

Transparencias
Métodos Matemáticos aplicados a la Ingeniería de
Materiales
Métodos Matemáticos aplicados a la Ingeniería de la
Energía
Métodos Numéricos en el Máster en Ingeniería
Industrial - Módulo I

Autora: Ana I. Muñoz Montalvo
Septiembre 2022

©2022. Autora: Ana I. Muñoz
Algunos derechos reservados.

Este trabajo está publicado bajo la licencia internacional Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0. Se puede ver una copia de esta licencia en la dirección:

<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/> .

Publicado en <https://burjcdigital.urjc.es/>

Los contenidos de este documento han sido realizados a partir de los apuntes:

- Apuntes de teoría. *Métodos matemáticos aplicados a la Ingeniería*, cuyos autores son A.I. Muñoz, E. Schiavi y C. Conde, y de la recopilación de ejercicios:

- *Ejercicios y problemas resueltos. Métodos matemáticos aplicados a la Ingeniería*, cuyos autores son A.I. Muñoz, A. Nolla y E. Schiavi.

En cuanto a los códigos utilizados, pueden obtenerse en:

- *Códigos en Octave/MATLAB, seminarios y prácticas. Métodos matemáticos aplicados a la Ingeniería*, cuyos autores son A.I. Muñoz, A. Nolla y E. Schiavi.

Todo el material mencionado está publicado en:

<https://burjcdigital.urjc.es/>

La mayoría de los códigos mencionados son adaptaciones de las funciones que aparecen en el libro *Cálculo científico con Matlab y Octave*, de A. Quarteroni y F. Salieri.

Índice

1. Ecuaciones no lineales: resolución numérica	4 – 36
2. Problemas de valor inicial para ecuaciones diferenciales ordinarias: resolución numérica	37 – 85
3. Problemas de valor inicial y de contorno para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales: resolución numérica	86 - 161

1. Ecuaciones no lineales: resolución numérica

Índice

Motivación

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal:
 - a. Método de bisección.
 - b. Método de aproximaciones sucesivas.
 - c. Método de Newton-Raphson y variantes.
 - d. Comentarios acerca de la convergencia de métodos iterativos.
2. Métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales:
 - a. Método de aproximaciones sucesivas
 - b. Método de Newton-Raphson
3. Resolución con Octave

Motivación

Lineal en 1 variable

$$ax + b = 0$$

Métodos directos



Solución exacta en un número finito de pasos

No lineal en 1 variable

$$x^2 + \sin(x) - 3 = 0$$

Métodos iterativos



Proporcionan una sucesión que converge a la solución o una de las soluciones

Ejemplo 1.1. (Hanna et al.[9]): La ecuación de Peng-Robinson es una ecuación de estado que proporciona la presión P de un gas mediante:

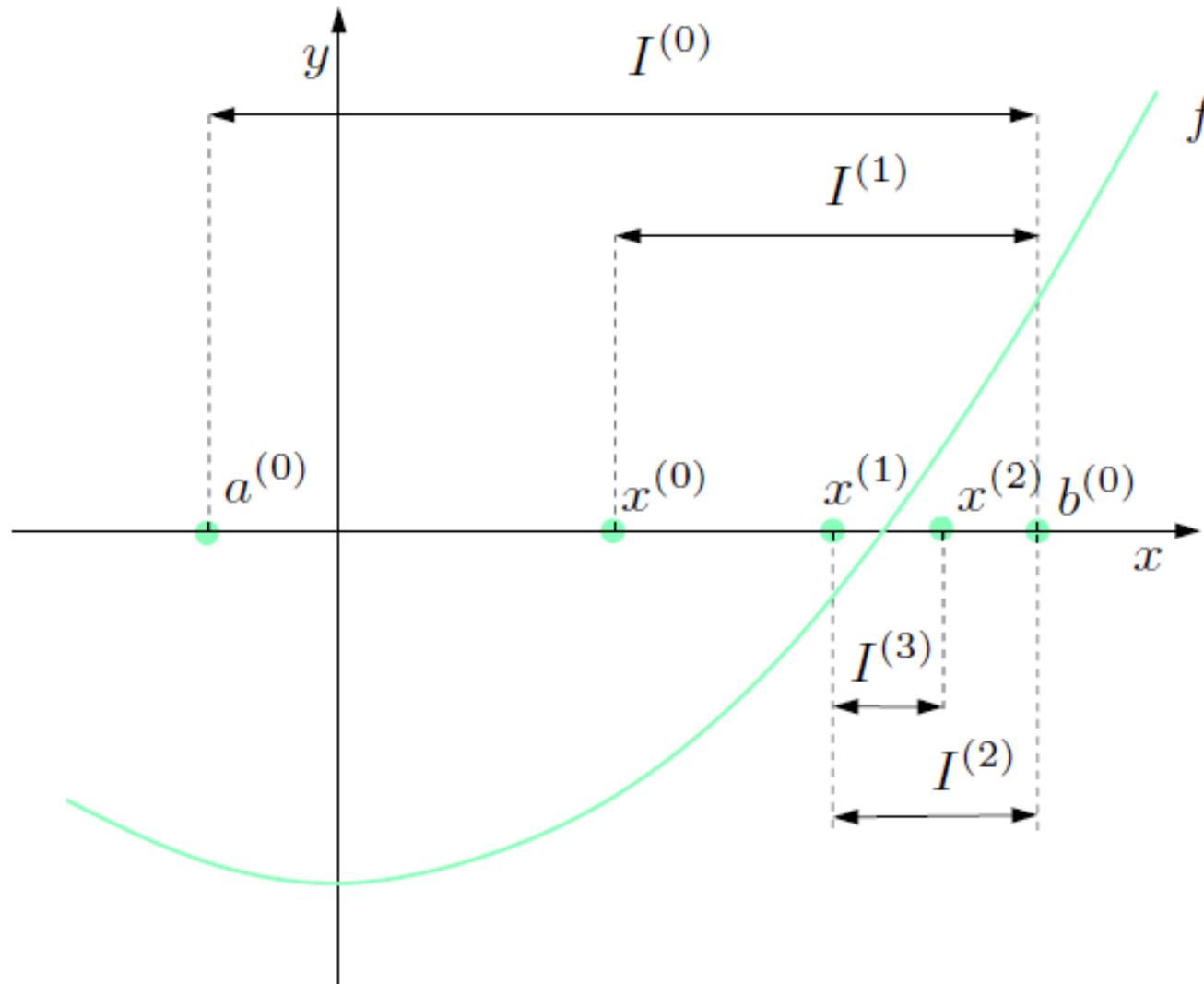
$$P = \frac{R \cdot T}{V - b} - \frac{a}{V \cdot (V + b) + b \cdot (V - b)}$$

donde a y b son constantes, T es la temperatura absoluta a la que se encuentra el gas, V es el volumen específico y R es la constante de los gases perfectos ($8.31441 \text{ J}/(\text{mol} \cdot ^\circ\text{K})$). Para el CO_2 las constantes a y b toman los valores $a = 364.61 \text{ m}^6 \cdot \text{kPa} / (\text{kg} \cdot \text{mol})^2$ y $b = 0.02664 \text{ m}^3/\text{kg} \cdot \text{mol}$. Supongamos que se desea encontrar la densidad (es decir $1/V$) del CO_2 a una presión de $1 \cdot 10^4 \text{ kPa}$ y a una temperatura de 340°K usando la ecuación de Peng-Robinson. Ello implicaría tener que encontrar el valor de V para el que:

$$1 \cdot 10^4 = \frac{R,340}{V - 0,02664} - \frac{364,61}{V \cdot (V + 0,02664) + 0,02664 \cdot (V - 0,02664)}$$

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal:

1.a. Método de bisección



Ejercicio. Hallar una aproximación x^* de la única raíz real de la ecuación $x^3 + 3x^2 - 8 = 0$ utilizando el método de bisección con un error inferior a 10^{-2} .

Solución.

Lo primero que tenemos que hacer es encontrar un intervalo (a, b) que contenga la raíz, esto es equivalente a que se verifique $f(a)f(b) < 0$. Observamos que $f(1.3)f(1.4) < 0$, por tanto podemos tomar $a = 1.3$ y $b = 1.4$. Considerando este intervalo de partida, calculamos las iteraciones necesarias para cumplir la condición de que el error sea inferior a 10^{-2} ,

$$n > \frac{\ln((b - a)/0.01)}{\ln(2)} = \frac{2.30}{0.693} = 3.3189$$

por tanto realizaremos $n = 4$ iteraciones:

$$(1.3, 1.4) \rightarrow x_1 = 1.35, f(1.35) < 0 \rightarrow (1.35, 1.4)$$

$$(1.35, 1.4) \rightarrow x_2 = 1.375, f(1.375) > 0 \rightarrow (1.35, 1.375)$$

$$(1.35, 1.375) \rightarrow x_3 = 1.3625, f(1.3625) > 0 \rightarrow (1.35, 1.3625)$$

$$(1.35, 1.3625) \rightarrow x_4 = 1.35625.$$

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.b. Método de aproximaciones sucesivas (del punto fijo)

Primer paso:

reescribir la ecuación $f(x) = 0$ en la forma $x = g(x)$

$$f(x) = 0 \quad \longrightarrow \quad x = g(x).$$

Dado un valor x_0 se genera la sucesión $\{x_{i+1} = g(x_i)\}_{i=0}^{\infty}$.

$$\lim_{i \rightarrow \infty} (x^{(i+1)}) = \lim_{i \rightarrow \infty} g(x^{(i)}) \quad \Leftrightarrow \quad x^* = g(x^*)$$

Interesará por tanto trabajar con funciones g que posean un punto fijo. Un tipo de tales funciones son las que se denominan contracciones y que pasamos a definir a continuación:

Definición 2.8. Sean (E, d) y (V, d') dos espacios métricos y sea $g : E \rightarrow V$ una aplicación definida en E y con valores en V . Se dice que g es una aplicación lipschitciana cuando existe una constante real $k > 0$ tal que:

$$d'(g(x), g(y)) \leq k \cdot d(x, y) \quad \forall x, y \in E$$

A la menor constante k que verifica la condición anterior se la denomina constante de Lipschitz (o razón) de la aplicación.

Definición 2.9. *A toda aplicación lipschitciana que verifique las dos condiciones siguientes:*

1ª) *Estar definida en un espacio métrico (E, d) sobre sí mismo: $g : E \rightarrow E$.*

2ª) *Tener una constante de Lipschitz estrictamente inferior a 1*

*se la denomina **contracción** sobre E .*

Teorema 2.1 (del punto fijo). *Toda contracción definida sobre un espacio métrico completo admite un único punto fijo.*

$$\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(i)}), \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Para la sucesión $\{\mathbf{x}^{(i)}\}_{i=0}^{\infty}$ se verificará:

$$d(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}) = d(\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(0)}), \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(1)})) \leq k \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})$$

$$d(\mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{x}^{(3)}) = d(\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(1)}), \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(2)})) \leq k \cdot d(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}) \leq k^2 \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})$$

.....

$$d(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(n+1)}) \leq k^n \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})$$

$$\begin{aligned}
d(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(n+p)}) &\leq d(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(n+1)}) + d(\mathbf{x}^{(n+1)}, \mathbf{x}^{(n+p)}) \leq \\
&\leq d(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(n+1)}) + d(\mathbf{x}^{(n+1)}, \mathbf{x}^{(n+2)}) + d(\mathbf{x}^{(n+2)}, \mathbf{x}^{(n+p)}) \leq \\
&\leq k^n \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) + k^{(n+1)} \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) + \dots + k^{(n+p-1)} \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) = \\
&= k^n \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \cdot [1 + k + \dots + k^{(p-1)}] \leq k^n \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \cdot \left(\sum_{i=0}^{\infty} k^i \right)
\end{aligned}$$

$$\sum_{i=0}^{\infty} k^i = \frac{1}{1-k}$$

lo que nos conduce a que:

$$d(\mathbf{x}^{(n)}, \mathbf{x}^{(n+p)}) \leq \frac{k^n}{1-k} \cdot d(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})$$

Teorema 3.2. Si $g(x)$ es una aplicación de clase $C^1([a, b])$, que toma valores en $[a, b]$ y verificando la condición:

$$\exists k < 1 \ / \ |g'(x)| \leq k, \quad \forall x \in [a, b]$$

entonces la sucesión $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ generada, a partir de cualquier $x_0 \in [a, b]$, converge hacia la única solución de la ecuación $x = g(x)$ en $[a, b]$.

Demostración: Por aplicación del teorema del valor medio se verificará que:

$$\forall x, y \in [a, b] \quad \exists z \in]a, b[\ / \ g(x) - g(y) = g'(z) \cdot (x - y)$$

y por haber supuesto que la primera derivada estaba acotada en valor absoluto se tendrá que:

$$\forall x, y \in [a, b] : \quad |g(x) - g(y)| \leq k \cdot |x - y| < |x - y|$$

1. Bajo las hipótesis del teorema precedente, si se desea asegurar que el error cometido es menor que un cierto valor ε la expresión anterior nos conduce que deben realizarse un número N de iteraciones tal que:

$$\frac{k^N}{1-k} \cdot |x_1 - x_0| < \varepsilon \Rightarrow N > \left| \frac{\log \left(\frac{\varepsilon \cdot (1-k)}{|x_1 - x_0|} \right)}{\log(k)} \right|$$

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.b. Método de aproximaciones sucesivas. Ejemplo.

Ejercicio 2.7 *Considera la ecuación $f(x) = 2x - \text{sen}(x) - \text{cos}(x)$.*

(a) Demostrar que $f(x)$ tiene una raíz en $[0, 1]$.

(b) Resolver la ecuación $f(x) = 0$ utilizando un método del punto fijo

$$\begin{cases} x_0 \\ x_{n+1} = g(x_n) \end{cases}$$

verificando que la función $g(x)$ elegida es contractiva en las proximidades de la raíz y hallando un número de iteraciones suficiente para que $|x_i - x_{i-1}| < 10^{-2}$.

Solución.

(a) Basta comprobar que $f(x)$ es continua y que $f(0)f(1) < 0$. En efecto, f es continua puesto que los polinomios, $\text{sen}(x)$ y $\text{cos}(x)$ son funciones continuas, y cualquier combinación lineal de ellas también lo es. Además, se tiene que $f(0) = -1$ y $f(1) = 0.61822$, por tanto, por el Teorema de Bolzano existe al menos un valor x^* , tal que $f(x^*) = 0$, es decir, una solución de la ecuación.

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.b. Método de aproximaciones sucesivas. Ejemplo.

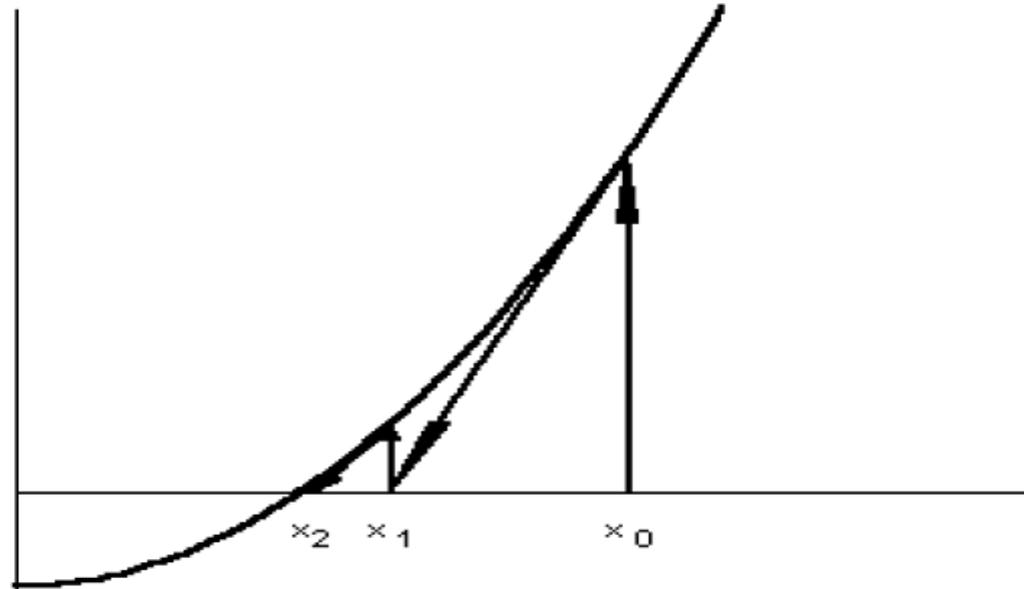
(b) Definimos $g(x) = \frac{1}{2}(\sin(x) + \cos(x))$, que resulta ser contractiva en el intervalo $[0, 1]$ ya que $g'(x) = \frac{1}{2}(\cos(x) - \sin(x))$, $g'(0) = 0.5$, $g'(1) = -0.1505$ y $g''(x)$ no se anula en $[0, 1]$ (en este caso g' es monótona decreciente en dicho intervalo). Por tanto puede tomarse como constante de Lipschitz $k = 0.5 < 1$, con lo cual g es contractiva en $[0, 1]$. Eligiendo como semilla el punto medio del intervalo, $x_0 = 0.5$, se tienen las siguientes iteraciones del punto fijo:

$$x_1 = g(x_0) = 0.678504, x_2 = g(x_1) = 0.703070, x_3 = g(x_2) = 0.704711,$$

y como el enunciado nos dice que iteremos hasta que se verifique la condición $|x_i - x_{i-1}| < 10^{-2}$, y x_2 y x_3 la satisfacen, tomamos como aproximación de la solución $x = 0.70$.

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.c. Método de Newton-Raphson y variantes: Método de Newton



$$f(x_0) + Hf'(x_0) = 0$$

$$F(h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0 + \theta h) = 0.$$

$$H = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

$$x_1 = x_0 + H.$$

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.c. Método de Newton-Raphson y variantes: Método de Newton

Proposición 1.3.2 *Si la función $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ es una contracción definida en $[a, b]$ la sucesión dada por*

$$\left\{ x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \right\}_{i=0}^{\infty}$$

obtenida a partir de cualquier punto $x_0 \in [a, b]$ converge hacia la única solución de la ecuación $f(x) = 0$ en $[a, b]$.

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.c. Método de Newton-Raphson y variantes: Método de la secante

a) Método de la secante.

Este método aproxima el valor de $f'(x_i)$ mediante:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

con lo que el esquema iterativo del método de Newton-Raphson se ve modificado a:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{\frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}} = \frac{x_{i-1}f(x_i) - x_i f(x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.c. Método de Newton-Raphson y variantes:

Método de regula-falsi

Este método es una combinación del método de bipartición y el método de la secante. En él se considera una ecuación $f(x) = 0$ y un intervalo $[a, b]$ en el que $f(x)$ sea continua y además se verifique que $f(a)f(b) < 0$. Con ello, según se indicó al analizar el método de bipartición se puede estar seguro de que en $[a, b]$ existe al menos una raíz. Tras ello se denomina x_1 al punto de corte con el eje de abscisas de la recta secante que pasa por los puntos $(a, f(a))$, $(b, f(b))$, es decir, que será el punto:

$$x_1 = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

Si $f(x_1)f(a) < 0$ se puede asegurar que en el intervalo (a, x_1) existirá una solución de la ecuación. En el caso de que $f(x_1)f(a) > 0$ se puede afirmar lo mismo para el intervalo (x_1, b) . Y en el caso de que $f(x_1) = 0$ se habrá determinado ya la solución. En todo caso o se tiene la solución de la ecuación o se dispone de un intervalo más pequeño en el que volver a repetir el proceso.

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.
1.c. Método de Newton-Raphson y variantes:
Método de Newton. Ejemplo

Ejercicio 2.4 *Hallar una aproximación x^* de la única raíz real de la ecuación $x^3 + 3x^2 - 8 = 0$ utilizando:*

(a) *el método de bisección,*

(b) *el método de Newton-Raphson,*

con un error inferior a 10^{-2} en ambos casos.

Solución.

