático del método y su aplicación a distintos problemas de Ingeniería.

El desarrollo principal en los comienzos fue especialmente en Cálculo de Estructuras. Más adelante (en los 80) se extendió su aplicación a otros campos (por ejemplo Fluidos).

Paralelamente a las aplicaciones se desarrolló la teoría matemática.

OBJETIVOS: Demostrar la convergencia, estimar el error, decidir cuál método es más adecuado para un problema dado (tipo de funciones aproximantes, forma de los elementos, mallas, etc.)

ALGUNOS PROBLEMAS ACTUALES

- Aplicación y Análisis para problemas cada vez más complicados (especialmente problemas no lineales).
- Convergencia de los métodos adaptativos.
- Problemas que involucran parámetros de distinto orden (por ejemplo [ecuaciones de convección-difusión](#)).
- Problemas con restricciones (aparece el fenómeno llamado “bloqueo”). Por ejemplo, en fluidos y en cálculo de estructuras delgadas (placas y cáscaras).

OTROS PROBLEMAS

1. GENERACIÓN DE MALLAS

2. RESOLUCIÓN DE LOS PROBLEMAS DISCRETOS

ESTIMACIONES DE ERROR

Se dividen en dos clases

- ESTIMACIONES A PRIORI
- ESTIMACIONES A POSTERIORI

ESTIMACIONES A PRIORI

Estas son las primeras que se desarrollaron.

OBJETIVOS:

- Demostrar convergencia y saber el orden del error.
- Conocer la dependencia del error respecto de diferentes cosas (geometría de los elementos, regularidad de la solución, grado de la aproximación).

ESTIMACIONES A POSTERIORI

Se empezaron a desarrollar a partir de fines de los 70. Se llaman así porque se calculan a partir de la solución aproximante calculada.

OBJETIVOS:

- Obtener información cuantitativa.
- Generación automática de mallas adaptadas.

¿COMO SE UTILIZA EL MÉTODO ACTUALMENTE?

RESOLVER CON UNA MALLA INICIAL



ESTIMAR EL ERROR EN CADA ELEMENTO



REFINAR LOS ELEMENTOS DONDE EL ESTIMADOR ES
MÁS GRANDE



RESOLVER NUEVAMENTE



ITERAR HASTA UNA TOLERANCIA DADA

¿CÓMO SON LOS ESTIMADORES A POSTERIORI?

Consideremos el problema modelo

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f && \text{en } \Omega \\ u &= 0 && \text{en } \partial\Omega \end{aligned}$$

Si U es la solución aproximada calculada con una malla $\mathcal{T} = \cup T$ (por ejemplo lineal a trozos) y

$$e = u - U$$

es el error, se puede demostrar

$$\int_{\Omega} |\nabla e|^2 \sim \sum_T \eta_T^2$$

$$\eta_T = \eta_T(\text{datos}, U)$$

Por ejemplo, un estimador local típico está dado por:

$$\eta_T^2 = \left(|T| \int_T |f|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\ell \subset \partial T} |\ell|^2 |J_\ell|^2 \right)$$

siendo J_ℓ el salto de la derivada normal:

$$J_\ell = \frac{\partial U}{\partial n_1} \Big|_{T_1} + \frac{\partial U}{\partial n_2} \Big|_{T_2}$$

$$\ell = T_1 \cap T_2$$

Otra idea:

Promediar los gradientes obtenidos ∇U y construir una aproximación continua $P(\nabla U)$ de ∇u .

$$\eta_T^2 = \int_T |\nabla U - P(\nabla U)|^2$$

IDEA:

$P(\nabla U)$ se parece más al gradiente de la solución exacta u

CRITERIO USUAL PARA REFINAR:

Fijar γ , $0 < \gamma < 1$

Calcular $\eta_{max} = \max_T \eta_T$

Refinar T si $\eta_T > \gamma \eta_{max}$

O variantes.

PARA CONCLUIR LA CHARLA VAMOS A VER TRES EJEMPLOS DE APLICACIÓN DE MALLAS GRADUADAS.

PROBLEMAS:

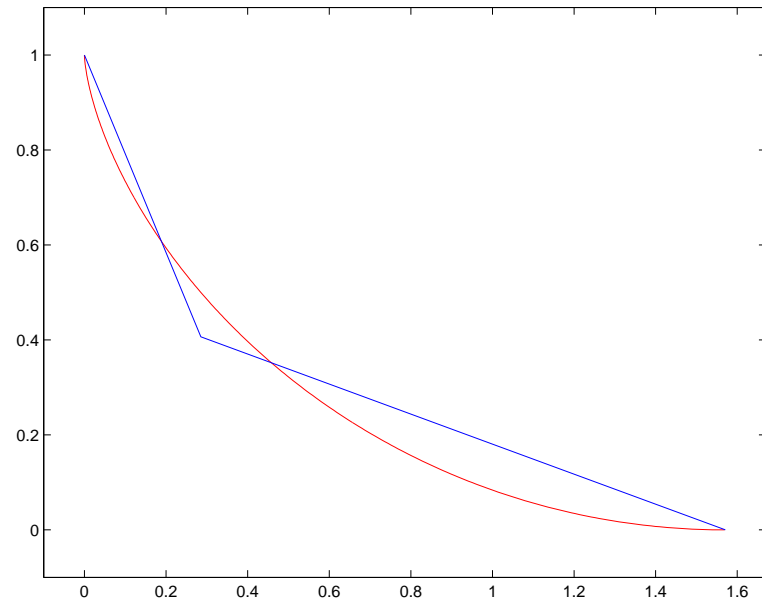
1. Braquistocrona
2. Convección-difusión
3. Autovalores (modos propios de vibración)