(a) Comencemos por el método de bisección. Lo primero que tenemos que hacer es encontrar un intervalo (a, b) que contenga la raíz, esto es equivalente a que

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.c. Método de Newton-Raphson y variantes:

Método de Newton. Ejemplo

se verifique $f(a)f(b) < 0$. Observamos que $f(1.3)f(1.4) < 0$, por tanto podemos tomar $a = 1.3$ y $b = 1.4$.

Considerando este intervalo de partida, calculamos las iteraciones necesarias para cumplir la condición de que el error sea inferior a 10^{-2} ,

$$n > \frac{\ln((b-a)/0.01)}{\ln(2)} = \frac{2.30}{0.693} = 3.3189$$

por tanto realizaremos $n = 4$ iteraciones:

$I_0 = (1.3, 1.4)$	$x_1 = 1.35$	$f(1.35) < 0$
$I_1 = (1.35, 1.4)$	$x_2 = 1.375$	$f(1.375) > 0$
$I_2 = (1.35, 1.375)$	$x_3 = 1.3625$	$f(1.3625) > 0$
$I_3 = (1.35, 1.3625)$	$x_4 = 1.35625$	

(b) Para resolverlo con el método de Newton, dado por el esquema

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

donde $f(x) = x^3 + 3x^2 - 8$ y $f'(x) = 3x^2 + 6x$, consideramos como semilla $x_0 = 1.35$. Y se obtiene que $x_1 = 1.3553$ y como $|x_1 - x_0| = 0.0053160$ ya es inferior a 10^{-2} tenemos que el método de Newton-Raphson termina en una sola iteración.

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.d. Comentarios acerca de la convergencia de métodos iterativos: Orden de convergencia

Definición 1.3.1 Siendo $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ una sucesión convergente hacia x^* en la que $x_i \neq x^*$ para todo valor del índice i , se dice que **la sucesión converge** hacia x^* **con orden p y con una constante de error asintótico β** cuando existen dos números reales positivos p y β tales que:

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{|x_{i+1} - x^*|}{|x_i - x^*|^p} = \beta$$

En este sentido se dice que un **método iterativo** de la forma $x_{i+1} = g(x_i)$ es **de orden p** cuando la sucesión $\{x_i\}_{i=0}^{\infty}$ converja hacia una solución de $x = g(x)$ con orden p . En el caso de que p sea igual a 1 se dice que el método **converge linealmente**. Y si $p = 2$ se dice que el método **converge cuadráticamente**. Cuando $p > 1$ se dirá que la **convergencia es superlineal**.

Proposición 1.3.4 *Si $g(x)$ es una contracción en $[a, b]$, el método de aproximaciones sucesivas es, al menos, de convergencia lineal.*

Proposición 1.3.5 *En las condiciones de convergencia del método de Newton-Raphson, si x^* es una solución simple de la ecuación $f(x) = 0$, y $f(x)$ es de clase $C^2([a, b])$, este método es, al menos, de convergencia cuadrática.*

Proposición 1.3.6 *Siendo f una función de clase $C^3([a, b])$, el método de la secante para la búsqueda de raíces simples de la ecuación $f(x) = 0$, cuando converge, presenta una convergencia de orden $\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$.*

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.d. Comentarios acerca de la convergencia de métodos iterativos: Técnica de sobreiteración

$$x = g(x) \Leftrightarrow x + \rho x = g(x) + \rho x \Leftrightarrow x = \frac{g(x) + \rho x}{1 + \rho} = h(x)$$

$$x^2 - a = 0 \Leftrightarrow xx = a \Leftrightarrow x = \frac{a}{x} = g(x)$$

$$g'(x^*) = -\frac{a}{(x^*)^2}$$

$$\rho = -g'(x^*) = 1.$$

$$x = h(x) = \frac{\frac{a}{x} + x}{1 + 1} = \frac{a + x^2}{2x} = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right)$$

$$\left\{ x_0, \frac{a}{x_0}, x_0, \frac{a}{x_0}, x_0, \frac{a}{x_0}, \dots \right\}$$

$$x_1 = h(x_0) = \frac{17}{2} = 8,5$$

$$x_2 = h(x_1) = \frac{88,25}{17} = 5,191176470$$

$$x_3 = 4,136664722$$

$$x_4 = 4,002257525$$

$$x_5 = 4,000000637$$

$$x_6 = 4,000000001$$

$$x_6 = 4,000000000$$

1. Métodos para resolver una ecuación no lineal.

1.d. Comentarios acerca de la convergencia de métodos iterativos.

Aceleración de la convergencia: Método de Aitken

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{(\phi(x^{(k)}) - x^{(k)})^2}{\phi(\phi(x^{(k)})) - 2\phi(x^{(k)}) + x^{(k)}}, \quad k \geq 0$$

Teorema 2.1 *Considérense las iteraciones de punto fijo (2.17) con $\phi(x) = x - f(x)$ para calcular las raíces de f . Entonces si f es suficientemente regular tenemos:*

- *si las iteraciones de punto fijo convergen linealmente a una raíz simple de f , entonces el método de Aitken converge cuadráticamente a la misma raíz;*
- *si las iteraciones de punto fijo convergen con orden $p \geq 2$ a una raíz simple de f , entonces el método de Aitken converge a la misma raíz con orden $2p - 1$;*
- *si las iteraciones de punto fijo convergen linealmente a una raíz de f con multiplicidad $m \geq 2$, entonces el método de Aitken converge linealmente a la misma raíz con un factor de convergencia asintótico de $C = 1 - 1/m$.*

En particular, si $p = 1$ y la raíz de f es simple, el método de extrapolación de Aitken converge incluso si las correspondientes iteraciones de punto fijo divergen.

2. Métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales

Los métodos de aproximaciones sucesivas, Newton-Raphson y sus variantes, presentados en el apartado anterior para el caso de una única ecuación pueden extenderse fácilmente al caso de sistemas de n ecuaciones no lineales con n incógnitas.

Este tipo de sistemas los escribiremos en la forma:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots\dots\dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

o más brevemente como $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ donde $\mathbf{0}$ es el vector nulo de n componentes, \mathbf{x} es un vector de \mathbb{R}^n y \mathbf{f} es la función vectorial dependiente de n variables reales dada por:

$$\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \rightarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \dots\dots\dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases}$$

2. Métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales:

2. a. Método de aproximaciones sucesivas

$$\left(\begin{array}{l} x_1^{(i+1)} = g_1(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{j-1}^{(i)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \\ x_2^{(i+1)} = g_2(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{j-1}^{(i)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \\ \dots\dots\dots \\ x_j^{(i+1)} = g_j(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{j-1}^{(i)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \\ \dots\dots\dots \\ x_n^{(i+1)} = g_n(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{j-1}^{(i)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \end{array} \right) \quad (i = 0, 1, \dots)$$

2. Métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales: 2. a. Método de aproximaciones sucesivas. Variante.

$$\left(\begin{array}{l} x_1^{(i+1)} = g_1(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{j-1}^{(i)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \\ x_2^{(i+1)} = g_2(x_1^{(i+1)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{j-1}^{(i)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \\ \dots\dots\dots \\ x_j^{(i+1)} = g_j(x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, \dots, x_{j-1}^{(i+1)}, x_j^{(i)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \\ \dots\dots\dots \\ x_n^{(i+1)} = g_n(x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, \dots, x_{j-1}^{(i+1)}, x_j^{(i+1)}, x_{j+1}^{(i+1)}, \dots, x_n^{(i)}) \end{array} \right) \quad (i = 0, 1, \dots)$$

2. Métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales: 2. b. Método de Newton-Raphson

$$\left\{ \mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} - \left[\mathbf{J}_f(\mathbf{x}^{(i)}) \right]^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(i)}) \right\}_{i=0}^{\infty}.$$

Ejercicio 2.11 Utilizar el método de Newton-Raphson para encontrar la solución del sistema:

$$\begin{cases} 3x^2 - y^2 & = 0 \\ 3xy^2 - x^3 - 1 & = 0 \end{cases}$$

partiendo del vector semilla $(1, 1)^t$ y realizando 2 iteraciones del método.

Solución.

Denotemos por $f_1(x, y) = 3x^2 - y^2$ y $f_2(x, y) = 3xy^2 - x^3 - 1$. Siguiendo el esquema de Newton-Raphson para sistemas se tiene que:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x}(x_0, y_0) & \frac{\partial f_1}{\partial y}(x_0, y_0) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x}(x_0, y_0) & \frac{\partial f_2}{\partial y}(x_0, y_0) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{pmatrix}$$

2. Métodos para resolver un sistema de ecuaciones no lineales:

2. b. Método de Newton-Raphson

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 6 & -2 \\ 0 & 6 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.612 \\ 0.833 \end{pmatrix}.$$

Ahora calculamos la segunda iteración:

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x}(x_1, y_1) & \frac{\partial f_1}{\partial y}(x_1, y_1) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x}(x_1, y_1) & \frac{\partial f_2}{\partial y}(x_1, y_1) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f_1(x_1, y_1) \\ f_2(x_1, y_1) \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0.612 \\ 0.833 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3.672 & -1.667 \\ 0.962 & 3.055 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0.425 \\ 0.044 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.504 \\ 0.085 \end{pmatrix}.$$

3. Resolución con Octave

- Método de la bisección

Se eligen a y b de manera que f contenga una única raíz en el intervalo $[a, b]$ y se ejecuta el comando:

```
> [sol,itera] = metbiseccion(fecu,a,b,errorper,maxitera)
```

- Método de Newton.

Se define la derivada $dfecu$ de $fecu$ como otra función inline, se elige el valor inicial x_0 y se ejecuta el comando:

```
> [sol,itera] = metnewton1ec(fecu,dfecu,x0,errorper,maxitera)
```

- Método de la secante.

Se eligen los valores iniciales x_0 , x_1 , y se ejecuta el comando:

```
> [sol,itera] = metsecante(fecu,x0,x1,errorper,maxitera)
```

- Método de ‘regula falsi’.

Se eligen a y b de manera que f contenga una única raíz en el intervalo $[a, b]$ y se ejecuta el comando:

```
> [sol,itera] = metregulafalsi(fecu,a,b,errorper,maxitera)
```

3. Resolución con Octave

Método del punto fijo y método de Aitken.

Si queremos resolver el problema de punto fijo $g(x) = x$, primeramente se define g como una función inline (o anónima) con el comando

```
> g = inline('...', 'x')  o  
> g = @(x) ...
```

Se elige el valor inicial x_0 y se ejecutan los comando:

```
> [sol, itera] = metpuntofijo(g, x0, tol, maxitera)  
> [sol, itera] = metodoaitken(g, x0, tol, maxitera)
```

si queremos aplicar el método del punto fijo o el método de aceleración de Aitken respectivamente.

En la salida de ambos, **sol** contiene la aproximación buscada, e **itera** el número de iteraciones que ha tardado el método en alcanzar **sol**.

3. Resolución con Octave

Método de Newton-Raphson para sistemas

Sea el sistema de ecuaciones no lineales:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0. \end{cases}$$

Para encontrar aproximaciones de un vector solución por el método de Newton-Raphson, se toma como dato inicial el vector columna $\mathbf{x}_0 = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T \in \mathbb{R}^n$, y creamos 2 archivos .m auxiliares:

1. Archivo `fecusistema.m` que contiene al vector columna $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^T$,
2. Archivo `jacobiana.m` que contiene la matriz Jacobiana $J_{\mathbf{f}}$,

donde las variables x_1, \dots, x_n se denotan por $x(1), \dots, x(n)$. y se ejecuta el comando:

```
> [vectorsol,itera] = metnewtonsisistema(@fecusistema,@jacobiana,...  
> vectorx0,errorper,maxitera)
```

Ejemplo: Sea el sistema de ecuaciones no lineales $\begin{cases} x^2 - 10x + y^2 + 8 = 0 \\ xy^2 + x - 10y + 8 = 0 \end{cases}$ y tomando como vector semilla $\mathbf{x}_0 = (0.5, 0.5)^T$ tenemos que

$$f = \begin{pmatrix} x^2 - 10x + y^2 + 8 \\ xy^2 + x - 10y + 8 \end{pmatrix} \text{ y } J_f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 2x - 10 & 2y \\ y^2 + 1 & 2xy - 10 \end{pmatrix}$$

por lo que creamos los archivos `fecusistema.m` y `jacobiana.m` de la siguiente forma:

Archivo `fecusistema.m`

```
> function F=fecusistema(x,y)
> F(1,1) = x^2-10*x+y^2+8;
> F(2,1) = x*y^2+x-10*y+8;
> endfunction
```

Archivo `jacobiana.m`

```
> function J=jacobiana(x,y)
> J(1,1) = 2*x-10;
> J(1,2) = 2*y;
> J(2,1) = y^2+1;
> J(2,2) = 2*x*y-10;
> endfunction
```

```
> vectorx0 = [0.5;0.5]; errorper=1.e-6; maxiter=1000;
> [vectorsol,itera] = metnewtonsistema(@fecusistema,@jacobiana,...
> vectorx0,errorper,maxitera)
```

2. Problemas de valor inicial para ecuaciones diferenciales ordinarias : resolución numérica

Índice

1. Introducción
2. Métodos de Euler explícito, implícito y theta-métodos (Crank-Nicolson)
3. Métodos predicción-corrección
4. Estudio general de un método de pasos libres
5. Métodos Runge-Kutta
6. Ejercicios resueltos
7. Resolución con Octave
8. Métodos multipaso

1. Introducción

Sea I un intervalo abierto de la recta real, no reducido a un único punto, y sea t_0 un punto fijado de él. Supongamos además que f es una función definida y continua en $I \times \mathbb{R}$ y con valores en \mathbb{R} , y sea y_0 un valor dado de \mathbb{R} . En estas condiciones nos planteamos el siguiente problema:

Hallar una función continua y diferenciable $y(t)$ definida en I y con valores en \mathbb{R} verificando:

$$(P.C.) \quad \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), & \forall t \in I, \\ y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.1)$$

Este tipo de problemas se conoce con el nombre de **problema de Cauchy** para la ecuación diferencial (2.1). La condición asociada se denomina **condición de Cauchy**. Toda función $y(t)$ verificando la EDO del problema de Cauchy se denomina **integral de la EDO** o solución particular de la EDO.

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(x, y(x)) dx.$$

Teorema 2.1.1 (de Cauchy-Lipschitz) *Suponiendo que la función $f(t, y)$ es una función continua sobre $I \times \mathbb{R}$ y que es lipschitciana respecto a la segunda de sus variables, es decir:*

$$\exists k > 0 \quad / \quad |f(t, y) - f(t, z)| \leq k \|y - z\| \quad \forall t \in I, \quad \forall y, z \in \mathbb{R}$$

entonces el problema de Cauchy (P.C.) definido en (2.1) admite una única solución.

Los P.V.I. pueden formularse de una forma más general para **sistemas** de ecuaciones diferenciales de primer orden. Más concretamente, siendo I un intervalo de \mathbb{R} de la forma $[t_0, t_0 + T]$ y siendo \mathbf{f} una función continua definida en $I \times \mathbb{R}^m$ y con valores en \mathbb{R}^m puede considerarse el problema siguiente:

Hallar una función continua y diferenciable $\mathbf{y}(t)$ definida en I y con valores en \mathbb{R}^m verificando:

$$(P.V.I.) \quad \begin{cases} \mathbf{y}'(t) &= \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \quad \forall t \in I, \\ \mathbf{y}(t_0) &= \mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^m. \end{cases}$$

Cabe señalar además que numerosos problemas de valor inicial se formulan mediante ecuaciones diferenciales ordinarias de orden superior a 1 de la forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} y^{(p)}(t) = f(t, y(t), y'(t), y''(t), \dots, y^{(p-1)}(t)), \quad t \in [t_0, t_0 + T] \\ y(t_0) = y_0 \\ y'(t_0) = y_0^{(1)} \\ y''(t_0) = y_0^{(2)} \\ \dots \quad \dots \quad \dots \\ y^{(p-1)}(t_0) = y_0^{(p-1)} \end{array} \right.$$

Tales tipos de P.V.I de orden superior a 1 pueden ser reducidos a sistemas de p ecuaciones diferenciales de primer orden denominando:

$$z_1(t) = y(t), \quad z_2(t) = y'(t), \quad z_3(t) = y''(t), \quad \dots, \quad z_p(t) = y^{(p-1)}(t)$$

con lo que el problema anterior se reescribe como:

$$(P.V.I.) \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{z}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{z}(t)), \quad \forall t \in I, \\ \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}^0 \in \mathbb{R}^m \end{array} \right.$$

siendo:

$$\mathbf{z}(t) = (z_1(t), z_2(t), \dots, z_p(t))^T$$

Hallar una función $y(x)$ verificando:

$$\begin{cases} y'''(x) + y(x)y''(x) = 0, & x \geq 0 \\ y(0) = 0, \quad y'(0) = 0, \quad y''(0) = \alpha \end{cases}$$

Este problema es equivalente al P.V.I. de primer orden:

$$\begin{cases} z_1'(x) = z_2(x), & x \geq 0 \\ z_2'(x) = z_3(x), & x \geq 0 \\ z_3'(x) = -z_1(x).z_3(x), & x \geq 0 \\ z_1(0) = 0, \quad z_2(0) = 0, \quad z_3(0) = \alpha \end{cases}$$

donde se ha denotado por $z_1(x) = y(x)$, $z_2(x) = y'(x)$, $z_3(x) = y''(x)$.

1. Introducción. Métodos para resolver PVI

- a. Métodos gráficos: método de las isoclinas
- b. Métodos analíticos
- c. Métodos basados en desarrollos de Taylor

$$\begin{cases} y'''(x) + y(x)y''(x) = 0, & x \geq 0 \\ y(0) = 0, \quad y'(0) = 0, \quad y''(0) = 0,47 \end{cases}$$

$$y(t) = y(0) + ty'(0) + \frac{t^2}{2}y''(0) + \frac{t^3}{3!}y'''(0) + \frac{t^4}{4!}y^{(iv)}(0) + \\ + \frac{t^5}{5!}y^{(v)}(0) + \frac{t^6}{6!}y^{(vi)}(0) + \frac{t^7}{7!}y^{(vii)}(0) + \frac{t^8}{8!}y^{(viii)}(0) + \dots$$

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 0, \quad y''(0) = 0,47$$

y

$$y'''(t) = -y(t)y''(t) \quad \Rightarrow \quad y'''(0) = -y(0)y''(0) = (0)0,47 = 0$$

d. Método de Picard

$$\begin{cases} y'(t) = 2e^t - y & t \geq 0 \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

$$y_0(t) = y_0$$

$$y_1(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(x, y_0(x)) dx$$

.....

$$y_{n+1}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(x, y_n(x)) dx$$

$$y_0(t) = y(0)$$

$$= 1$$

$$y_1(t) = 1 + \int_0^t (2e^x - 1) dx$$

$$= 2e^t - t - 1$$

$$y_2(t) = 1 + \int_0^t (2e^x - 2e^x + x + 1) dx$$

$$= \frac{t^2}{2} + t + 1$$

$$y_3(t) = 1 + \int_0^t (2e^x - \frac{x^2}{2} - x - 1) dx$$

$$= 2e^t - \frac{t^3}{3!} - \frac{t^2}{2} - t - 1$$

$$y_{2n}(t) = \sum_{i=0}^{2n} \frac{t^i}{i!} \quad \Rightarrow \quad \lim_{n \rightarrow \infty} y_{2n}(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{2n} \frac{t^i}{i!} = e^t$$

e. Métodos numéricos: métodos en diferencias finitas

2. Métodos de Euler explícito, implícito y theta-métodos (Crank-Nicolson)

Consideramos de nuevo el problema de valor inicial

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), & t \in [t_0, t_0 + T] \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

y una subdivisión del intervalo $[t_0, t_0 + T]$ mediante los puntos:

$$t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n < t_{n+1} < \dots < t_N = t_0 + T$$

Designaremos por h_n a los valores $(t_{n+1} - t_n)$ y por y_n a las aproximaciones que se vayan obteniendo de $y(t_n)$, ($n = 0, 1, \dots, N$).

Obtención del método de Euler mediante fórmulas de integración numérica

Es conocido que la solución del problema de valor inicial verificará:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t) dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \Rightarrow y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt$$

fórmula de integración numérica a emplear podría ser la fórmula del rectángulo con soporte en el extremo izquierdo del intervalo de integración, es decir:

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + h_n f(t_n, y(t_n)) \Rightarrow y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n)$$

Con ello puede plantearse el siguiente algoritmo de cálculo:

Dado $y_0 = y(t_0)$:

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n) \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N - 1)$$

Este esquema de cálculo de las soluciones aproximadas del P.V.I. se conoce con el nombre **método de Euler explícito** en honor al matemático Leonard Euler (nacido en Basilea (Suiza) en 1707 y muerto en San Petersburgo (Rusia)

en 1783). En el proceso de obtención del método se ha utilizado una de las múltiples formas de aproximar la integral que aparece en la expresión formal de la solución. Pero podrían haberse considerado muchas otras. Por ejemplo, si se hubiera utilizado la fórmula del rectángulo soportada en el extremo derecho del intervalo se obtendría:

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + h_n f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) \Rightarrow y_{n+1} - h_n f(t_{n+1}, y_{n+1}) = y_n$$

con lo que podría plantearse el denominado **método de Euler implícito** (o **retrógrado**) consistente en:

Dado $y_0 = y(t_0)$:

$$\text{Resolver: } y_{n+1} - h_n f(t_{n+1}, y_{n+1}) = y_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N - 1)$$

Análogamente, si se hubiera evaluado la integral anterior mediante el método del trapecio, se obtendría el esquema:

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + \frac{h_n}{2} (f(t_n, y(t_n)) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow y_{n+1} - \frac{h_n}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}) = y_n + \frac{h_n}{2} f(t_n, y_n)$$

del que se infiere el algoritmo de cálculo:

Dado $y_0 = y(t_0)$:

$$\text{Resolver: } y_{n+1} - \frac{h_n}{2} f(t_{n+1}, y_{n+1}) = y_n + \frac{h_n}{2} f(t_n, y_n), \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N - 1)$$

El esquema, también implícito, dado por la expresión anterior se designa habitualmente con el nombre de esquema de **Crank-Nicholson**.

Los esquemas de Euler explícito, de Euler implícito y de Crank-Nicholson son un caso particular de la familia de esquemas que se obtienen ponderando mediante un parámetro $\theta \in [0, 1]$ el peso dado a $f(t_n, y(t_n))$ frente al dado a $f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))$ en la fórmula de integración numérica con lo que se obtendrían las expresiones:

$$y(t_{n+1}) \approx y(t_n) + h_n ((1 - \theta) f(t_n, y(t_n)) + \theta f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow y_{n+1} - \theta h_n (f(t_{n+1}, y_{n+1})) = y_n + (1 - \theta) h_n f(t_n, y_n)$$

que corresponden a los métodos conocidos con el nombre de **θ -métodos**. Para el caso en que $\theta = 0$ se recupera el método de Euler explícito, para el caso $\theta = 1$ el de Euler implícito y para $\theta = 0,5$ el de Crank-Nicholson. En general si $\theta \neq 0$ el método es implícito y exige, en cada paso, la resolución de una ecuación de tipo algebraico para determinar y_{n+1} .

2. Métodos de Euler explícito, implícito y theta-métodos (Crank-Nicolson). Ejemplo 1

Con el objeto de poder comparar la solución aproximada con la solución exacta comencemos considerando un problema de valor inicial sencillo: regido por una EDO de variables separadas. Ello nos permitirá ilustrar la práctica del método y realizar algunas primeras consideraciones.

Considérese el P.V.I. formulado por:

$$\begin{cases} y'(t) = 2t + e^t, & t \in [0, 1] \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

La solución analítica de este P.V.I. está dada por:

$$y(t) = -1 + t^2 + e^t$$

y con ella podremos comparar el comportamiento de los métodos planteados. Resolvamos el problema por el método de Euler explícito determinando los valores de la solución aproximada en los instantes $t_0 = 0,0$, $t_1 = 0,1$, $t_2 = 0,2$, $t_3 = 0,3$, $t_4 = 0,4$, ..., $t_9 = 0,9$, y $t_{10} = 1$, siendo la longitud del paso de integración en todas las etapas de cálculo $h = 0,1$. Con ello el esquema de cálculo, según vimos anteriormente puede resumirse en:

$$\begin{aligned} y_0 &= 0 \\ y_{n+1} &= y_n + 0,1 (2t_n + e^{t_n}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y_0 &= 0 \\
y_{n+1} &= y_n + 0,1 (2 t_n + e^{t_n}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 9)
\end{aligned}$$

Por tanto los primeros valores calculados serán:

$$\begin{aligned}
y_0 &= 0 \\
y_1 &= y_0 + 0,1 (2 t_0 + e^{t_0}) = 0 + 0,1 (2 \cdot 0 + e^0) = 0,1 \\
y_2 &= y_1 + 0,1 (2 t_1 + e^{t_1}) = 0,1 + 0,1 (2 \cdot 0,1 + e^{0,1}) = 0,23052 \\
y_3 &= y_2 + 0,1 (2 t_2 + e^{t_2}) = 0,23052 + 0,1 (2 \cdot 0,2 + e^{0,2}) = 0,39265 \\
y_4 &= y_3 + 0,1 (2 t_3 + e^{t_3}) = 0,39265 + 0,1 (2 \cdot 0,3 + e^{0,3}) = 0,58764
\end{aligned}$$

Con el mismo paso y para los mismos instantes de cálculo puede obtenerse la solución mediante el método de Euler implícito:

$$\begin{aligned}
y_0 &= 0 \\
y_{n+1} &= y_n + 0,1 (2 t_{n+1} + e^{t_{n+1}}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 9)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + 0,1 (2 t_1 + e^{t_1}) = 0 + 0,1 (2 \cdot 0,1 + e^{0,1}) = 0,13052 \\
y_2 &= y_1 + 0,1 (2 t_2 + e^{t_2}) = 0,13052 + 0,1 (2 \cdot 0,2 + e^{0,2}) = 0,29266 \\
y_3 &= y_2 + 0,1 (2 t_3 + e^{t_3}) = 0,29266 + 0,1 (2 \cdot 0,3 + e^{0,3}) = 0,48764 \\
y_4 &= y_3 + 0,1 (2 t_4 + e^{t_4}) = 0,48764 + 0,1 (2 \cdot 0,4 + e^{0,4}) = 0,65182
\end{aligned}$$

valores que son sensiblemente mayores que los obtenidos por el método explícito.

Resolvamos ahora por el método de Crank-Nicholson. Este esquema, sobre este P.V.I. se formula:

$$\begin{aligned}y_0 &= 0 \\y_{n+1} &= y_n + 0,05 [(2t_n + e^{t_n}) + (2t_{n+1} + e^{t_{n+1}})], \quad (n = 0, 1, 2, \dots, 9)\end{aligned}$$

y los primeros valores a los que nos conduce son:

$$y_0 = 0$$

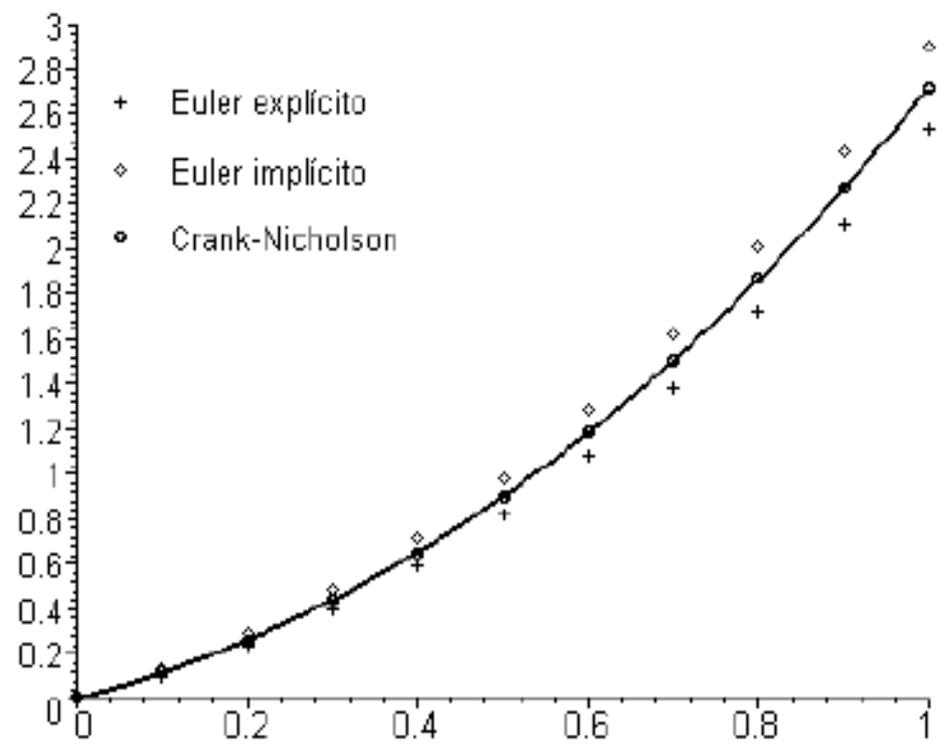
$$\begin{aligned}y_1 &= y_0 + 0,05(2(t_0 + t_1) + e^{t_0} + e^{t_1}) = \\&= 0 + 0,05(0,2 + 1 + e^{0,1}) = 0,11526\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}y_2 &= y_1 + 0,05(2(t_1 + t_2) + e^{t_1} + e^{t_2}) = \\&= 0,11526 + 0,05(0,6 + e^{0,1} + e^{0,2}) = 0,26158\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}y_3 &= y_2 + 0,05(2(t_2 + t_3) + e^{t_2} + e^{t_3}) = \\&= 0,26158 + 0,05(1,0 + e^{0,2} + e^{0,3}) = 0,44015\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}y_4 &= y_3 + 0,05(2(t_3 + t_4) + e^{t_3} + e^{t_4}) = \\&= 0,26158 + 0,05(1,4 + e^{0,3} + e^{0,4}) = 0,65182\end{aligned}$$

Estos valores son intermedios entre los obtenidos por los métodos anteriores. En este caso es sencillo verificar cuáles son los valores más precisos pues la solución analítica es conocida. Podemos representar los valores obtenidos junto a la solución exacta obteniendo:



2. Métodos de Euler explícito, implícito y theta-métodos (Crank-Nicolson). Ejemplo 2: estabilidad de esquemas

$$\begin{cases} y'(t) = -ky(t), & t > 0 \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad y(t) = e^{-kt}$$

a) Euler explícito:

$$y_{n+1} = y_n + h(-k y_n) \Rightarrow y_{n+1} = (1 - kh) y_n$$

Condicionalmente estable

y por recursión:

$$y_{n+1} = (1 - kh)^{n+1} y_0$$

$$h \in \left] 0, \frac{1}{k} \right[$$

b) Euler implícito:

$$y_{n+1} = y_n + h(-k y_{n+1}) \Rightarrow y_{n+1} = \left(\frac{1}{1 + kh} \right) y_n$$

y por recursión:

$$y_{n+1} = \left(\frac{1}{1 + kh} \right)^{n+1} y_0$$

Incondicionalmente estable

c) θ -métodos:

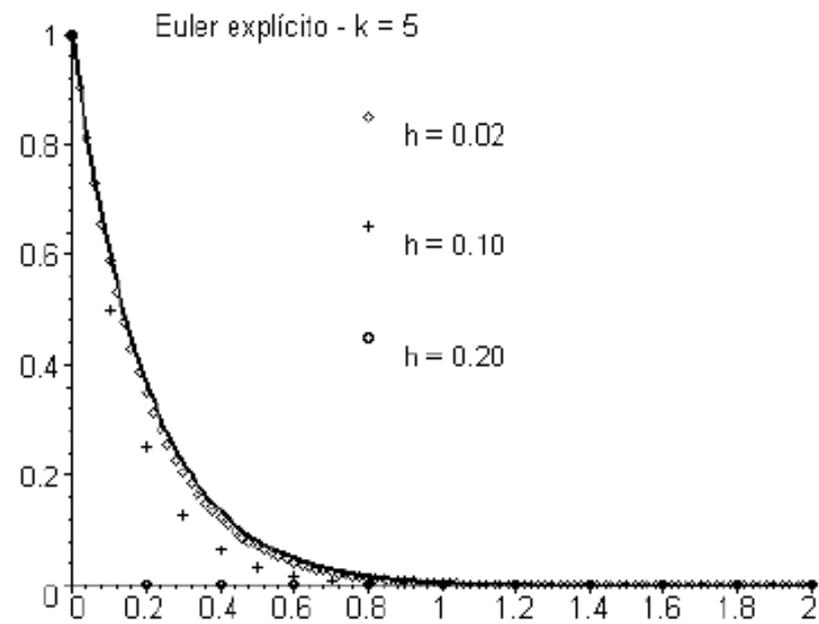
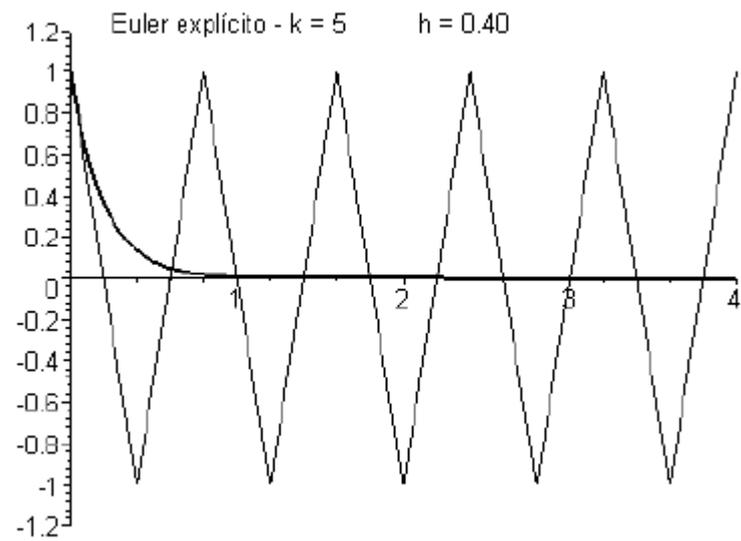
$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n - h((1 - \theta)k y_n + \theta k y_{n+1}) \Rightarrow \\ \Rightarrow y_{n+1} &= \left(\frac{1 - (1 - \theta)k h}{1 + \theta k h} \right) y_n\end{aligned}$$

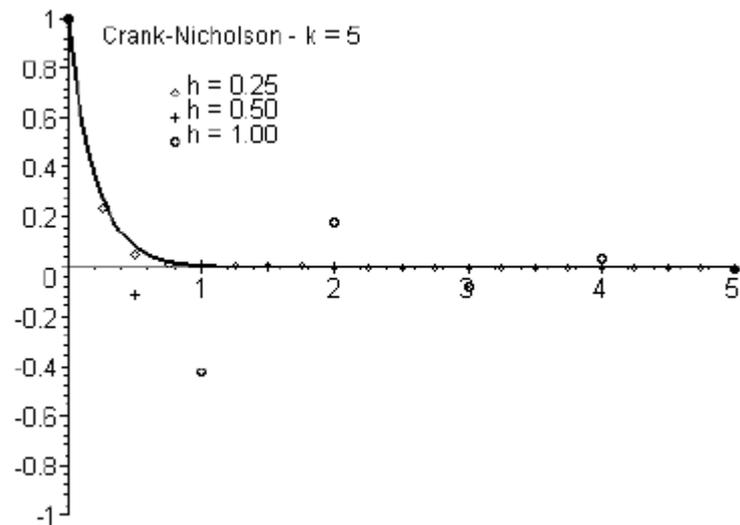
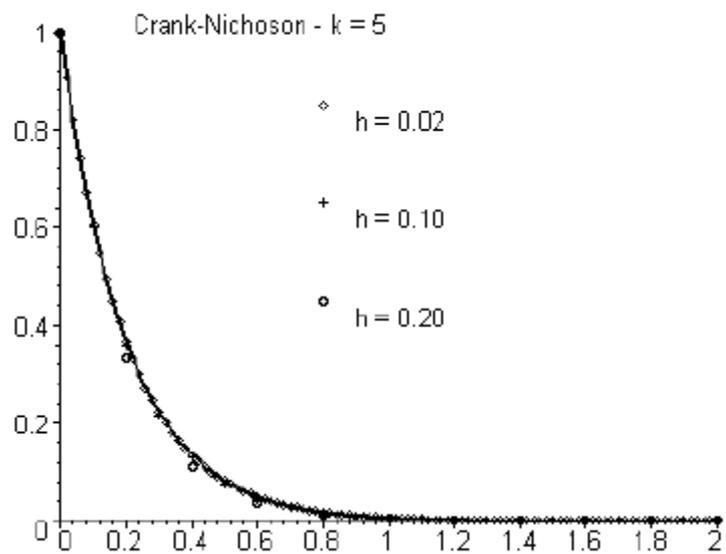
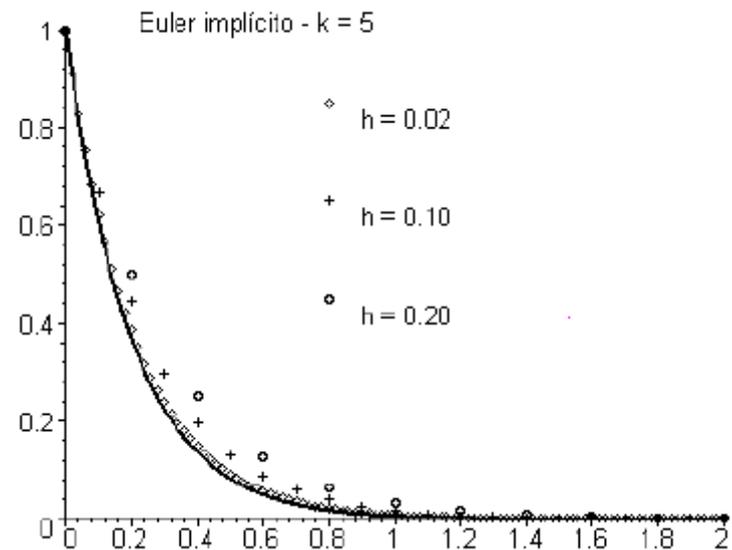
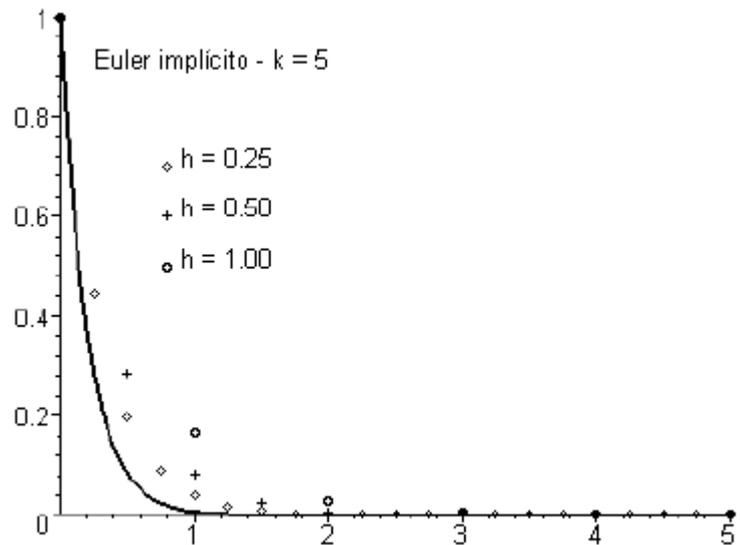
y por recursión:

$$y_{n+1} = \left(\frac{1 - (1 - \theta)k h}{1 + \theta k h} \right)^{n+1} y_0$$

Condicionalmente estable

$$\frac{k h}{1 + \theta k h} < 1 \Rightarrow (1 - \theta)k h < 1 \Rightarrow h < \frac{1}{k(1 - \theta)}$$