MALLAS GRADUADAS PARA EL PROBLEMA DE LA BRAQUIS- TOCRONA

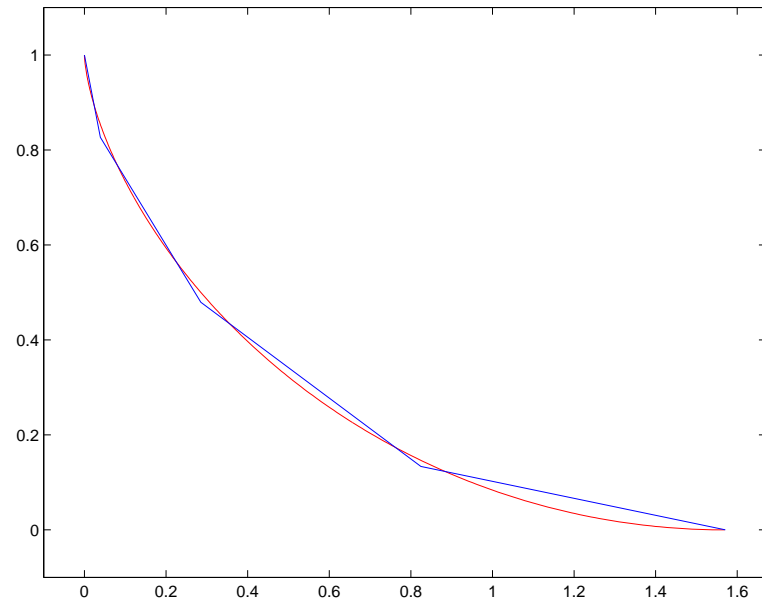
Diseñadas a priori.

N = Número de nodos interiores

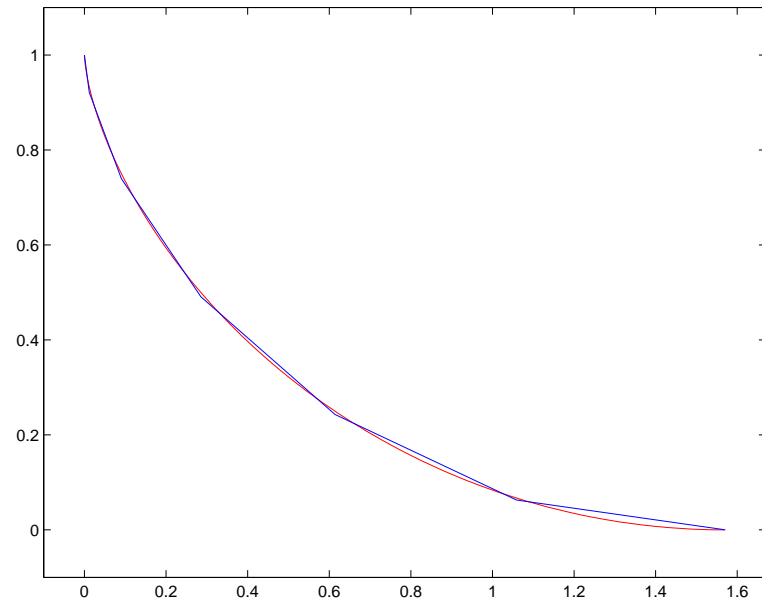
$$N = 1$$



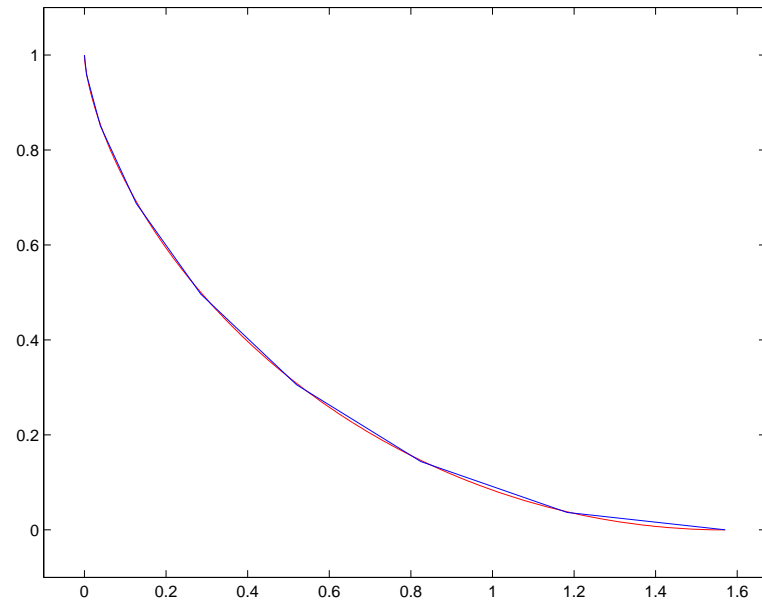
$$N = 3$$



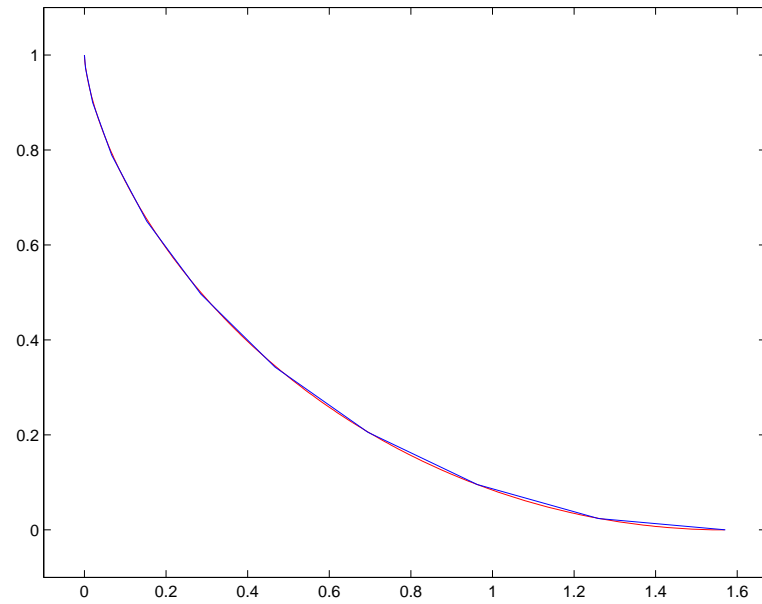
$$N = 5$$