2. Métodos de Euler explícito, implícito y theta-métodos (Crank-Nicolson). Ejemplo 3: posible no unicidad en esquemas implícitos

$$\begin{cases} y'(t) = -y^2(t), & t > 0 \\ y(0) = 1 \end{cases} \quad y(t) = \frac{1}{1+t}$$

Si aplicamos al problema de este ejemplo el método de Euler implícito, con paso de integración constante (h), obtendremos:

$$y_{n+1} + h y_{n+1}^2 = y_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots, N-1)$$

Tomemos, por ejemplo, $h = 0,1$ y calculemos el valor aproximado de la solución en $t_1 = 0,1$.

$$y_1 + 0,1 y_1^2 = 1 \Rightarrow 0,1 y_1^2 + y_1 - 1 = 0$$

ecuación de segundo grado que admite por soluciones:

$$y_1 = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 0,4}}{0,2}$$

es decir los valores:

$$-10,91607978\dots, \quad 0,91607978\dots$$

3. Métodos predicción-corrección

Fase de predicción mediante Euler explícito:

$$y_1^{(0)} = y_0 - h y_0^2 = 1 - 0,1 (1)^2 = 0,9$$

Fase de corrección mediante Euler implícito (resolviendo por el método de aproximaciones sucesivas):

$$y_1^{(iter+1)} = y_0 - h \left(y_1^{(iter)} \right)^2 \quad (iter = 0, 1, 2, \dots)$$

Esta estrategia puede extenderse a esquemas numéricos muy diferentes, combinando un esquema explícito de predicción y un esquema implícito de corrección. Por ejemplo, si se deseara utilizar un θ -método con $\theta > 0$ para la fase correctora y el método de Euler explícito para la fase predictora, el esquema de cálculo sería:

Fase predictora (Euler explícito):

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + h_n f(t_n, y_n)$$

Fase correctora (θ -método combinado con aproximaciones sucesivas):

$$y_{n+1}^{(iter+1)} = y_n + (1 - \theta) h_n f(t_n, y_n) + \theta h_n f(t_{n+1}, y_{n+1}^{(iter)}) \quad (iter = 0, 1, \dots)$$

Observación 2.2.4 *De hecho algunos métodos de cálculo muy utilizados en la práctica, y que posteriormente nos reencontraremos, podrían interpretarse como un esquema predictor corrector en los que se realizan “pocas” iteraciones del método de aproximaciones sucesivas en la fase de corrección. Es el caso por ejemplo de combinar el método de Euler explícito en la fase de predicción y realizar una sólo iteración en la fase correctora utilizando el método de Crank-Nicholson, lo que nos conduce a:*

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + h_n f(t_n, y_n)$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h_n}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1}^{(0)}))$$

por lo que, resumiendo las dos etapas en una única expresión resulta:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h_n}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_n + h_n f(t_n, y_n)))$$

*Este esquema de cálculo recibe el nombre de **método de Heun** y lo volveremos a deducir al examinar los métodos de Runge-Kutta.*

4. Estudio general de un método de pasos libres

$$(P.V.I.) \left\{ \begin{array}{l} y'(t) = f(t, y(t)) \quad t \in [t_0, t_N] \\ y(t_0) = y_0 \end{array} \right\} \quad y_{n+1} = y_n + h_n g(t_n, y_n, h_n)$$

Ejemplo 2.3.1 *En el método de Euler explícito:*

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n)$$

se tiene que $g(t, y, h) = f(t, y)$.

Definición 2.3.1 *Se denomina error de consistencia del método (2.3) en el punto t_{n+1} al valor:*

$$E_{n+1} = y(t_{n+1}) - y(t_n) - h_n g(t_n, y(t_n), h_n)$$

Esta definición del error de consistencia nos permite observar que por tal concepto se entiende el error que se cometería con el método si en el instante t_n se partiera de la solución exacta en lugar de la solución aproximada y, por tanto, sin tener en consideración los errores cometidos en etapas anteriores del método. Puesto que la solución aproximada verifica:

$$y_{n+1} - y_n - h_n g(t_n, y_n, h_n) = 0$$

Definición 2.3.2 Se dice que el método (2.3) es **consistente** con la ecuación diferencial del problema (P.V.I.) cuando para toda solución de dicha ecuación diferencial se verifica que:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left(\sum_{n=1}^N |E_n| \right) = 0$$

Asimismo se dice que el método (2.3) es **consistente de orden k** con la EDO del problema (P.V.I.) cuando para todo valor de h perteneciente a un intervalo $]0, H[$ se verifica:

$$\exists C \in \mathbb{R} / \sum_{n=1}^N |E_n| \leq C h^k$$

donde la constante C depende sólomente de $y(t)$ y de $f(t, y(t))$.

Definición 2.3.3 Se denomina **error del método** (2.3) en el punto t_n al valor:

$$e_n = y(t_n) - y_n \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

Definición 2.3.4 Se dice que el método (2.3) es **convergente** cuando se verifica que:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \left(\text{Sup}_{0 \leq n \leq N} \{|e_n|\} \right) = 0$$

Definición 2.3.5 Se dice que el método (2.3) es **estable** cuando para cualquier terna de sucesiones $\{y_n\}_{n=0}^N$, $\{z_n\}_{n=0}^N$ y $\{E_n\}_{n=1}^N$ verificando las relaciones:

$$y_{n+1} = y_n + h_n g(t_n, y_n, h_n)$$

$$z_{n+1} = z_n + h_n g(t_n, z_n, h_n) + E_{n+1}$$

se puede encontrar una constante M tal que:

$$\text{Sup}_{0 \leq n \leq N} \{|z_n - y_n|\} \leq M \left[|z_0 - y_0| + \sum_{n=1}^N |E_n| \right] \quad \forall h \in]0, H]$$

Teorema 2.3.1 Si el método definido en (2.3) es un método estable y consistente entonces si el esquema de cálculo se inicializa con el valor $y_0 = y(t_0)$ el método también es convergente.

5. Métodos Runge-Kutta

Los métodos de Runge-Kutta representan el ejemplo más clásico de los métodos de pasos libres.

2.4.1. Descripción.

Consideramos el problema de valor inicial (*P.V.I.*) y la subdivisión del intervalo $[t_0, t_N]$ generando los puntos $t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_N$, y con subintervalos $[t_n, t_{n+1}]$ de longitud h_n ($n = 0, 1, \dots, N - 1$).

Siendo $y(t_n)$ el valor de la solución en t_n , el valor exacto de la solución en t_{n+1} puede estimarse mediante la expresión:

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \quad (2.4)$$

Una forma de obtener aproximaciones de dicho valor consistirá en aproximar la integral que aparece en 2.4 mediante una fórmula de integración numérica:

$$y_{n+1} = y_n + h_n \sum_{j=1}^p a_j f(t_{n,j}, y_{n,j}) \quad (2.5)$$

El problema que plantea el uso de (2.5) es cómo evaluar $y_{n,j}$. Para ello, de forma similar a (2.4) se considerará que:

$$y(t_{n,j}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n,j}} f(t, y(t)) dt, \quad j = 1, 2, \dots, p \quad (2.6)$$

por lo que una aproximación de dichos valores puede obtenerse, nuevamente, aproximando la integral anterior. Y en los métodos de Runge-Kutta esta aproximación se realiza utilizando los mismos puntos que en la expresión (2.5), es decir:

$$y_{n,j} = y_n + h_n \sum_{i=1}^p b_{j,i} f(t_{n,i}, y_{n,i}) \quad (j = 1, \dots, p) \quad (2.7)$$

donde $h_n b_{j,k}$ ($j, k = 1, \dots, p$) es el peso otorgado al punto $t_{n,k}$ en la fórmula de integración numérica utilizada para aproximar el valor de $y(t)$ en $t_{n,j}$.

(2.5). Habitualmente, los puntos $t_{n,j}$ se suelen definir mediante una expresión del tipo:

$$t_{n,j} = t_n + c_j h_n \quad (j = 1, \dots, p)$$

y el esquema se define mediante la tabla siguiente:

c_1	$b_{1,1}$	$b_{1,2}$	s	$b_{1,p}$
c_2	$b_{2,1}$	$b_{2,2}$	s	$b_{2,p}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
c_p	$b_{p,1}$	$b_{p,2}$	s	$b_{p,p}$
	a_1	a_2	s	a_p

Un primer ejemplo.

Puede diseñarse un método de Runge-Kutta en el que la fórmula que nos proporcione y_{n+1} utilice la fórmula de Simpson:

$$\int_a^b \phi(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \left(\phi(a) + 4\phi\left(\frac{a+b}{2}\right) + \phi(b) \right)$$

Para ello, se tomará $p = 3$ y en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ los puntos de integración serán:

$$\begin{aligned} t_{n,1} &= t_n && (\rightarrow c_1 = 0) \\ t_{n,2} &= t_n + 0,5 h_n && (\rightarrow c_2 = 0,5) \\ t_{n,3} &= t_n + h_n && (\rightarrow c_3 = 1) \end{aligned}$$

y los pesos de integración en la fórmula considerada serán:

$$a_1 = \frac{1}{6}, \quad a_2 = \frac{4}{6}, \quad a_3 = \frac{1}{6}$$

$$y_{n+1} = y_n + h_n \left(\frac{1}{6} f(t_{n,1}, y_{n,1}) + \frac{4}{6} f(t_{n,2}, y_{n,2}) + \frac{1}{6} f(t_{n,3}, y_{n,3}) \right)$$

Para emplear la fórmula anterior es necesario evaluar: $y_{n,1}$ ($= y_n$), $y_{n,2}$ e $y_{n,3}$. Para ello se sabe que:

$$\begin{aligned} y_{n,1} &= y_n \\ y_{n,2} &= y_n + \int_{t_n}^{t_{n,2}} f(t, y(t)) dt \\ y_{n,3} &= y_n + \int_{t_n}^{t_{n,3}} f(t, y(t)) dt \end{aligned}$$

y evaluando la primera de las integrales mediante la fórmula del trapecio:

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n,2}} f(t, y(t)) dt &\approx \frac{t_{n,2} - t_n}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n,2}, y_{n,2})) \\ &= \frac{h_n}{4} (f(t_n, y_n) + f(t_{n,2}, y_{n,2})) \end{aligned}$$

0	0	0	0
1/2	1/4	1/4	0
1	0	1	0
	1/6	4/6	1/6

y la segunda mediante el método del punto medio:

$$\begin{aligned} \int_{t_n}^{t_{n,3}} f(t, y(t)) dt &\approx (t_{n,3} - t_n) f(t_{n,2}, y_{n,2}) \\ &= h_n f(t_{n,2}, y_{n,2}) \end{aligned}$$

resultará:

$$\begin{aligned} y_{n,1} &= y_n && (\rightarrow b_{1,1} = 0, b_{1,2} = 0, b_{1,3} = 0) \\ y_{n,2} &= y_n + \frac{h_n}{4} (f(t_n, y_n) + f(t_{n,2}, y_{n,2})) && \left(\rightarrow b_{2,1} = \frac{1}{4}, b_{2,2} = \frac{1}{4}, b_{2,3} = 0 \right) \\ y_{n,3} &= y_n + h_n f(t_{n,2}, y_{n,2}) && (\rightarrow b_{3,1} = 0, b_{3,2} = 1, b_{3,3} = 0) \end{aligned}$$

El método de Euler explícito

El **método de Euler**, estudiado en el apartado 3, puede considerarse como un caso particular de los métodos de Runge-Kutta en el que $p = 1$ y:

$$\begin{array}{c} 0 \\ \boxed{0} \\ 1 \end{array}$$

El método de Euler modificado y el método de Heun.

Siendo α un número real, el método dado por:

$$\begin{array}{c} 0 \\ \alpha \\ 1-1/(2\alpha) \quad 1/(2\alpha) \end{array} \begin{array}{|c|c|} \hline 0 & 0 \\ \hline \alpha & 0 \\ \hline \end{array}$$

$$\alpha = 0,5,$$

Método de Euler modificado

$$\alpha = 1,0,$$

Método de Heun

El método de Runge-Kutta clásico (de orden 4)

El **método de Runge-Kutta clásico** responde a la tabla:

$$\begin{array}{c} 0 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1 \\ 1/6 \quad 2/6 \quad 2/6 \quad 1/6 \end{array} \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ \hline 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}$$

6. Ejercicios resueltos

Ejercicio 3.1 *Se considera el problema de valor inicial (PVI):*

$$\begin{cases} y' = 2t \cos^2(y), \\ y(0) = 0. \end{cases}$$

En el intervalo temporal $[0, 0.5]$, obtener un valor aproximado de la solución $y(t)$ en el tiempo $t = 0.5$, considerando una longitud de paso constante $h = 0.5$ mediante:

- (a) El esquema numérico de Euler implícito utilizando dos iteraciones del método de Newton-Raphson para resolver la ecuación no lineal que pueda surgir.*
- (b) El método de Heun.*
- (c) Hallar el error cometido en los apartados anteriores.*

Solución.

(a) Puesto que el tamaño de discretización es $h = 0.5$, sólo tenemos que hacer un paso. En $t_0 = 0$, tenemos $y_0 = 0$. Para $t_1 = 0.5$, seguimos el esquema de Euler implícito y se tiene:

$$y_1 = y_0 + hf(t_1, y_1) = 0 + 0.5 \cos^2(y_1),$$

por tanto la solución y_1 es raíz de la ecuación no lineal

$$x - \frac{1}{2} \cos^2(x) = 0,$$

que debemos resolver haciendo dos iteraciones con el método de Newton-Raphson. Para ello primero debemos elegir una semilla con la que iniciar el esquema. Observamos que en el intervalo $I_0 = (0.4, 0.5)$ se encuentra la raíz puesto que $f(0.4)f(0.5) < 0$. Realizando 3 iteraciones con el método de bipartición tenemos $x^* = 0.4125$ consiguiendo un error inferior a 0.02. Así pues tomaremos como semilla para el esquema de Newton-Raphson, $x_0 = 0.4125$. De este modo:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 0.41772151,$$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 0.41771479.$$

Por tanto, tomamos $y_1 = 0.4177$.

(b) Ahora lo resolvemos con Heun dado por el siguiente esquema predicción corrección, teniendo en cuenta que $t_0 = 0$, $t_1 = 0.5$ y $y_0 = 0$, tenemos que

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}f(t_0, y_0) + \frac{h}{2}f(t_1, y_0 + hf(t_0, y_0)) = 0.25.$$

(c) Calculamos la solución exacta integrando la EDO (de variables separadas), para obtener que:

$$y(t) = \arctan(t^2).$$

Por tanto $y(0.5) = \arctan(0.25) = 0.2449$. Por último, calculamos el error cometido con cada uno de los métodos:

$$e_{EI} = |0.2449 - 0.4177| = 0.1728 \text{ (error con Euler implícito)}$$

$$e_H = |0.25 - 0.2449| = 0.0051 \text{ (error con Heun)}$$

El método de Heun ha sido más preciso, en cualquier caso hay que tener en cuenta que $h = 0.5$ es un paso grande.

Ejercicio 3.5 *Se considera el problema de valor inicial (PVI):*

$$\begin{cases} y' = 2te^{-y}, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

En el intervalo temporal $[0, 1]$, utilizar el esquema numérico dado por la siguiente tabla Runge-Kutta,

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 0.5 & 0.5 \end{array}$$

para obtener un valor aproximado de la solución $y(t)$ en el tiempo $t = 1$, considerando una longitud de paso constante $h = 0.5$. Hallar el error cometido.

Solución.

Primero calcularemos la solución analítica para poder calcular posteriormente el error cometido. Se trata de una EDO de variables separadas y por tanto se resuelve como sigue,

$$\frac{e^y}{dy} = 2tdt \implies e^y = \frac{t^2}{2} + C \implies y(t) = \ln(t^2 + K)$$

donde la constante C se tiene que elegir de modo que $y(0) = 1$. Entonces resulta que $C = e$ y la solución exacta es $y(t) = \ln(t^2 + e)$. Por último tenemos que $y(1) = \ln(1 + e) = 1.313261$.

Pasemos ahora a calcular el valor aproximado con el método numérico dado por la tabla. Puesto que $h = 0.5$, tendremos que hacer dos iteraciones o pasos:

Paso 1 ($t = 0.5$). Tenemos que $t_0 = 0$ e $y_0 = y(0) = 1$. Aplicamos el esquema y se obtiene que:

$$t_{0,1} = t_0 + 0 \cdot h = t_0 = 0 \quad (\rightarrow c_1 = 0),$$

$$t_{0,2} = t_0 + 1 \cdot h = 0.5 \quad (\rightarrow c_2 = 1),$$

$$y_{0,1} = y_0 + b_{11}hf(t_{0,1}, y_{0,1}) + b_{12}hf(t_{0,2}, y_{0,2}) = y_0 = 1,$$

$$y_{0,2} = y_0 + b_{21}hf(t_{0,1}, y_{0,1}) + b_{22}hf(t_{0,2}, y_{0,2}) = y_0 + hf(0, 1) = 1,$$

y finalmente, considerando los pesos de integración $a_1 = 0.5$ y $a_2 = 0.5$,

$$y_1 = y_0 + a_1hf(t_{0,1}, y_{0,1}) + a_2hf(t_{0,2}, y_{0,2}) = 1.091969.$$

Paso 2 ($t = 1$). Partimos de $t_1 = 0.5$ e $y_1 = 1.091969$. Aplicamos el esquema y se obtiene que:

$$t_{1,1} = t_1 + 0 \cdot h = t_1 = 0.5 \quad (\rightarrow c_1 = 0),$$

$$t_{1,2} = t_1 + 1 \cdot h = 1 \quad (\rightarrow c_2 = 1),$$

$$y_{1,1} = y_1 + b_{11}hf(t_{1,1}, y_{1,1}) + b_{12}hf(t_{1,2}, y_{1,2}) = y_1 = 1.091969,$$

$$y_{1,2} = y_1 + b_{21}hf(t_{1,1}, y_{1,1}) + b_{22}hf(t_{1,2}, y_{1,2}) = y_1 + hf(0.5, 1.091969) = 1.259737,$$

y finalmente, considerando los pesos de integración $a_1 = 0.5$ y $a_2 = 0.5$,

$$y_2 = y_1 + a_1hf(t_{1,1}, y_{1,1}) + a_2hf(t_{1,2}, y_{1,2}) = 1.317722.$$

El valor aproximado de $y(0.5)$ obtenido por el método de Heun es $y_2 = 1.317722$.

Por último, calculamos el error cometido

$$e = |y_2 - y(0.5)| = |1.317722 - 1.313261| = 4.46093 \cdot 10^{-3}.$$

Ejercicio 3.6 Se considera el problema de valor inicial (PVI):

$$\begin{cases} y' = 2\sqrt{y}(2 + 2t), \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

En el intervalo temporal $[0, 0.5]$, utilizar el esquema numérico dado por la siguiente tabla (tipo Runge -Kutta):

0	0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
1	-1	2	0
	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$

para obtener un valor aproximado de la solución $y(t)$ en el tiempo $t = 0.5$, considerando una longitud de paso constante $h = 0.5$. Hallar el error cometido.

Solución.