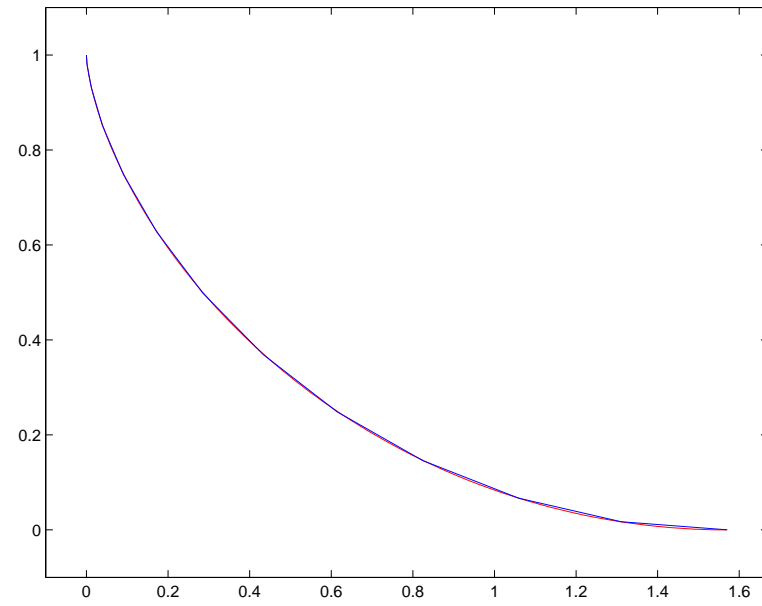
$$N = 7$$



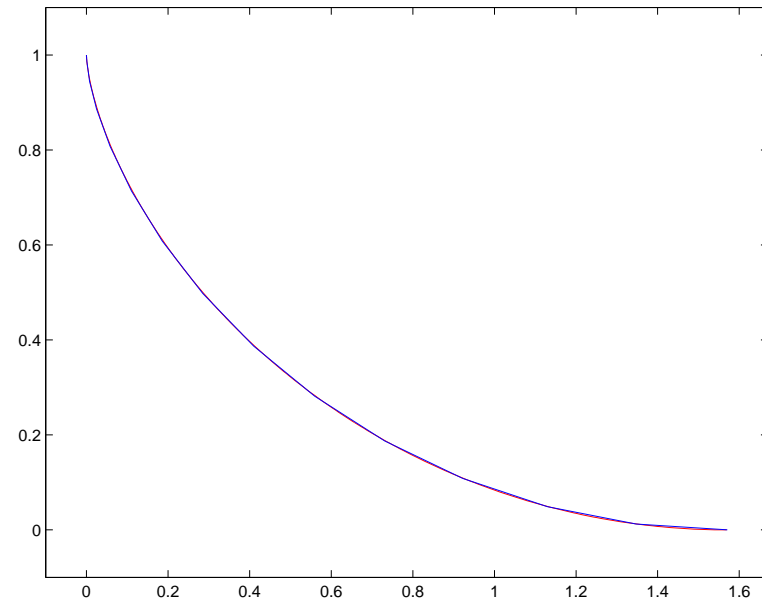
$$N = 9$$



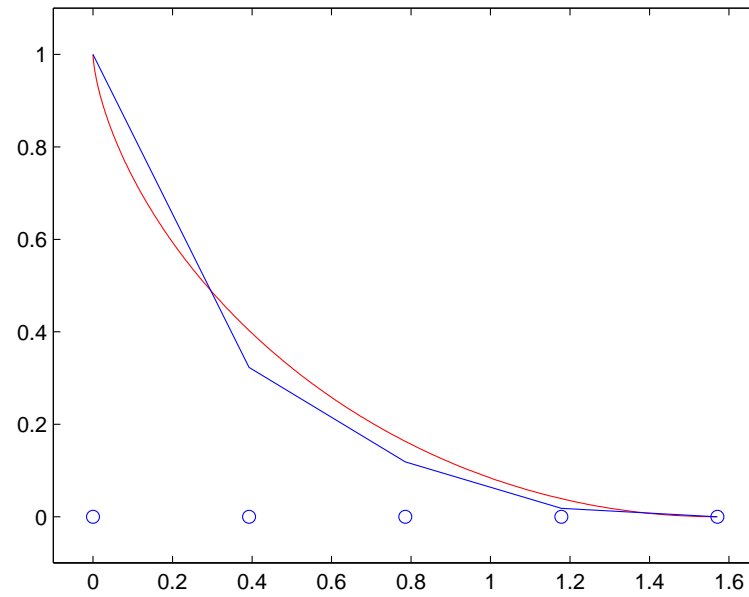
$$N = 11$$

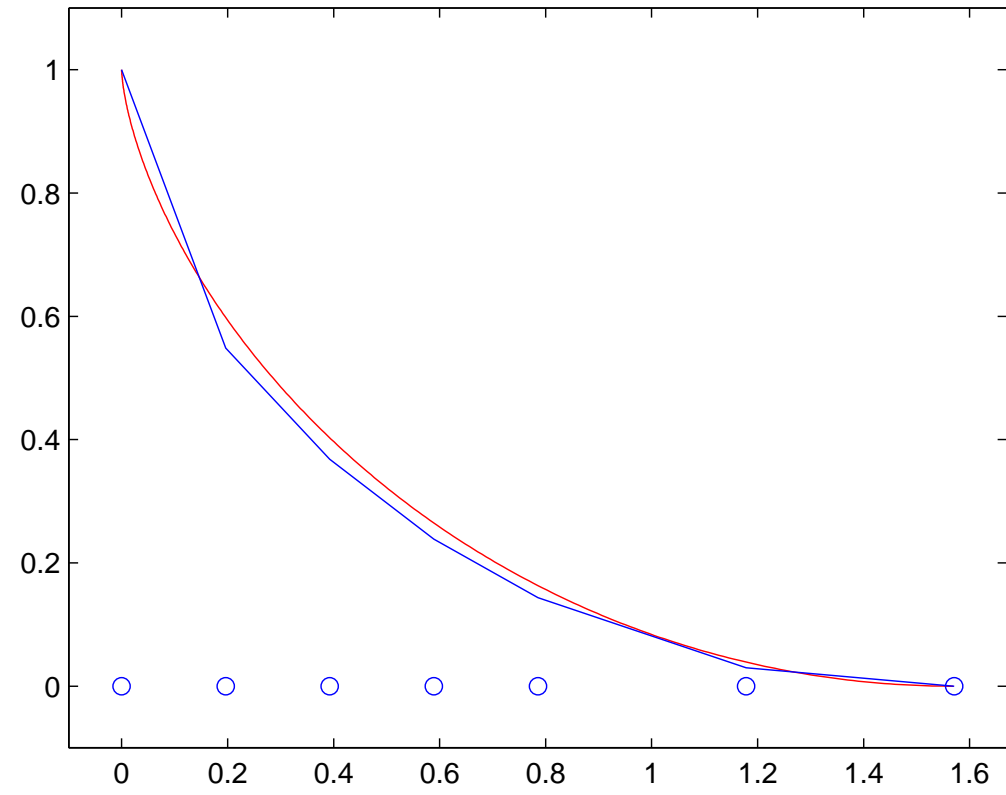