Puesto que $h = 0.5$, sólo necesitaremos hacer un paso para llegar a $t = 0.5$, por tanto, siguiendo el esquema, se tiene que el valor aproximado de la solución en $t = 0.5$, denotado por y_1 , se calcula como sigue:

$$\begin{aligned} t_{0,1} &= t_0 = 0, \\ t_{0,2} &= t_0 + h = 0.25, \\ t_{0,3} &= t_0 + h = 0.5, \end{aligned}$$

Obtenemos que la solución exacta es:

$$y(t) = (t + 1)^4$$

$$y_{0,1} = y_0 = 1,$$

$$y_{0,2} = y_0 + \frac{1}{2}hf(t_{0,1}, y_{0,1}) = 2,$$

$$y_{0,3} = y_0 + (-h)f(t_{0,1}, y_{0,1}) + 2hf(t_{0,2}, y_{0,2}) = 6.07106,$$

$$y(0.5) = (1.5)^4 = 5.0625,$$

$$e = |5.3931 - 5.0625| = 0.3036.$$

y finalmente

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{6}(f(t_{0,1}, y_{0,1}) + 4f(t_{0,2}, y_{0,2}) + f(t_{0,3}, y_{0,3})) = 5.3937.$$

7. Resolución con Octave

$$\begin{cases} y' = f(t, y), & t \in [t_0, t_N] \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

primeramente definimos la función $f(t, y)$ en la variables t, y como una función inline o anónima, el intervalo en el que se presenta el problema $[t_0, t_N]$ y la condición inicial y_0 como:

```
> f = inline('...', 't, y')
> intienpo = [t0, tN]
> y0=valorini = ...
```

Después se especifica el número de intervalos, `npasos`, del mallado utilizado, es decir, el número de intervalos en los que se divide el intervalo $[t_0, t_N]$ una vez conocido el paso de discretización h (que vamos a tomar siempre constante). Es decir:

```
> npasos =  $\frac{tN-t0}{h}$ 
```

y resolvemos el PVI por medio de alguno de los siguientes métodos:

Método de Euler Explícito

```
> [soluciont, soluciony] = eulerexplicito(f, intienpo, valorini, npasos)
```

Método de Euler Implícito

```
> [soluciont, soluciony] = eulerimplicito(f, intienpo, valorini, npasos)
```

Método de Crank-Nicolson

```
> [soluciont, soluciony] = cranknicolson(f, intienpo, valorini, npasos)
```

Método de Heun

```
> [soluciont, soluciony] = heun(f, intienpo, valorini, npasos)
```

Método de Simpson

```
> [soluciont, soluciony] = rungekuttao3(f, intienpo, valorini, npasos)
```

Ejercicio 3.8 (*Octave*) Se considera el problema de valor inicial:

$$\begin{cases} y' = y - \sin(t) + \cos(t) \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

En el intervalo temporal $[0, 2]$, utilizar los esquemas numéricos de Euler explícito, Euler implícito y Crank-Nicolson para resolver el problema de valor inicial tomando un paso de discretización $h = 0.1$. Sabiendo que la solución exacta es $y(t) = e^t + \sin(t)$, dibujar las soluciones obtenidas con los tres métodos y la solución exacta en un mismo plot. Comparar los resultados obtenidos. Escribir los valores de las distintas soluciones en $t = 0.5$ y $t = 1.5$.

```
> f = @(t,y) y-sin(t)+cos(t)
> intiempo = [0 2]; valorini= 1; npasos = 20;
```

para posteriormente ejecutar los códigos eulerexplicito.m (Euler explícito), eulerimplicito.m (Euler implícito) y cranknicolson.m (Crank-Nicolson) y así obtener las soluciones:

```
> [t,u1] = eulerexplicito(f,intiempo,valorini,npasos);
> [t,u2] = eulerimplicito(f,intiempo,valorini,npasos);
> [t,u3] = cranknicolson(f,intiempo,valorini,npasos);
```

```

> solexac = exp(t)+sin(t);
> figure;
> plot(t,u1,'ro',t,u2,'b+',t,u3,'g*',t,solexac,'k^')

```

Finalmente escribimos los valores obtenidos con cada uno de los métodos para $t = 0.5$ y $t = 1.5$:

```

> t1 = min(find(t>=0.5));
> t2 = min(find(t>=1.5));
> u1(t1), u2(t1), u3(t1)
> u1(t2), u2(t2), u3(t2)

```

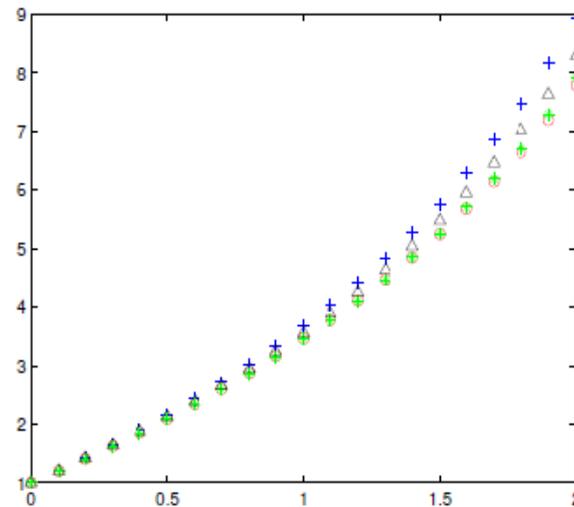


Figura 3.3: Con círculos rojos aparecen representados los resultados obtenidos con Euler explícito, con cruces azules los obtenidos con Euler implícito, con asteriscos verdes los correspondientes a Crank-Nicolson y la exacta con triángulos negros.

Ejercicio 2. [Capa límite laminar] En el estudio de algunas capas límite de flujos laminares aparece la denominada ecuación de Blasius que es una EDO de tercer orden de la forma:

$$y'''(x) + y(x)y''(x) = 0, \quad x \geq 0.$$

Nótese que aquí hemos modificado la notación de la variable independiente llamándola x pues en esta ocasión la variable independiente no es el tiempo sino que es una variable adimensional relacionada con la coordenada espacial. La ecuación de Blasius se acompaña de las tres condiciones iniciales $y(0) = y'(0) = 0, y''(0) = \alpha$ donde α es un valor conocido ($\alpha = 0,47$). Con ello se puede plantear el problema de valor inicial de Blasius de la forma siguiente:

Hallar una función $y(x)$ verificando:

$$\begin{cases} y'''(x) + y(x)y''(x) = 0, & x \geq 0 \\ y(0) = 0, \quad y'(0) = 0, \quad y''(0) = \alpha \end{cases}$$

Este problema es equivalente al P.V.I. de primer orden:

$$\begin{cases} z_1'(x) = z_2(x), & x \geq 0 \\ z_2'(x) = z_3(x), & x \geq 0 \\ z_3'(x) = -z_1(x)z_3(x), & x \geq 0 \\ z_1(0) = 0, \quad z_2(0) = 0, \quad z_3(0) = \alpha \end{cases}$$

donde se ha denotado por $z_1(x) = y(x), z_2(x) = y'(x), z_3(x) = y''(x)$.

Abreviadamente el problema anterior puede escribirse entonces como:

$$\begin{cases} \mathbf{z}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{z}(x)), & x \geq 0 \\ \mathbf{z}(0) = \{0, 0, \alpha\}^T \end{cases}$$

donde:

$$\mathbf{z}(x) = \{z_1(x), z_2(x), z_3(x)\}^T$$

y:

$$\mathbf{f}(x, \mathbf{z}(x)) = \{z_2(x), z_3(x), -z_1(x)z_3(x)\}^T$$

Se pide calcular y dibujar el perfil de la capa límite $y(x)$, para $x \in [0, 10]$, resolviendo el PVI asociado al sistema no lineal de EDO.

Solución.

Resolveremos el problema utilizando el método de Euler explícito, para ello creamos la función *feulerejemplo.m*:

```
> function [t,u1,u2,u3]=feulerejemplo(odefun1,odefun2,odefun3,...
```

```
> inicial1,inicial2,inicial3,Nh,tspan)
```

```
> h=(tspan)/Nh;
```

```
> n=Nh+1;
```

```

> t=ones(n);
> u1=ones(n);
> u2=ones(n);
> u3=ones(n);
> u1(1)=inicial1;
> u2(1)=inicial2;
> u3(1)=inicial3;
> t(1)=0;
> for i=2:n;
> t(i)=h*(i-1);
> u1(i)=u1(i-1)+h*odefun1(t(i-1),u1(i-1),u2(i-1),u3(i-1));
> u2(i)=u2(i-1)+h*odefun2(t(i-1),u1(i-1),u2(i-1),u3(i-1));
> u3(i)=u3(i-1)+h*odefun3(t(i-1),u1(i-1),u2(i-1),u3(i-1));
> end

```

En esta función necesitamos introducir los siguientes datos:

- ```

> return

```
- la descripción del sistema de ecuaciones diferenciales a través de las funciones `odefun1`, `odefun2` y `odefun3`, que serán introducidas inline,
  - el intervalo en el cual se va a resolver al problema  $[0, tspan]$ ,
  - las condiciones iniciales para cada una de las variables, `inicial1`, `inicial2` e `inicial3`,
  - y el número de pasos que se van a dar,  $Nh$ , relacionado con el tamaño de la discretización  $h$ , del modo siguiente  $tspan = Nh * h$ . En este caso vamos a tomar un tamaño de discretización  $h = 10^{-2}$ , por tanto para llegar hasta  $x = 10$ , necesitaremos dar  $Nh = 10^3$  pasos.

En este ejercicio, los datos que tenemos que introducir son concretamente los siguientes:

```
> odefun1=inline('y','t','x','y','z');
> odefun2=inline('z','t','x','y','z');
> odefun3=inline('-x.*z','t','x','y','z');
> inicial1=0;
> inicial2=0;
> inicial3=0.47;
> Nh=1000;
> tspan=10;
> [t,u1,u2,u3]=feulerejemplo(odefun1,odefun2,odefun3,... inicial1,inicial2,inicial3,Nh,tspan);
```

En  $x = 10$ , la solución toma el valor 8,8244. En la siguiente figura mostramos el perfil de la función  $y(x)$  en  $x \in [0, 10]$ .

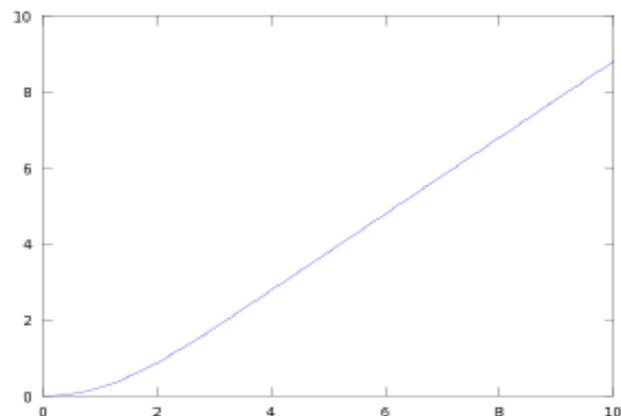


Figura 4.2: Perfil de la solución

## 8. Métodos multipaso

### 5.2.1. Métodos de Adams-Bashforth de $(r+1)$ pasos.

Suponiendo conocidos los valores  $f_{n-r} = f(t_{n-r}, y_{n-r})$ ,  $f_{n-r+1} = f(t_{n-r+1}, y_{n-r+1})$ ,  
...,  $f_n = f(t_n, y_n)$  los métodos de Adams-Bashforth de  $(r + 1)$  pasos construyen el  
polinomio  $p_n(t)$  como el polinomio interpolador de Lagrange de la función  $f$  en el  
soporte  $t_{n-r}, \dots, t_n$ , es decir como aquel polinomio de grado  $r$  que verifica:

$$p_n(t_{n-i}) = f_{n-i} \quad (i = 0, \dots, r)$$

**Definition 2.** *Se denominan métodos de Adams-Basforth a aquellos que se obtienen al desarrollar la fórmula:*

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} p_n(t) \cdot dt$$

*donde  $p_n(t)$  es el polinomio de grado  $r$  que verifica las igualdades:*

$$p_n(t_{n-i}) = f_{n-i} \quad (i = 0, \dots, r)$$

El polinomio  $p_n(t)$  anterior puede expresarse como:

$$p_n(t) = \sum_{i=0}^r f_{n-i} \cdot L_{n,i,r}(t)$$

donde:

$$L_{n,i,r}(t) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^r \frac{t - t_{n-j}}{t_{n-i} - t_{n-j}}$$

por lo que el método de Adams-Basforth de  $(r + 1)$  pasos puede escribirse como:

$$y_{n+1} = y_n + h_n \cdot \sum_{i=0}^r b_{n,i,r} \cdot f_{n-i}$$

donde:

$$b_{n,i,r} = \frac{1}{h_n} \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} L_{n,i,r}(t) \cdot dt$$

*Obsérvese que los métodos de Adams-Bashforth son métodos explícitos y que necesitan para ser aplicados conocer, al menos, los valores aproximados  $y_0, y_1, \dots, y_r$ . Estos deberán ser obtenidos por métodos que utilicen un menor número de pasos.*

|         | $b_{0,r}$              | $b_{1,r}$             | $b_{2,r}$               | $b_{3,r}$            | $b_{4,r}$              | $b_{5,r}$            | $b_{6,r}$            | $\sum_{i=0}^r  b_{i,r} $ |
|---------|------------------------|-----------------------|-------------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|--------------------------|
| $r = 0$ | 1                      |                       |                         |                      |                        |                      |                      | 1                        |
| $r = 1$ | $\frac{3}{2}$          | $-\frac{1}{2}$        |                         |                      |                        |                      |                      | 2                        |
| $r = 2$ | $\frac{23}{12}$        | $-\frac{4}{3}$        | $\frac{5}{12}$          |                      |                        |                      |                      | 3,66..                   |
| $r = 3$ | $\frac{55}{24}$        | $-\frac{59}{24}$      | $\frac{37}{24}$         | $-\frac{3}{8}$       |                        |                      |                      | 6,66...                  |
| $r = 4$ | $\frac{1901}{720}$     | $-\frac{1387}{360}$   | $\frac{109}{30}$        | $-\frac{637}{360}$   | $\frac{251}{729}$      |                      |                      | 12,24..                  |
| $r = 5$ | $\frac{4277}{1440}$    | $-\frac{7923}{1440}$  | $\frac{4991}{720}$      | $-\frac{3649}{720}$  | $\frac{959}{480}$      | $-\frac{95}{288}$    |                      | 22,14..                  |
| $r = 6$ | $\frac{198721}{60480}$ | $-\frac{18637}{2520}$ | $\frac{2235183}{20160}$ | $-\frac{10754}{945}$ | $\frac{135713}{20160}$ | $-\frac{5603}{2520}$ | $\frac{1987}{60480}$ | 43,75..                  |

### 5.2.2. Métodos de Adams-Moulton de $(r+1)$ pasos

En las mismas condiciones que en el apartado anterior, los métodos de Adams-Moulton consideran el polinomio interpolador  $p_n(t)$  de grado  $(r + 1)$  y verificando ahora que:

$$p_n(t_{n-i}) = f_{n-i} \quad (i = 0, 1, \dots, r)$$

$$p_n(t_{n+1}) = f_{n+1} = f(t_{n+1}, y_{n+1})$$

$$y_{n+1} - h_n \cdot c_{n,-1,r} \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1}) = y_n + h_n \cdot \sum_{i=0}^r c_{n,i,r} \cdot f_{n-i}$$

$$c_{n,i,r} = \frac{1}{h_n} \cdot \int_{t_n}^{t_{n+1}} L_{n,i,r}(t) \cdot dt \quad (i = -1, 0, 1, \dots, r)$$

# 3. Problemas de valor inicial y de contorno para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales: resolución numérica

## Índice

1. Introducción y generalidades
2. Fórmulas en diferencias

3. Aproximación mediante esquemas en diferencias de problemas de transporte estacionarios 1D
4. Esquemas para la ecuación de difusión evolutiva en 1D
5. Esquemas en diferencias finitas para el tratamiento de problemas convectivos
6. Resolución de problemas de difusión-convección-reacción en dominios 2D
7. Resolución con Octave

# 1. Introducción y generalidades

Problema modelo:

$$\frac{\partial (a(\mathbf{x}, t, u) \cdot u(\mathbf{x}, t))}{\partial t} - \nabla \bullet ([\mathbf{D}(\mathbf{x}, t, u)] \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t)) + \nabla \bullet \vec{\mathbf{V}}(\mathbf{x}, t, u) \cdot u(\mathbf{x}, t) + q(\mathbf{x}, t, u) \cdot u(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t, u) \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, T)$$

$$u(\mathbf{x}, t) = u_D(\mathbf{x}, t) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D \times (0, T)$$

$$- [\mathbf{D}(\mathbf{x}, t, u)] \cdot \nabla u(\mathbf{x}, t) + \vec{\mathbf{V}}(\mathbf{x}, t, u) \cdot u(\mathbf{x}, t) \bullet \vec{\mathbf{n}} = g(\mathbf{x}, t, u) \quad \mathbf{x} \in \Gamma_N \times (0, T)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u^0(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega}$$

$\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ , ( $d = 1, 2, 3$ ),  $\Omega$  un abierto de frontera  $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$

$a(\mathbf{x}, t, u)$  es el “factor de retardo”,  $[\mathbf{D}(\mathbf{x}, t, u)]$  es el tensor de “difusión-dispersión”,

$\vec{\mathbf{V}}(\mathbf{x}, t, u)$  es el campo de velocidades de convección,  $q(\mathbf{x}, t, u)$  es la función de “reacción química”,

$f(\mathbf{x}, t, u)$  es la función de “términos fuentes”,  $\vec{\mathbf{n}}$  es el vector normal unitario exterior al dominio.

## 2. Fórmulas en diferencias

Obtención de fórmulas en diferencias finitas para la aproximación de derivadas de funciones.

### A. Derivadas de funciones de una variable.

$$u(x^* + h) = u(x^*) + h \cdot \frac{du}{dx}(x^*) + \dots + \frac{h^m}{m!} \cdot \frac{d^m u}{dx^m}(x^*) + \frac{h^{m+1}}{(m+1)!} \cdot \frac{d^{m+1} u}{dx^{m+1}}(\xi),$$

$$u(x^* + h) \approx u(x^*) + h \cdot \frac{du}{dx}(x^*) + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{d^2 u}{dx^2}(x^*) + \dots + \frac{h^m}{m!} \cdot \frac{d^m u}{dx^m}(x^*)$$

$$u(x^* + h) \approx u(x^*) + h \cdot \frac{du}{dx}(x^*).$$

Fórmula en diferencias finitas progresiva:

$$\frac{du}{dx}(x^*) \approx \frac{u(x^* + h) - u(x^*)}{h}$$

$$E_{tr} = -\frac{h}{2} \cdot \frac{d^2 u}{dx^2}(\xi) \rightarrow E_{tr} = O(h)$$

$$u(x^* - h) = u(x^*) - h \cdot \frac{du}{dx}(x^*) + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{d^2u}{dx^2}(\xi)$$

Fórmula en diferencias finitas regresiva:

$$\frac{du}{dx}(x^*) \approx \frac{u(x^*) - u(x^* - h)}{h},$$

$$E_{tr} = \frac{h}{2} \cdot \frac{d^2u}{dx^2}(\xi) \rightarrow E_{tr} = O(h)$$

$$u(x^* + h) - u(x^* - h) = 2 \cdot h \cdot \frac{du}{dx}(x^*) + \frac{h^3}{6} \cdot \left( \frac{d^3u}{dx^3}(\xi') + \frac{d^3u}{dx^3}(\xi'') \right) \Rightarrow$$

$$\frac{du}{dx}(x^*) = \frac{u(x^* + h) - u(x^* - h)}{2 \cdot h} - \frac{h^2}{6} \cdot \frac{d^3u}{dx^3}(\xi)$$

Fórmula en diferencias finitas centrada:

$$\frac{du}{dx}(x^*) \approx \frac{u(x^* + h) - u(x^* - h)}{2 \cdot h}, E_{tr} = O(h^2)$$

## B. Derivadas de funciones de varias variables.

$$u(x^*+h, y^*) = u(x^*, y^*) + h \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(x^*, y^*) + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x^*, y^*) + \frac{h^3}{6} \cdot \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x^*, y^*)$$

$$+ \frac{h^4}{24} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x^*, y^*) + \dots$$

$$u(x^*, y^*+k) = u(x^*, y^*) + k \cdot \frac{\partial u}{\partial y}(x^*, y^*) + \frac{k^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x^*, y^*) + \frac{k^3}{6} \cdot \frac{\partial^3 u}{\partial y^3}(x^*, y^*)$$

$$+ \frac{k^4}{24} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x^*, y^*) + \dots$$

Fórmula en diferencias finitas progresiva:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^* + h, y^*) - u(x^*, y^*)}{h}, E_{tr} = O(h).$$

Fórmula en diferencias finitas regresiva.