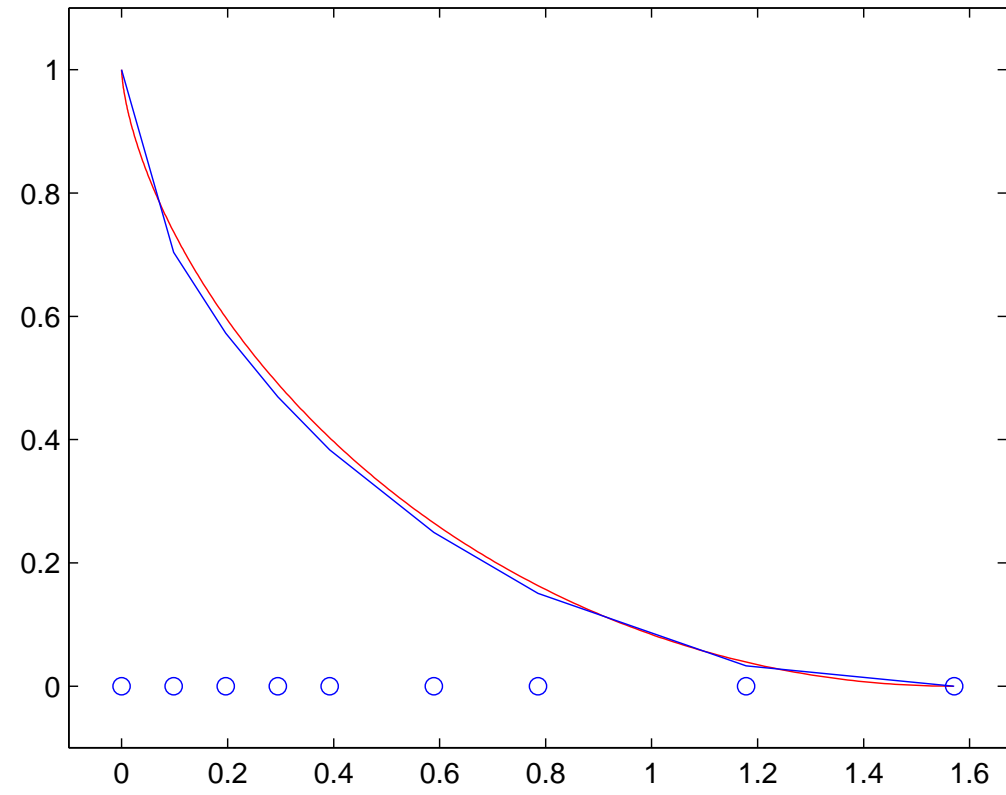
$$N = 13$$

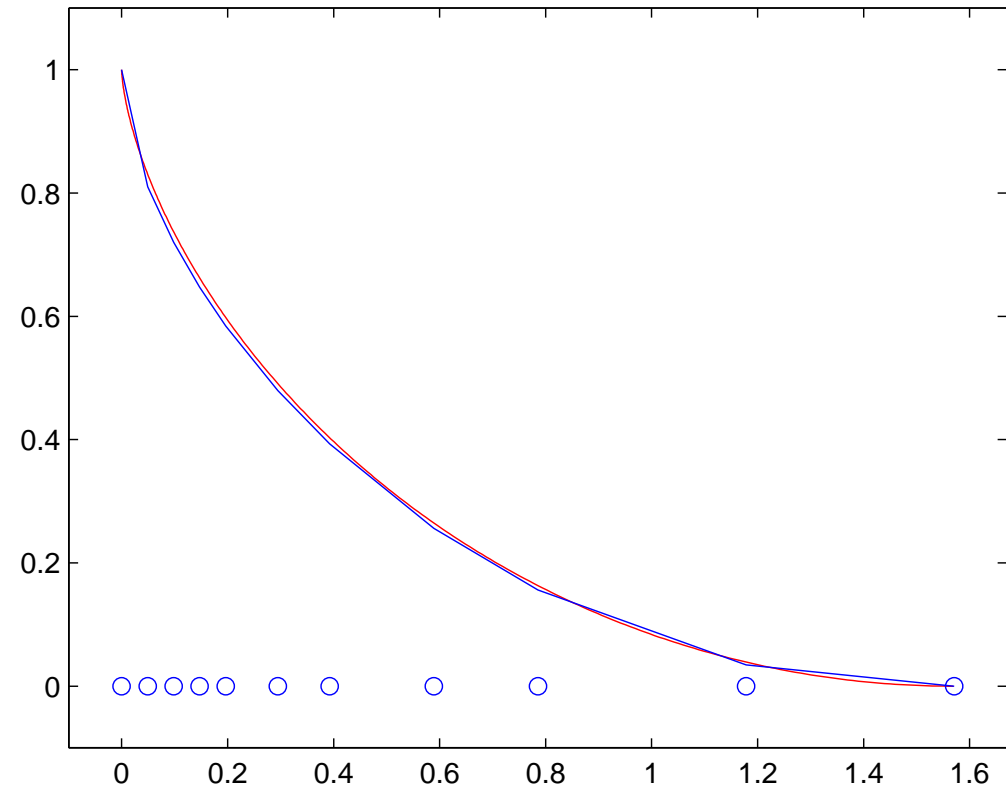


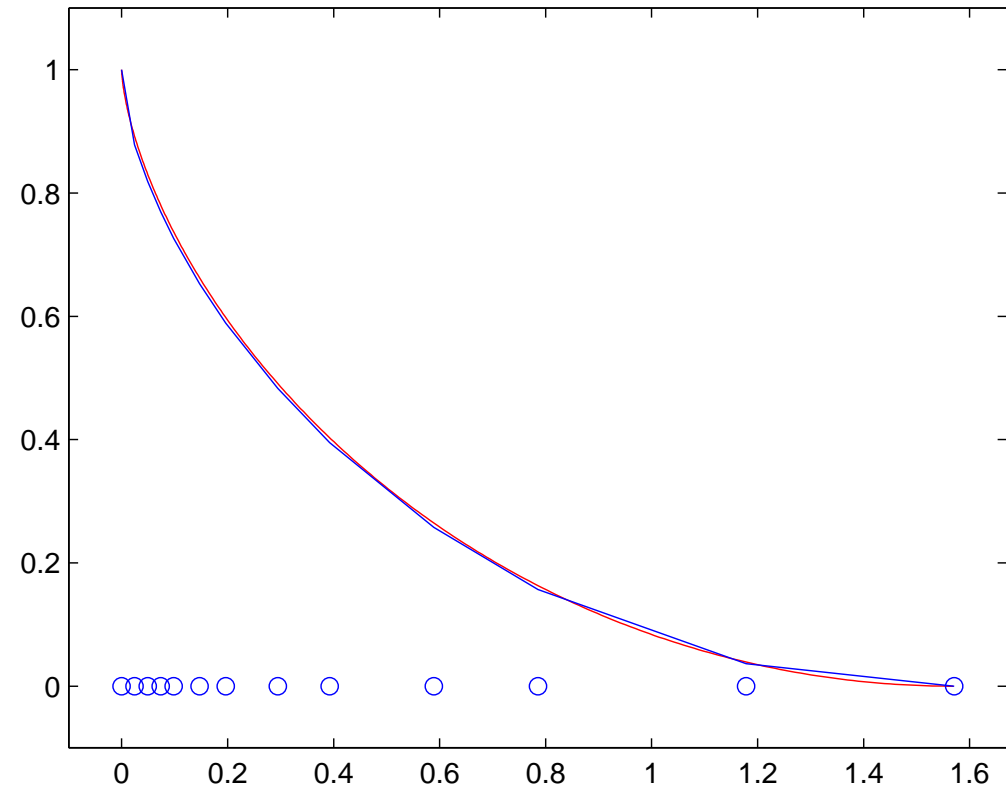
MALLAS OBTENIDAS MEDIANTE REFINAMIENTO AUTOMÁTICO