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^*, y^*) - u(x^* - h, y^*)}{h}, E_{tr} = O(h).$$

Fórmula centrada:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^* + h, y^*) - u(x^* - h, y^*)}{2 \cdot h}, E_{tr} = O(h^2).$$

**Progresiva:**

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^*, y^* + k) - u(x^*, y^*)}{k}, E_{tr} = O(k).$$

**Regresiva:**

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^*, y^*) - u(x^*, y^* - k)}{k}, E_{tr} = O(k).$$

**Centrada:**

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^*, y^* + k) - u(x^*, y^* - k)}{2 \cdot k}, E_{tr} = O(k^2).$$

Fórmula centrada:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^* - h, y^*) - 2 \cdot u(x^*, y^*) + u(x^* + h, y^*)}{h^2},$$

$$E_{tr} = -\frac{h^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi, y^*).$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^*, y^* - h) - 2 \cdot u(x^*, y^*) + u(x^*, y^* + k)}{k^2},$$

$$E_{tr} = -\frac{k^2}{12} \cdot \frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x^*, \zeta).$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x^*, y^*) \approx \frac{u(x^* + h, y^* + k) - u(x^* - h, y^* + k)}{4 \cdot h \cdot k}$$

$$\frac{-u(x^* + h, y^* - k) + u(x^* - h, y^* - k)}{4 \cdot h \cdot k}$$

$$E_{tr} = O\left(\frac{h^3}{k}, h^2, h \cdot k, k^2, \frac{k^3}{h}\right)$$

### 3. Aproximación mediante esquemas en diferencias de problemas de transporte estacionarios 1D.

Problemas con coeficientes constantes y esquemas con mallados equidistantes.

*Siendo  $D$ ,  $V$  y  $q$  tres constantes conocidas con  $D > 0$ , siendo conocida la función  $f(x)$  y estando dados los valores  $u_{IZQ}$  y  $u_{DER}$ , encontrar una función  $u(x)$  que verifique:*

$$\left\{ \begin{array}{l} -D \cdot u''(x) + V \cdot u'(x) + q \cdot u(x) = f(x), \quad 0 < x < L \\ u(0) = u_{IZQ}, \\ u(L) = u_{DER}. \end{array} \right.$$

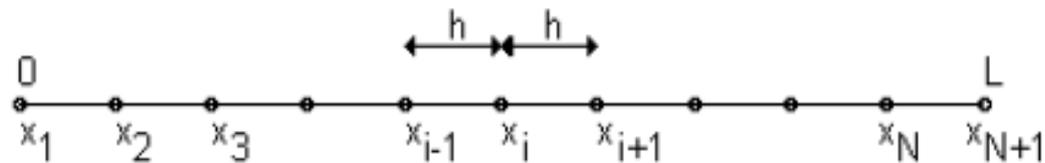
**Discretización espacial del dominio  $[0, L]$ .**

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \dots < x_N < x_{N+1} = L.$$

**Nodos:**  $x_i, i = 1, \dots, N + 1$ ;

**Valores nodales:**  $u_i, u_i \sim u(x_i), i = 1, \dots, N + 1$ .

**Mallado equidistante:**  $h = x_{i+1} - x_i, \forall i, i = 1, \dots, N$ .



$$-D \cdot u''(x_i) + V \cdot u'(x_i) + q \cdot u(x_i) = f(x_i) \quad (i = 2, \dots, N)$$

$$-D \cdot \frac{u(x_i - h) - 2 \cdot u(x_i) + u(x_i + h)}{h^2} + V \cdot \frac{u(x_i + h) - u(x_i - h)}{2 \cdot h} + O(h^2)$$

$$+ qu(x_i) = f(x_i) \quad (i = 2, \dots, N)$$

$$\left( -\frac{D}{h^2} - \frac{V}{2 \cdot h} \right) \cdot u_{i-1} + \left( \frac{2 \cdot D}{h^2} + q \right) \cdot u_i + \left( -\frac{D}{h^2} + \frac{V}{2 \cdot h} \right) \cdot u_{i+1} = f_i,$$

$$\alpha \cdot u_{i-1} + \beta \cdot u_i + \gamma \cdot u_{i+1} = f_i \quad (i = 2, \dots, N)$$

$$\alpha = -\left( \frac{D}{h^2} + \frac{V}{2 \cdot h} \right), \quad \beta = \left( \frac{2 \cdot D}{h^2} + q \right), \quad \gamma = \left( \frac{V}{2 \cdot h} - \frac{D}{h^2} \right)$$

### Ejemplo:

$$\begin{cases} -u''(x) + Vu'(x) = 0, & 0 < x < 1 \\ u(0) = 0, & u(1) = 1, \end{cases}$$

Utilizar distintos valores de la velocidad  $V$ .

Parámetro de discretización  $h = 0.1$ . Nodos:

$$x_1 = 0, x_2 = 0.1, x_3 = 0.2, x_4 = 0.3, x_5 = 0.4,$$

$$x_6 = 0.5, x_7 = 0.6, x_8 = 0.7, x_9 = 0.8, x_{10} = 0.9, x_{11} = 1.0$$

$f_i = 0$  ( $i = 2, \dots, 10$ ). Como  $D = 1$ ,  $q = 0$  y  $V$  queda libre para asignarle distintos valores, se tiene que:

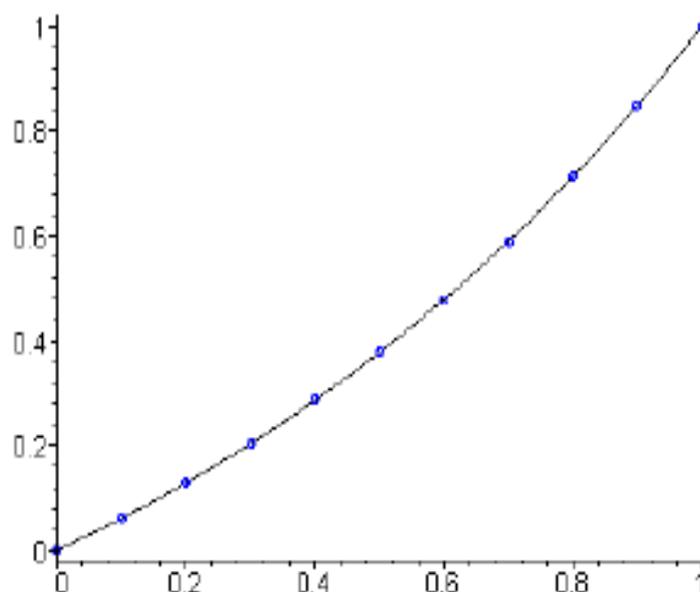
$$\alpha = -100 - 5V, \quad \beta = 200, \quad \gamma = 5V - 100$$

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & \gamma \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \\ u_{10} \\ u_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

V = 1:

$u_1 = 0, u_2 = 0.06117989669, u_3 = 0.1287997825, u_4 = 0.2035375511,$   
 $u_5 = 0.2861424532, u_6 = 0.3774426083, u_7 = 0.4783533060,$   
 $u_8 = 0.5898861825, u_9 = 0.7131593618, u_{10} = 0.8494086650, u_{11} = 1.$

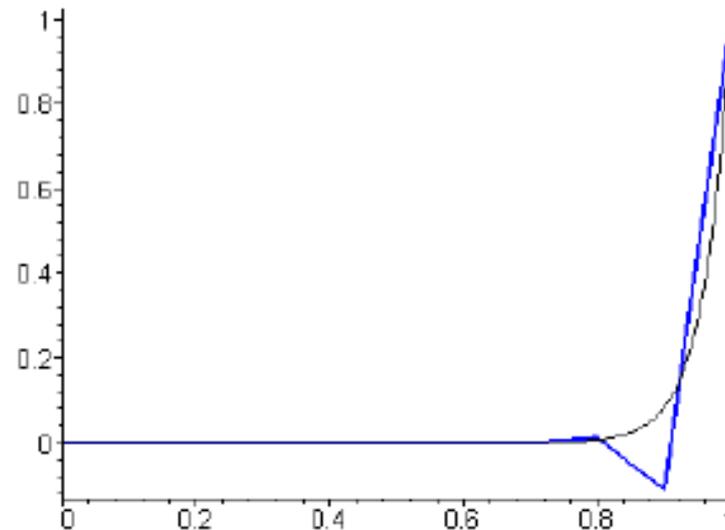
$$u(x) = \frac{e^x - 1}{e - 1}$$



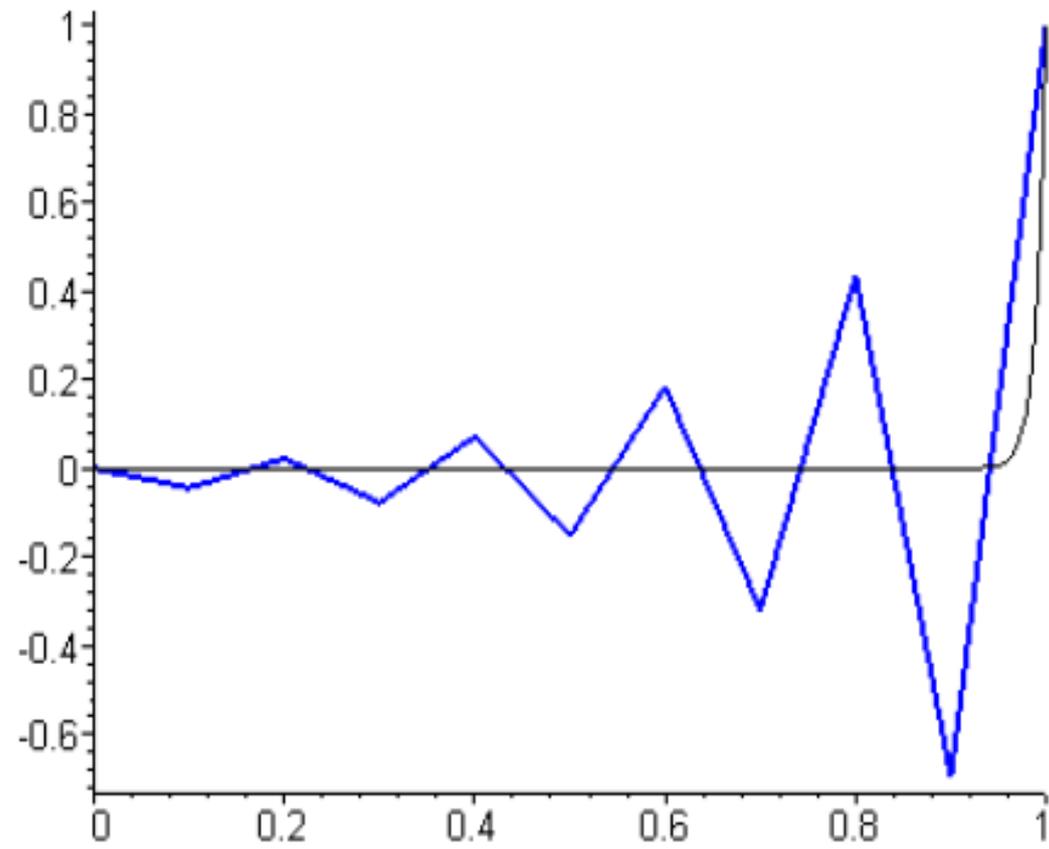
V = 25 :

$$\begin{aligned}u_1 &= 0, & u_2 &= -0.2867971998 \cdot 10^{-8}, & u_3 &= 0.2294377598 \cdot 10^{-7}, \\u_4 &= -0.2093619558 \cdot 10^{-6}, & u_5 &= 0.1881389630 \cdot 10^{-5}, \\u_6 &= -0.1693537464 \cdot 10^{-4}, & u_7 &= 0.1524155037 \cdot 10^{-3}, \\u_8 &= -0.1371742401 \cdot 10^{-2}, & u_9 &= 0.1234567873 \cdot 10^{-1}, \\u_{10} &= 0. - .1111111114, & u_{11} &= 1.\end{aligned}$$

$$u(x) = \frac{e^{25 \cdot x} - 1}{e^{25} - 1}$$



$V = 100$ :



La justificación “física” de lo anterior puede buscarse en que el proceso de convección es un proceso “descentrado” mientras que la fórmula empleada para aproximar el término convectivo (la primera derivada  $u'(x)$ ) era una fórmula centrada. Por ello cuanto mayor importancia cobra este término “peor” se vuelve la aproximación obtenida.

$$\rho = \frac{1}{2} + \frac{|V|}{2 \cdot V}$$

Si la velocidad es positiva  $\rho = 1$  mientras que si la velocidad es negativa  $\rho = 0$ . Aproximaremos la primera derivada  $u'(x_i)$  mediante:

$$u'(x_i) \approx \rho \cdot \frac{u_i - u_{i-1}}{h} + (1 - \rho) \cdot \frac{u_{i+1} - u_i}{h} =$$
$$u'(x_i) \approx \frac{-\rho \cdot u_{i-1} + (2 \cdot \rho - 1) \cdot u_i + (1 - \rho) \cdot u_{i+1}}{h}$$

es decir utilizando el valor nodal  $u_i$  y el valor nodal “aguas arriba”.

$$-D \cdot \frac{u_{i+1} - 2 \cdot u_i + u_{i-1}}{h^2} + V \cdot \frac{-\rho \cdot u_{i-1} + (2 \cdot \rho - 1) \cdot u_i + (1 - \rho) \cdot u_{i+1}}{h} +$$

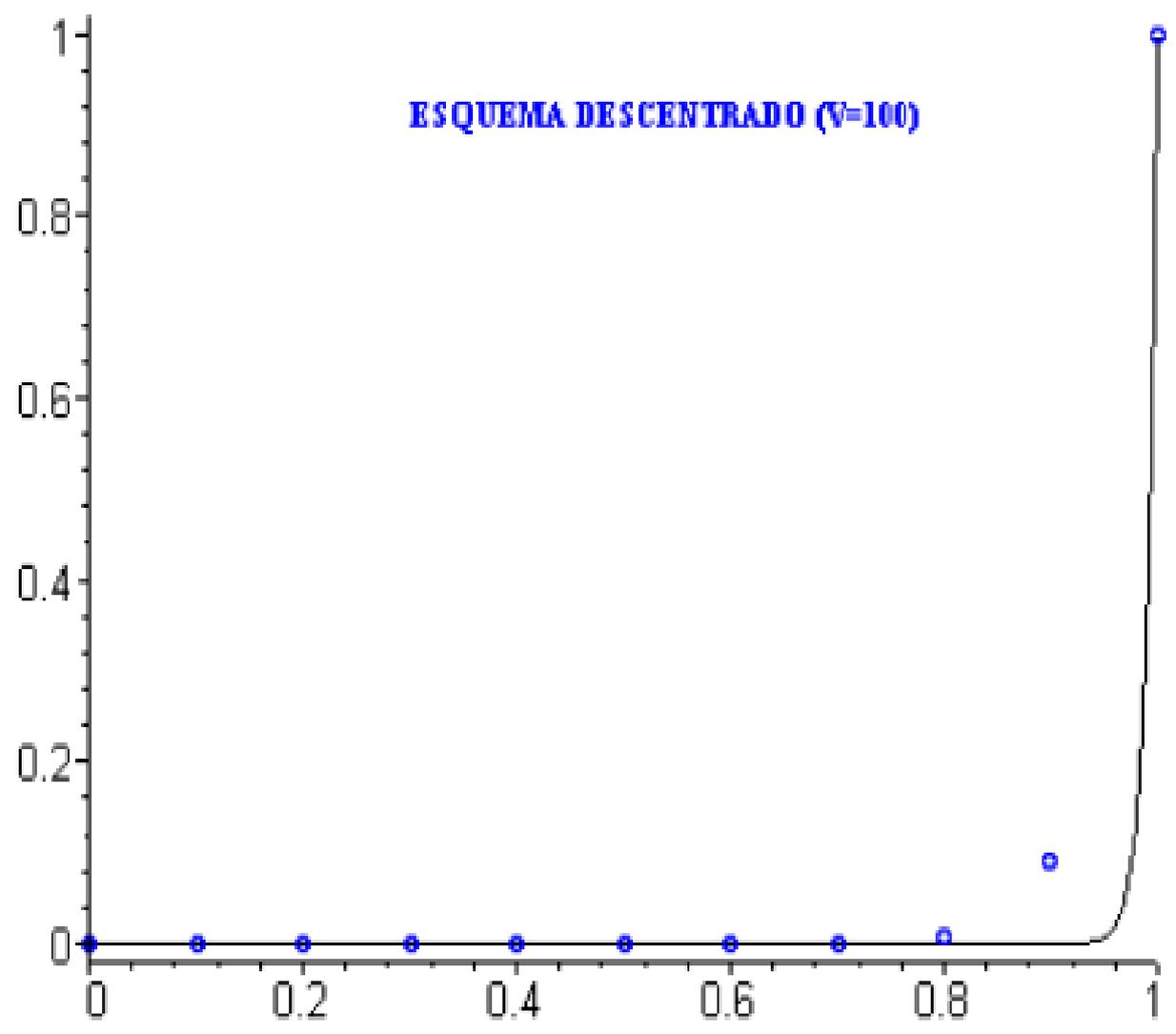
$$q \cdot u_i = f_i.$$

$$\alpha \cdot u_{i-1} + \beta \cdot u_i + \gamma \cdot u_{i+1} = f_i \quad (i = 2, \dots, N)$$

$$\alpha = - \left( \frac{D}{h^2} + \frac{\rho \cdot V}{h} \right),$$

$$\beta = \left( \frac{2 \cdot D}{h^2} + \frac{2 \cdot \rho - 1}{h} \cdot V + q \right),$$

$$\gamma = \left( \frac{(1 - \rho) \cdot V}{h} - \frac{D}{h^2} \right)$$



## F. Condiciones de contorno sobre el flujo.

Hasta ahora en los extremos del intervalo  $(0, L)$  hemos considerado condiciones de contorno de tipo Dirichlet mediante las cuales se imponía el valor de la función en los nodos  $x_1$  y  $x_{N+1}$ . Pero podemos encontrar también condiciones del tipo:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{1,1} \cdot u'(0) + c_{1,2} \cdot u(0) = g_{IZQ} \\ c_{2,1} \cdot u'(L) + c_{2,2} \cdot u(L) = g_{DER} \end{array} \right\}$$

donde  $c_{1,1}, c_{1,2}, c_{2,1}, c_{2,2}, g_{IZQ}$  y  $g_{DER}$  son constantes conocidas.

Si  $c_{11} \neq 0$  y  $c_{21} \neq 0$  (si no se tendrían condiciones Dirichlet), la imposición de este tipo de condiciones de contorno lleva a plantearse el esquema de cálculo en los nodos  $x_1$  y  $x_{N+1}$ . Pero para ello deberían considerarse dos nodos ficticios (el  $x_0$  y el  $x_{N+2}$ ) que no existen en nuestro mallado.