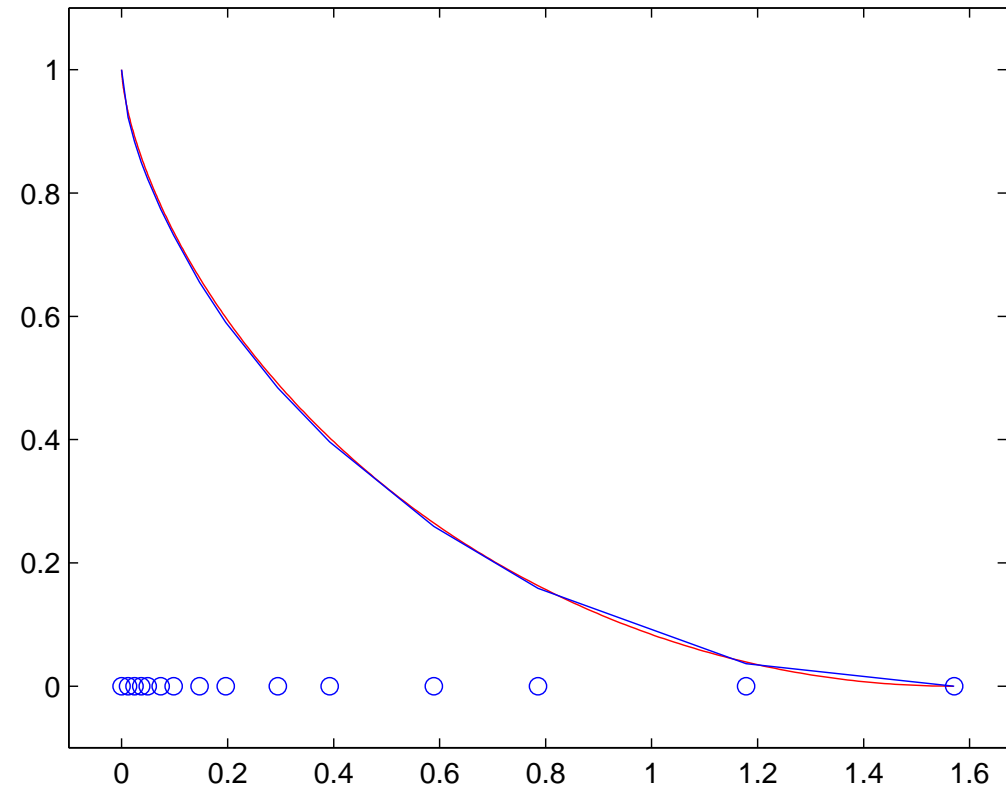


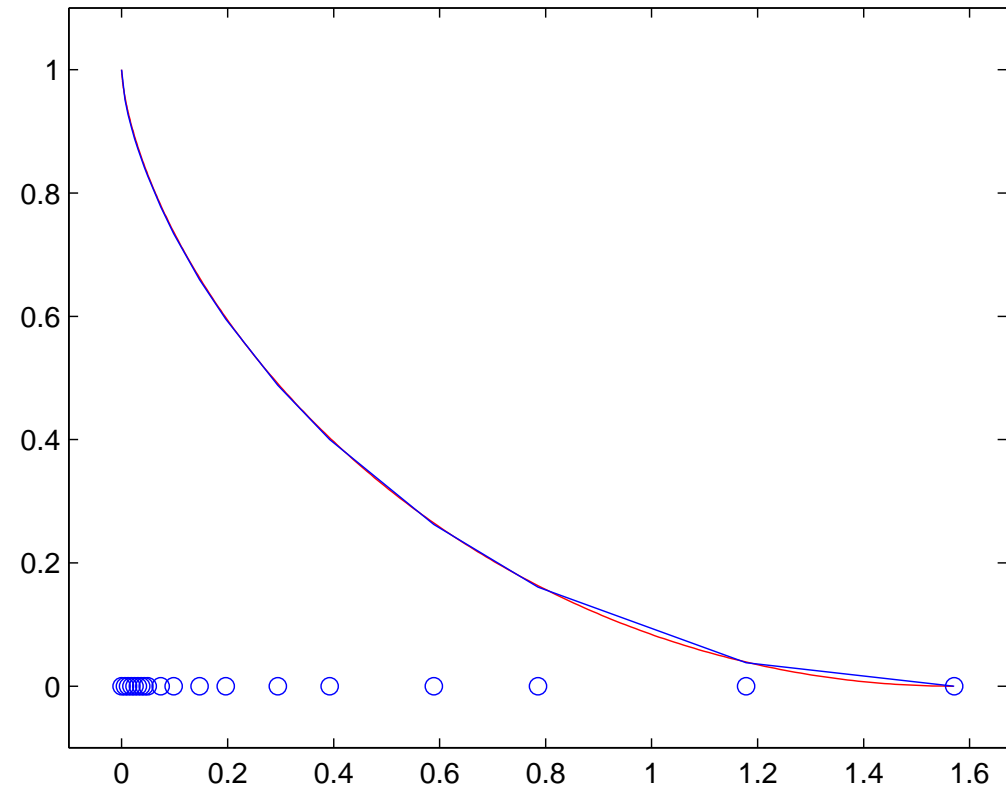






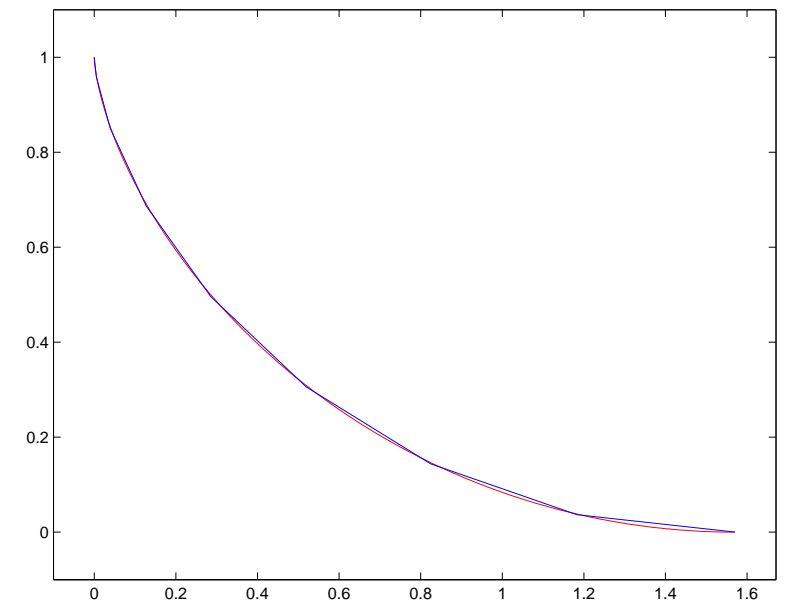
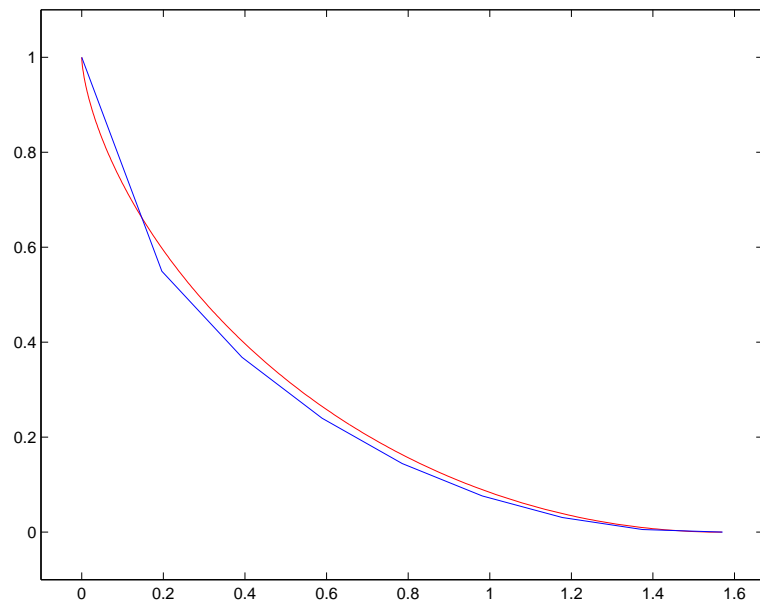






COMPARACIÓN ENTRE MALLAS UNIFORME Y GRADUADA

N=7



COMPARACIÓN ENTRE MALLAS UNIFORME Y GRADUADA

ORDEN DEL ERROR:

Mallas uniformes: $e \sim \frac{1}{N}$

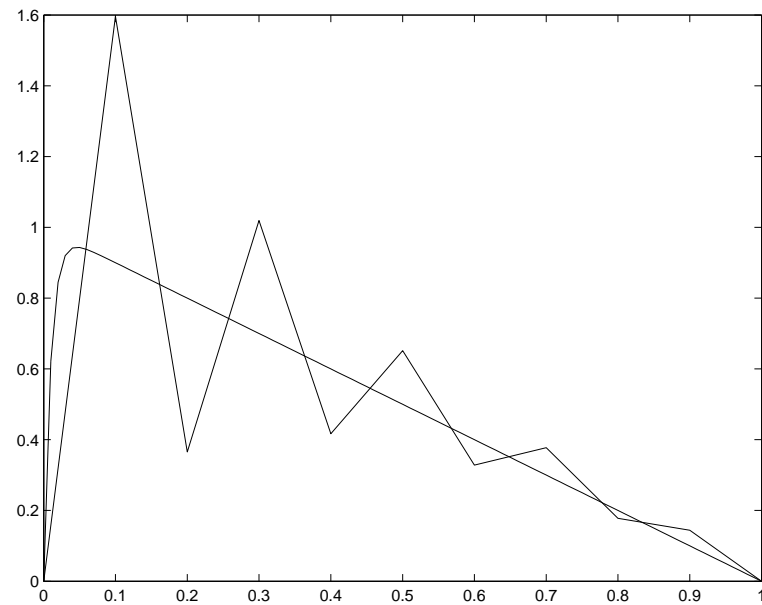
Mallas adaptadas: $e \sim \frac{1}{N^2}$

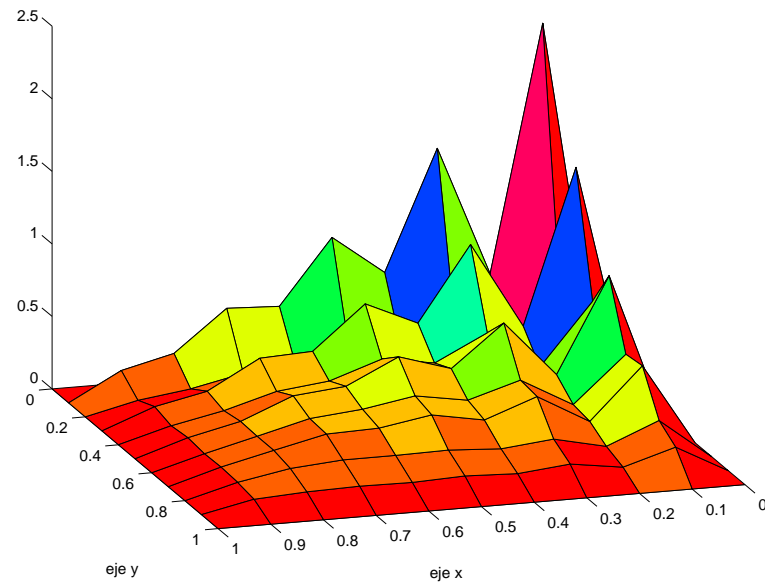
ES ÓPTIMO!!

O sea, el mismo orden de aproximación que para una función suave.

PROBLEMAS DE CONVECCIÓN DOMINANTE

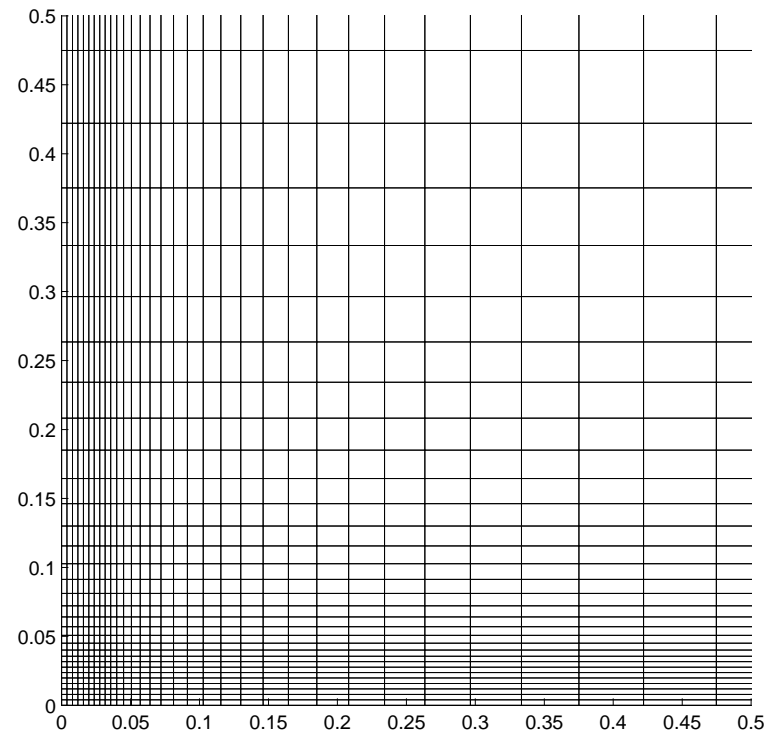
Oscilaciones que aparecen con los métodos standard

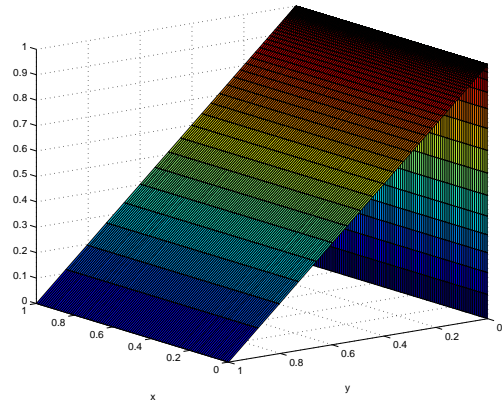




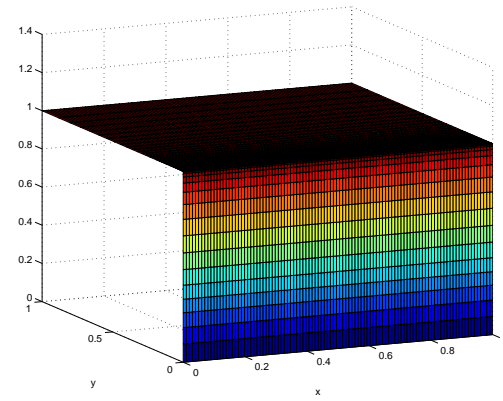
MALLAS GRADUADAS DISEÑADAS A PRIORI

Utilizando información sobre la solución.

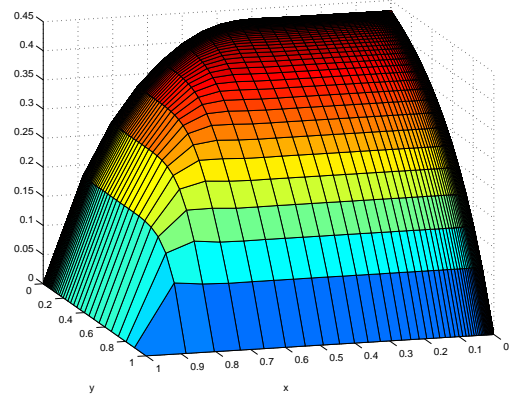




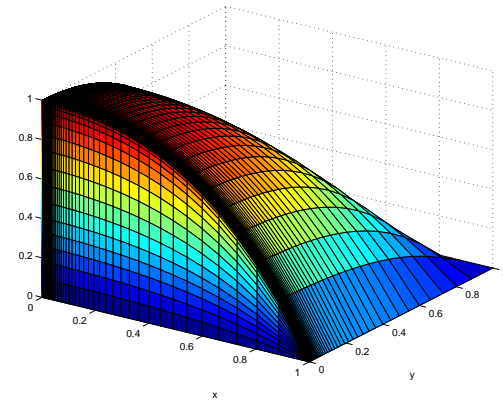
(1)