**Procedimiento:** Supongamos que  $h_1 = x_2 - x_1$ , se considera un nodo ficticio  $x_0$  en la posición:  $x_0 = x_1 - h_1$ . La primera de las condiciones de contorno puede reescribirse como:

$$u'(x_1) = \frac{(g_{IZQ} - c_{1,2} \cdot u(x_1))}{c_{11}} = r_1 + s_1 \cdot u(x_1)$$

que aproximaremos mediante:

$$u_1' = \frac{(g_{IZQ} - c_{1,2} \cdot u_1)}{c_{11}} = r_1 + s_1 \cdot u_1,$$

siendo  $r_1 = g_{IZQ}/c_{1,1}$  y  $s_1 = -c_{1,2}/c_{1,1}$ . Consideramos un polinomio de segundo grado  $p(x)$  que en el nodo ficticio  $x_0$  tome el valor (ficticio)  $u_0$ , en  $x_1$  el valor  $u_1$  y en  $x_2$  el valor  $u_2$ ,

$$p(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}u_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}u_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}u_2.$$

La primera derivada de  $p(x)$  en  $x_1$  viene dada por:

$$p'(x_1) = \frac{1}{2 \cdot h_1} \cdot (u_2 - u_0).$$

Aproximamos la derivada de la función  $u$  en  $x_1$  por la derivada de  $p(x)$ ,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2 \cdot h_1} \cdot (u_2 - u_0) &= r_1 + s_1 \cdot u_1 \Rightarrow \\ \Rightarrow u_0 &= -2 \cdot h_1 \cdot s_1 \cdot u_1 + u_2 - 2 \cdot h_1 \cdot r_1 \end{aligned}$$

Una vez calculado el valor nodal ficticio en  $x_0$  podemos plantear el esquema de cálculo en  $x_1$ :

$$\begin{aligned} -D_1 \cdot u''(x_1) + V_1 \cdot u'(x_1) + q_1 \cdot u(x_1) &= f_1 \Rightarrow \\ -D_1 \cdot \frac{u_0 - 2 \cdot u_1 + u_2}{h_1^2} + V_1 \cdot (r_1 + s_1 \cdot u_1) + q_1 \cdot u_1 &= f_1 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\left( \frac{2 \cdot D_1}{h_1^2} - \frac{c_{12}}{c_{11}} \cdot \left( V_1 + \frac{D_1}{h_1} \right) + q_1 \right) \cdot u_1 + \left( \frac{-2 \cdot D_1}{h_1^2} \right) \cdot u_2 =$$

$$f_1 - \frac{g_{IZQ}}{c_{11}} \cdot \left( V_1 + \frac{2 \cdot D_1}{h_1} \right)$$

$$\alpha_{1,1} \cdot u_1 + \alpha_{1,2} \cdot u_2 = b_1$$

con:

$$\alpha_{1,1} = \frac{2 \cdot D_1}{h_1^2} - \frac{c_{12}}{c_{11}} \cdot \left( V_1 + \frac{D_1}{h_1} \right) + q_1$$

$$\alpha_{1,2} = \frac{-2 \cdot D_1}{h_1^2}$$

y

$$b_1 = f_1 - \frac{g_{IZQ}}{c_{11}} \cdot \left( V_1 + \frac{2 \cdot D_1}{h_1} \right)$$

**Ejercicio 4.3** Resolver el siguiente problema de transporte estacionario unidimensional:

$$\begin{cases} -u''(x) + 3u'(x) + u(x) = x + 1, & x \in (0, 1), \\ u(0) = 0, & u'(1) = 0 \end{cases}$$

utilizando un esquema en diferencias finitas centrado y un tamaño de discretización constante  $h = 0.5$ . Utiliza Octave con un paso de  $h = 0.05$  para dibujar la aproximación de  $u(x)$  obtenida por el método y determina los valores  $x$  para los que se obtienen aproximaciones mayores a 0.2.

**Solución.**

Puesto que  $x \in [0, 1]$  y  $h = 0.5$ , vamos a tener 3 nodos que serán

$$x_1 = 0, \quad x_2 = 0.5, \quad x_3 = 1,$$

y tenemos que hallar los valores nodales

$$u_1 \sim u(0), \quad u_2 \sim u(0.5), \quad u_3 \sim u(1).$$

Por la condición de contorno tipo Dirichlet,  $u(0) = 0$ , tenemos que  $u_1 = 0$  y por tanto sólo tenemos que calcular  $u_2$  y  $u_3$ .

Para calcular  $u_2$ , aplicamos el esquema en diferencias que nos piden en  $x_2$  y tenemos que:

$$-\left(\frac{u_1 - 2u_2 + u_3}{h^2}\right) + 3\left(\frac{u_3 - u_1}{2h}\right) + u_2 = 0.5 + 1$$

Teniendo en cuenta que  $u_1 = 0$  y  $h = 0.5$ , resulta la ecuación,

$$9u_2 - u_3 = 1.5.$$

Como en  $x_3$  tenemos impuesta una condición tipo Neumann, tenemos que aplicar el esquema en diferencias en este nodo. Para aplicar el esquema hay que

utilizar un nodo ficticio que denotaremos por  $x_f$  con valor nodal  $u_f$ . Entonces, resulta

$$-\left(\frac{u_2 - 2u_3 + u_f}{h^2}\right) + 3\left(\frac{u_f - u_2}{2h}\right) + u_3 = 1 + 1$$

Puesto que  $u'(1) = 0$ , se tiene su aproximación en diferencias  $\frac{u_f - u_2}{2h}$  también es cero,  $\frac{u_f - u_2}{2h} = 0$ , y se obtiene

$$-\frac{1}{h^2}u_2 + \left(\frac{2}{h^2} + 1\right)u_3 - \frac{1}{h^2}u_f = 2.$$

Eliminamos  $u_f$  utilizando la condición de contorno  $u'(1) = 0$ , que implica que  $u_f = u_2$  como hemos visto antes. Por tanto, tenemos que,

$$-\frac{2}{h^2}u_2 + \left(\frac{2}{h^2} + 1\right)u_3 = 2,$$

de donde se obtiene la ecuación  $-8u_2 + 9u_3 = 2$ . Sólo queda resolver el sistema:

$$\begin{pmatrix} 9 & -1 \\ -8 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

y obtenemos la solución  $u_1 = 0$ ,  $u_2 = 0.21233$  y  $u_3 = 0.41096$ .

## 4. Esquemas para la ecuación de difusión evolutiva en 1D

Algunos esquemas explícitos e implícitos.

Consideremos el problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad 0 < x < L, \quad t > 0 \\ u(0, t) = u_I(t), \quad u(L, t) = u_D(t), \quad t > 0, \\ u(x, 0) = u^0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \end{array} \right.$$

$D = \text{cte}$ ,  $u(x, t)$  suficientemente regular,  $u_I(0) = u^0(0)$  y  $u_D(0) = u^0(L)$ .

Valores de  $t$ :  $t^n = n \cdot \Delta t$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ )

$$\Delta x = \frac{L}{N} \quad \text{y} \quad x_i = (i - 1) \cdot \Delta x \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

$U_i^n = u(x_i, t^n)$ ,  $u_i^n \approx u(x_i, t^n)$ . Obsérvese que  $u_i^0 \approx u(x_i, 0) = u^0(x_i)$  serán conocidos a través de la condición inicial. Asimismo serán conocidos, a través en este caso de las condiciones de contorno, los valores  $u_1^n \approx u_I(t^n)$  y  $u_{N+1}^n \approx u_D(t^n)$ .

Planteemos un primer esquema explícito en diferencias finitas.

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^*) \approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t}, \quad t^* \in [t^n, t^{n+1}]$$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \approx D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^*)$$

Obtendremos un esquema explícito si  $t^* = t^n$ , pues en ese caso la solución  $u_i^{n+1}$  se hará depender de la solución previamente calculada. Con cualquier otra elección de  $t^*$  sería implícito.

Comencemos considerando el caso explícito:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \approx D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^n)$$

y puede aproximarse la derivada espacial segunda mediante un esquema centrado resultando en este caso que:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = D \cdot \frac{u_{i-1}^n - 2 \cdot u_i^n + u_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u_i^{n+1} = D \cdot \alpha \cdot u_{i-1}^n + (1 - 2 \cdot D \cdot \alpha) \cdot u_i^n + D \cdot \alpha \cdot u_{i+1}^n,$$

donde se ha llamado  $\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ .

Las aproximaciones iniciales se conocen y las soluciones en el contorno también son conocidas. Podemos plantear el siguiente esquema de cálculo explícito:

1. En el dominio unidimensional  $D = [0, 1]$ , se considera el siguiente problema parabólico para la incógnita  $u(x, t)$ :

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} \\ u(0, t) = 1, \quad u(1, t) = 0 \\ u(x, 0) = 1 + H(x - 0.25) - H(x - 0.75). \end{cases}$$

- (a) Calcular mediante el esquema de Euler explícito, el valor aproximado de la solución en  $t = 0.01$ , utilizando pasos de discretización  $\Delta x = 0.25$  y  $\Delta t = 0.01$ .
- (b) Plantear el esquema que resultaría al considerar el esquema de Euler implícito.

**Solución.** a) El esquema que resulta al utilizar el esquema de Euler explícito es:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

donde  $u_i^n \approx u(t_n, x_i)$ . Despejando  $u_i^{n+1}$ , se obtiene:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n).$$

Puesto que queremos calcular los valores en  $t=0.01$ , y el paso es de tamaño  $\Delta t = 0.01$ , sólo tenemos que realizar una etapa. Comenzamos calculando los valores iniciales de la solución en los nodos, teniendo en cuenta que

$$x_0 = 0, x_1 = 0.25, x_2 = 0.5, x_3 = 0.75, x_4 = 1,$$

y que la expresión del dato inicial es:

$$u(x, 0) = 1 + H(x - 0.25) - H(x - 0.75).$$

Los valores que resultan son:

$$u_0^0 = 1, u_1^0 = 2, u_2^0 = 2, u_3^0 = 1, u_4^0 = 1.$$

Ahora pasamos a calcular los valores obtenidos para  $t_1 = 0.01$ . En los nodos  $x_0$  y  $x_4$ , aplicamos las condiciones de contorno, por tanto  $u_0^1 = 1$  y  $u_4^1 = 0$ . Para el resto, es decir, los nodos interiores aplicamos el esquema:

$$u_1^1 = u_1^0 + 0.16(u_2^0 - 2u_1^0 + u_0^0) = 1.84,$$

$$u_2^1 = u_2^0 + 0.16(u_3^0 - 2u_2^0 + u_1^0) = 1.84,$$

$$u_3^1 = u_3^0 + 0.16(u_4^0 - 2u_3^0 + u_2^0) = 2.16.$$

b) El esquema que resulta al utilizar el esquema de Euler explícito es:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}$$

y por tanto

$$-\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}u_{i-1}^{n+1} + \left(1 + 2\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)u_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}u_{i+1}^{n+1} = u_i^n.$$

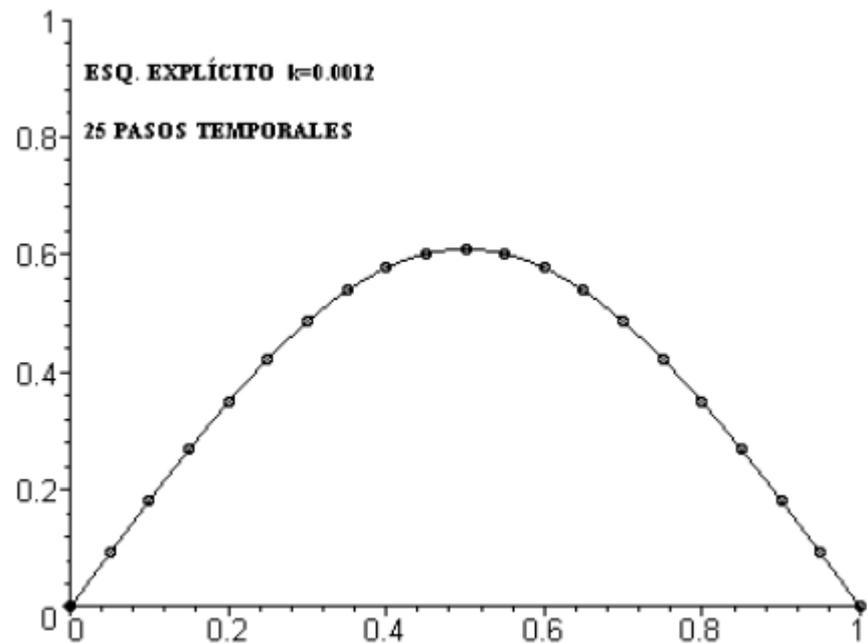
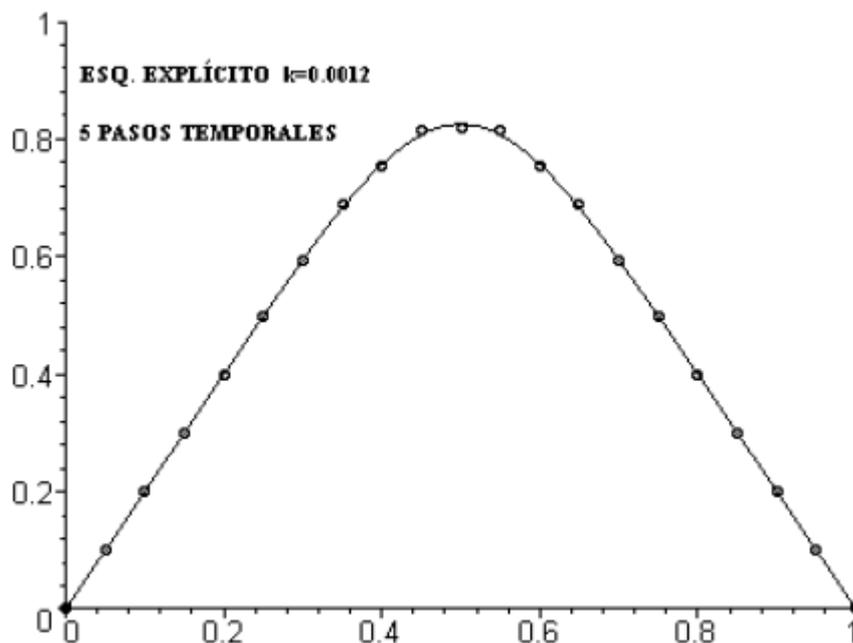
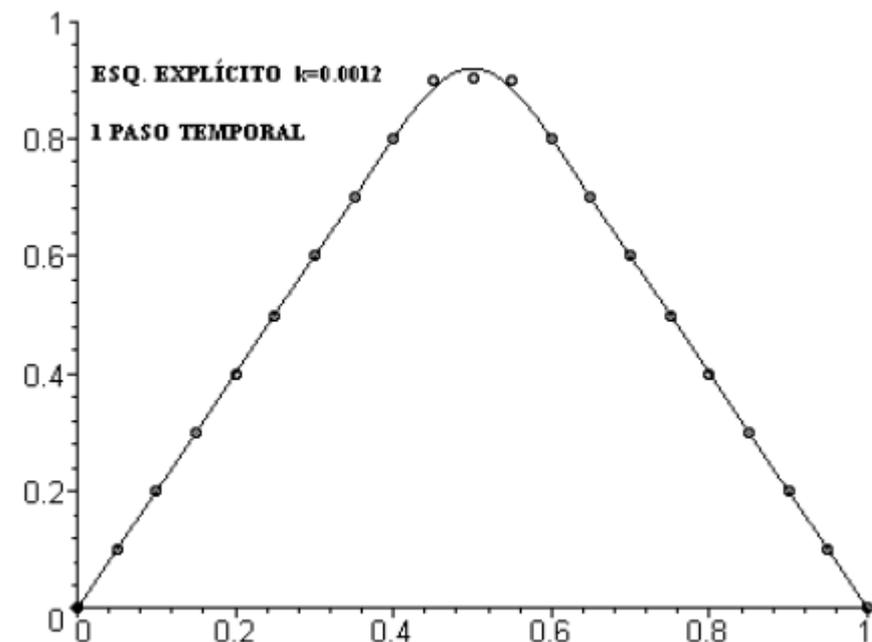
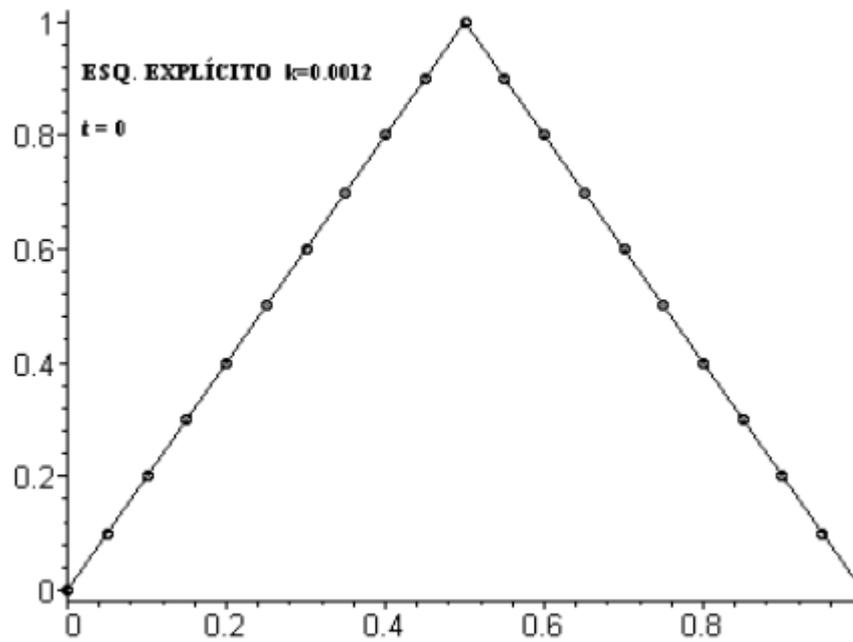
Como puede observarse, en este caso, tendríamos que resolver un sistema de ecuaciones lineales tribanda para poder obtener los valores en los nodos.

Ejemplo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \\ u(0, t) = 0, \quad t > 0, \quad u(L, t) = 0, \quad t > 0, \\ u(x, 0) = u^0(x), \quad 0 \leq x \leq 1. \end{array} \right.$$

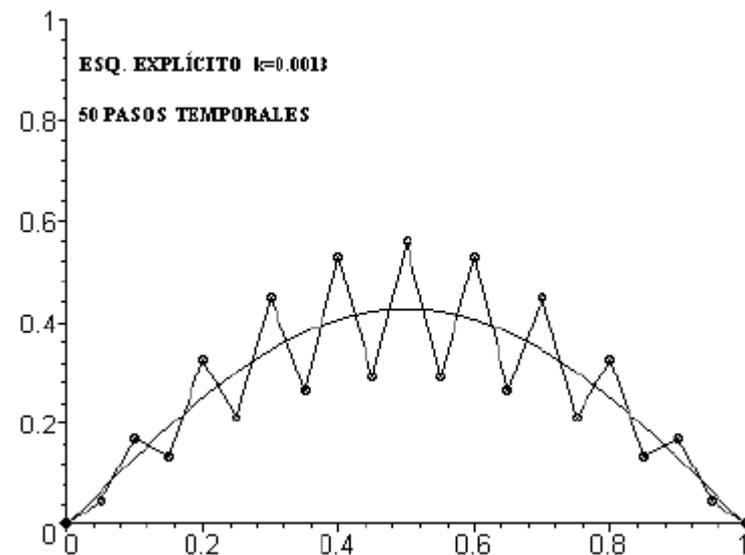
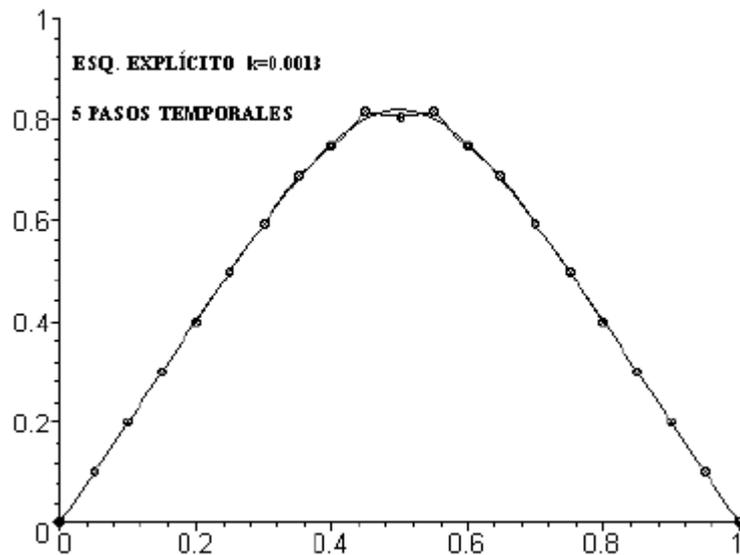
$$u^0(x) = \left\{ \begin{array}{ll} 2x & \text{si } x \leq 0.5 \\ 2(1 - x) & \text{si } x > 0.5 \end{array} \right\}$$

$\Delta = 0.05$ ,  $k = \Delta t = 0.0012$ . Los resultados que se van obteniendo tras diferentes pasos de tiempo se recogen en las figuras siguientes (donde en trazo continuo se representa la solución exacta y con puntos la solución aproximada obtenida):

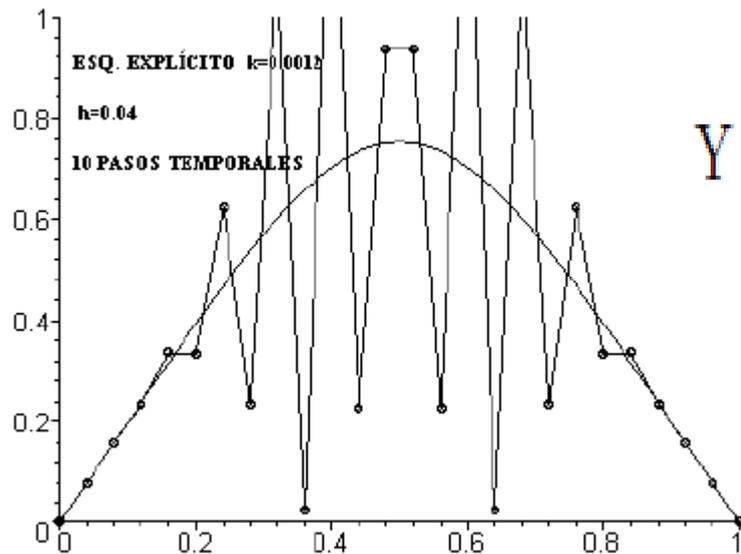


Se aprecia una buena concordancia entre la solución aproximada y solución analítica. Nótese que en este caso  $\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = 0.48$ .