(2)



(3)

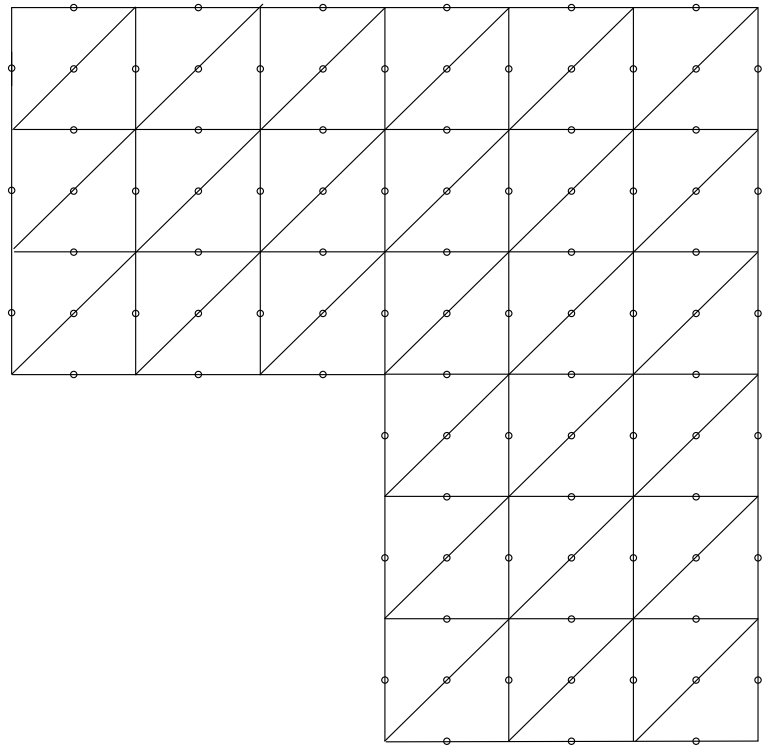


(4)

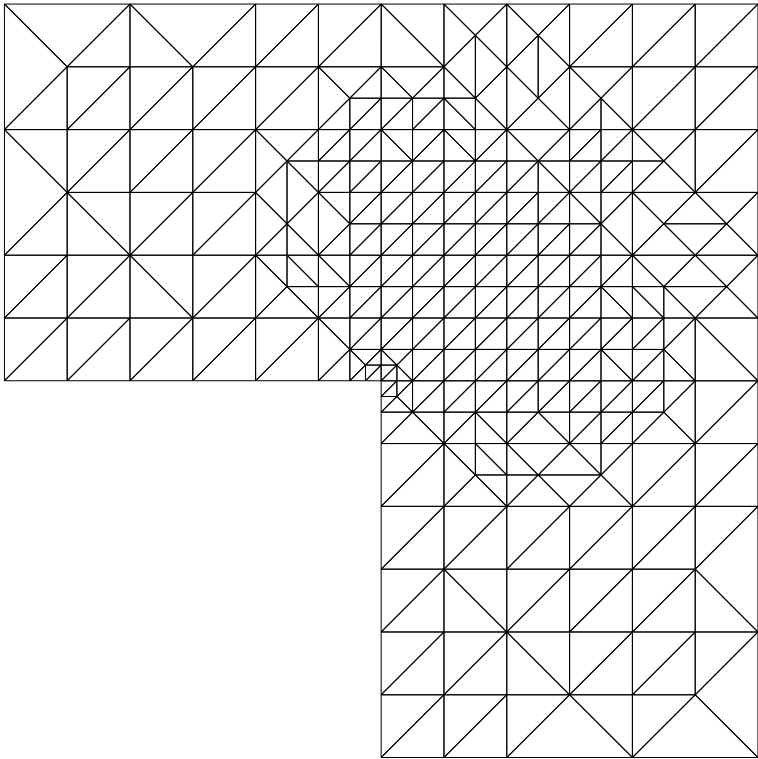
APROXIMACIÓN DE AUTOVALORES

MALLAS OBTENIDAS UTILIZANDO ESTIMACIONES A POSTERIORI

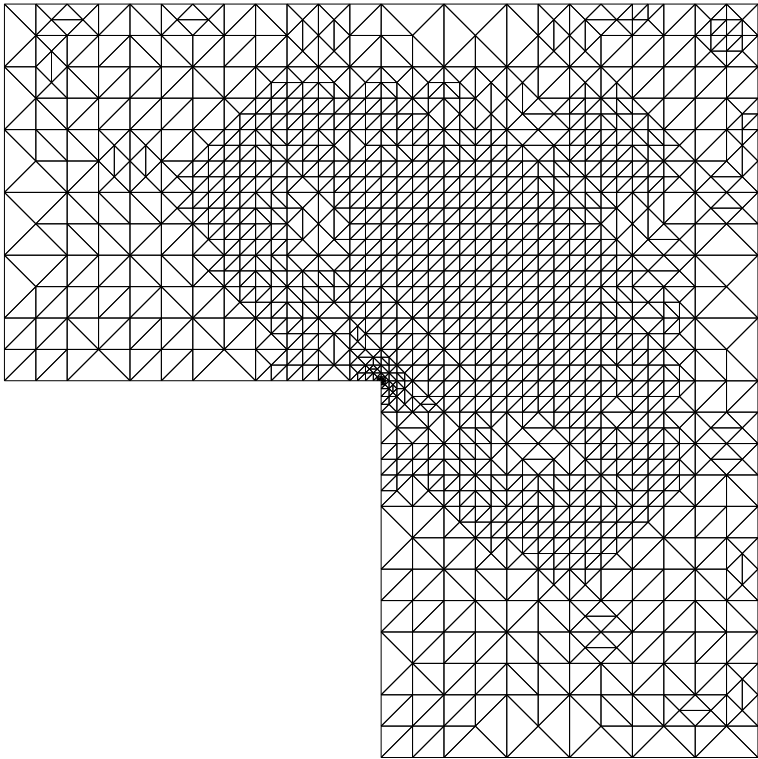
Malla inicial con 54 elementos:



Malla con 422 elementos obtenida mediante refinamiento automático



Malla con 2062 elementos obtenida mediante refinamiento automático



MUCHAS GRACIAS!!!