Pasemos a  $k = \Delta t = 0.0013$ , con  $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = 0.52$ .



Bastó un pequeño incremento en el paso de tiempo para que el esquema se volviese inestable. Repitamos el proceso manteniendo el paso temporal del primer caso, es decir  $k = \Delta t = 0.0012$  pero ahora  $\Delta x = 0.04$  (antes se consideró  $\Delta x = 0.05$ .)



Y en este tercer caso  $\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = 0.75$ .

El refinar la discretización disminuyendo  $\Delta t$  e  $\Delta x$  mejora la solución siempre y cuando se verifique que  $\alpha = \Delta t / (\Delta x)^2 \leq 0.5$ .

## 5. Esquemas en diferencias finitas para el tratamiento de problemas convectivos

El esquema “upwind” explícito.

Consideremos inicialmente el problema advectivo:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + V \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = 0 & 0 < x < L \quad t > 0 \\ u(0, t) = u_I(t) & t > 0, \\ u(x, 0) = u^0(x) & 0 \leq x \leq L \end{cases}$$

donde supondremos que  $V > 0$ . Consideremos

$$t^n = n \cdot \Delta t \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\Delta x = \frac{L}{N} \quad \text{y} \quad x_i = (i - 1) \cdot \Delta x \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

El esquema “upwind”:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t^n) + V \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t^n) = 0 \rightsquigarrow \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + V \cdot \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n + V \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \cdot (u_{i-1}^n - u_i^n) = c \cdot u_{i-1}^n + (1 - c) \cdot u_i^n$$

$$c = V \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}, \text{ denominado número de Courant.}$$

**NOTA:**

*Si  $V < 0$  el esquema resultante sería:*

$$u_i^{n+1} = (1 + c) \cdot u_i^n - c \cdot u_{i+1}^n$$

Apliquemos el esquema a la resolución de un ejemplo. Para ello consideremos el problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = 0 \quad 0 < x < 10 \quad t > 0 \\ u(0, t) = u_I(t) \quad t > 0, \\ u(x, 0) = u^0(x) \quad 0 \leq x \leq L \end{array} \right\}$$

siendo  $u_I(t) = 0$  y:

$$u^0(x) = \left\{ \begin{array}{ll} 2 \cdot x & \text{si } x \in [0, 0.5] \\ 2 \cdot (1 - x) & \text{si } x \in [0.5, 1] \\ 0 & \text{si } x \notin [0, 1] \end{array} \right\}$$

Consideremos inicialmente que  $\Delta x = \Delta t = 0.1$ .

Nodos:

$$x_1 = 0, \quad x_2 = 0.1, \quad x_3 = 0.2, \dots, x_i = (i - 1) \cdot 0.1, \dots, x_{101} = 10.$$

Valores iniciales:  $u_1^0 = 0, \quad u_2^0 = 0.2, \quad u_3^0 = 0.4, \quad u_4^0 = 0.6, \quad u_5^0 = 0.8, \quad u_6^0 = 1.0, \quad u_7^0 = 0.8,$

$u_8^0 = 0.6, \quad u_9^0 = 0.4, \quad u_{10}^0 = 0.2, \quad u_{11}^0 = 0, \quad u_{12}^0 = \dots = u_{101}^0 = 0.$

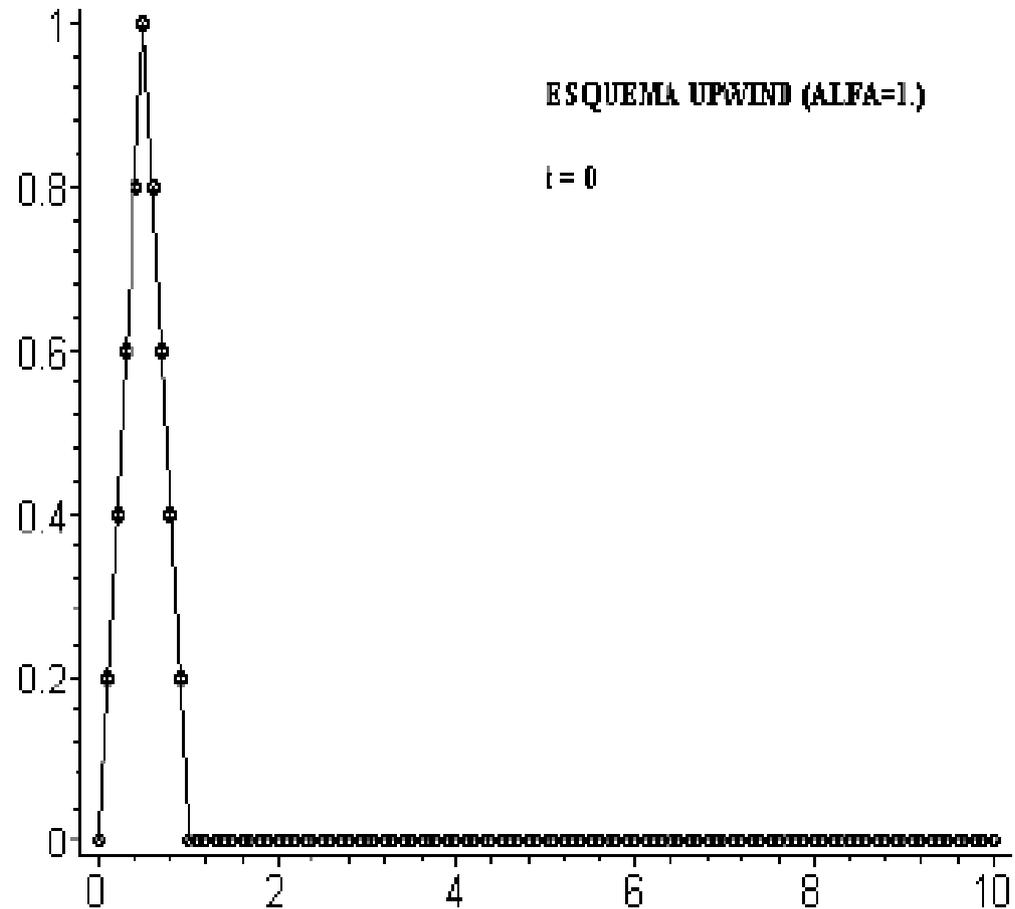
$$u_i^{n+1} = u_{i-1}^n.$$

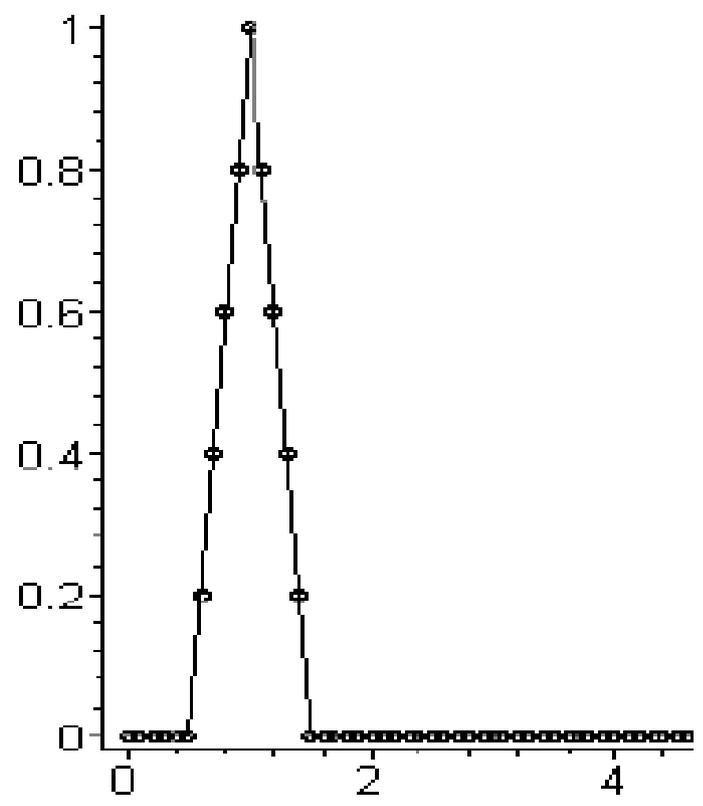
En el instante de cálculo  $t^1 = 0.1$  se irán obteniendo las siguientes aproximaciones de la solución:

$$u_1^1 = u_I(0.1) = 0, \quad u_2^1 = u_1^0 = 0., \quad u_3^1 = u_2^0 = 0.2, \quad u_4^1 = u_3^0 = 0.4, \dots$$

Una vez conocidas las soluciones en el instante  $t^1$  podrán calcularse la del instante  $t^2 = 0.2$

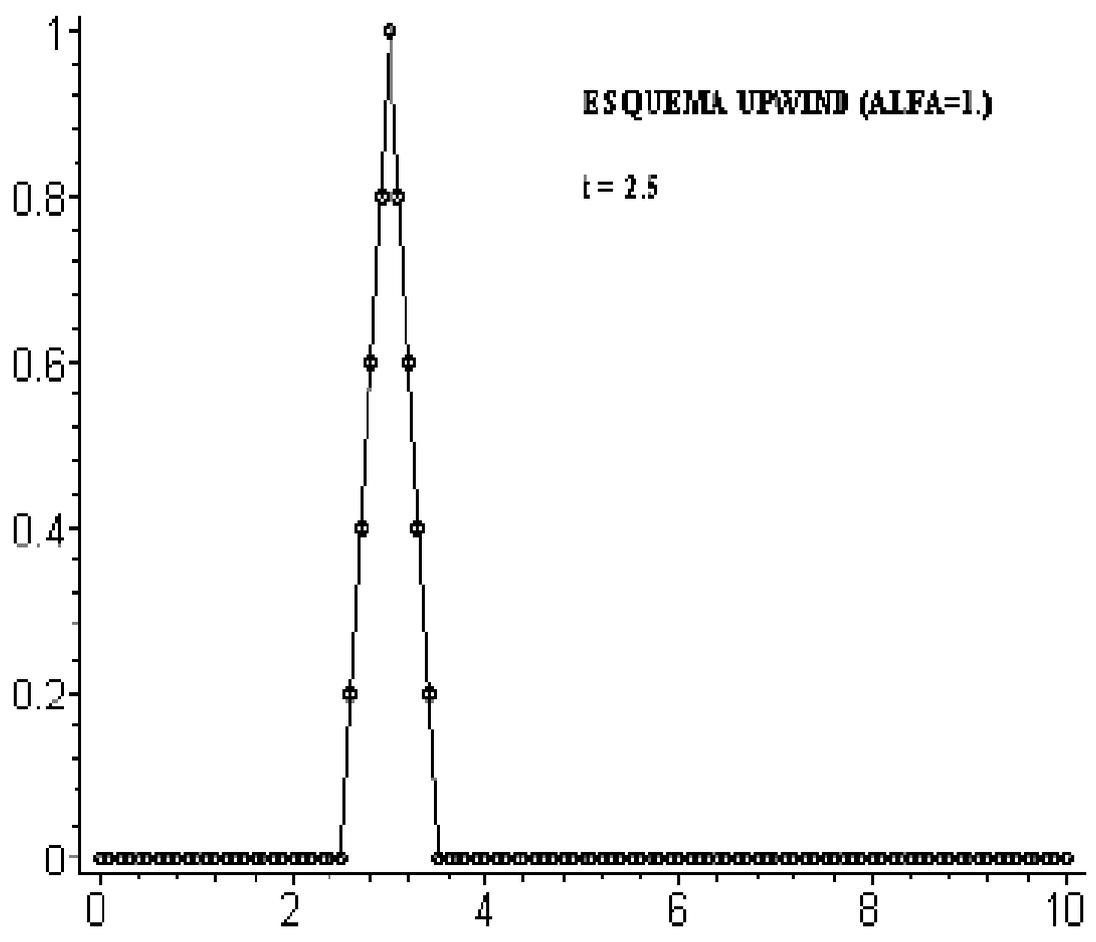
En las figuras siguientes se recogen las gráficas de la solución aproximada y de la solución analítica que como ves son coincidentes.





ESQUEMA UPWIND (ALFA=1.)

$t = 0.5$



ESQUEMA UPWIND (ALFA=1.)

$t = 2.5$

Volvamos a repetir el proceso anterior manteniendo  $\Delta x = 0.1$  pero disminuyendo el valor de  $\Delta t$  al valor  $\Delta t = 0.05$ . Ello nos conduce a que el número de Courant en este caso es:

$$c = V \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} = 0.5$$

por lo que el esquema de cálculo se reduce a:

$$u_i^{n+1} = \frac{u_{i-1}^n + u_i^n}{2}$$

lo que, partiendo de los mismos valores iniciales nos conduce para el instante  $t^1 = 0.05$  a los valores:

$$u_1^1 = u_I(0.05) = 0$$

$$u_2^1 = \frac{u_1^0 + u_2^0}{2} = \frac{0 + 0.2}{2} = 0.1$$

$$u_3^1 = \frac{u_2^0 + u_3^0}{2} = \frac{0.2 + 0.4}{2} = 0.3$$

$$u_4^1 = \frac{u_3^0 + u_4^0}{2} = \frac{0.4 + 0.6}{2} = 0.5$$

$$u_5^1 = \frac{u_4^0 + u_5^0}{2} = \frac{0.6 + 0.8}{2} = 0.7$$

.....

Una vez obtenidos los valores en  $t^1 = 0.05$  podremos pasar a estimar los valores nodales en el instante  $t^2 = 0.1$  mediante:

$$u_1^2 = u_I(0.1) = 0$$

$$u_2^2 = \frac{u_1^1 + u_2^1}{2} = \frac{0 + 0.1}{2} = 0.05$$

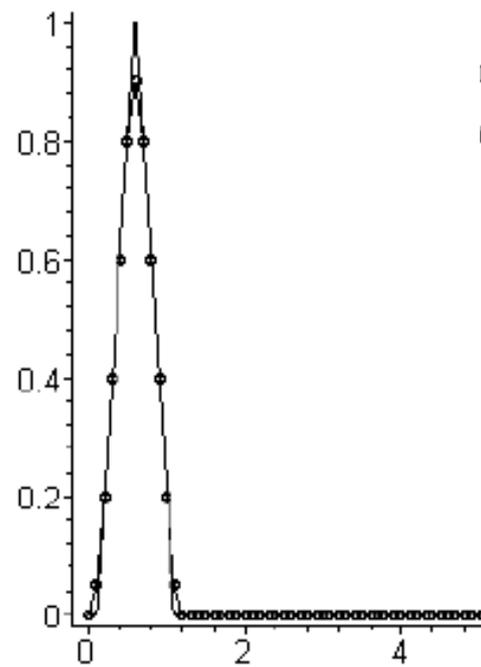
$$u_3^2 = \frac{u_2^1 + u_3^1}{2} = \frac{0.1 + 0.3}{2} = 0.2$$

$$u_4^2 = \frac{u_3^1 + u_4^1}{2} = \frac{0.3 + 0.5}{2} = 0.4$$

$$u_5^2 = \frac{u_4^1 + u_5^1}{2} = \frac{0.5 + 0.7}{2} = 0.6$$

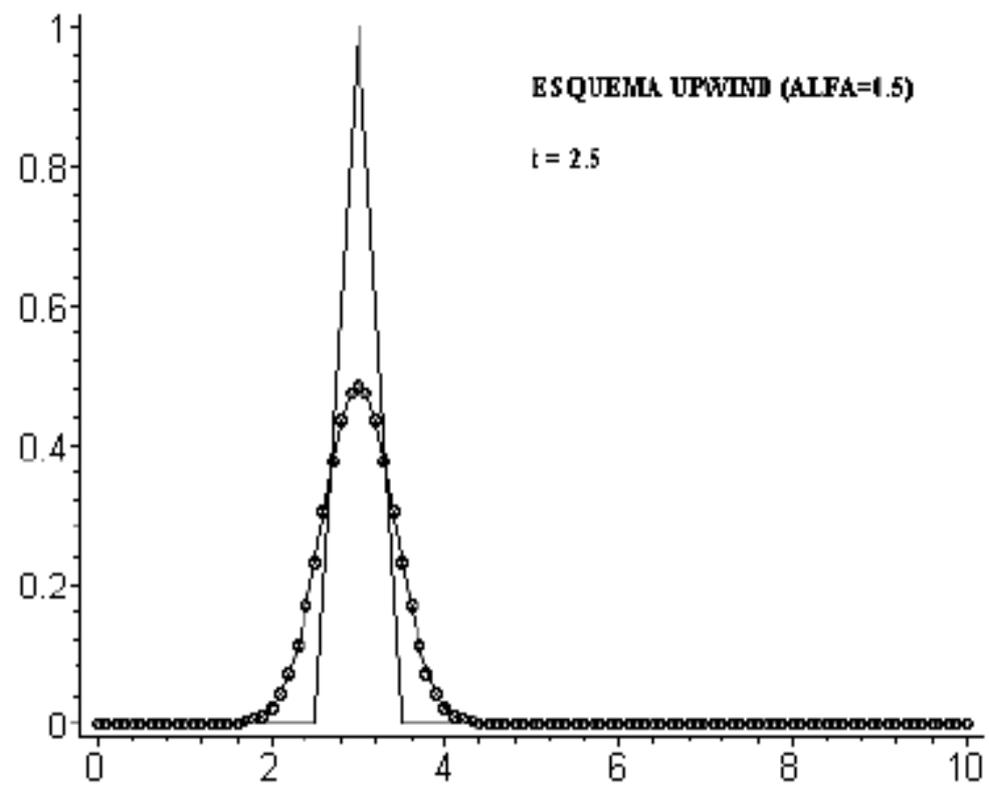
.....

Si representamos los valores que se van obteniendo en sucesivos instantes de tiempo obtendremos las siguientes gráficas:



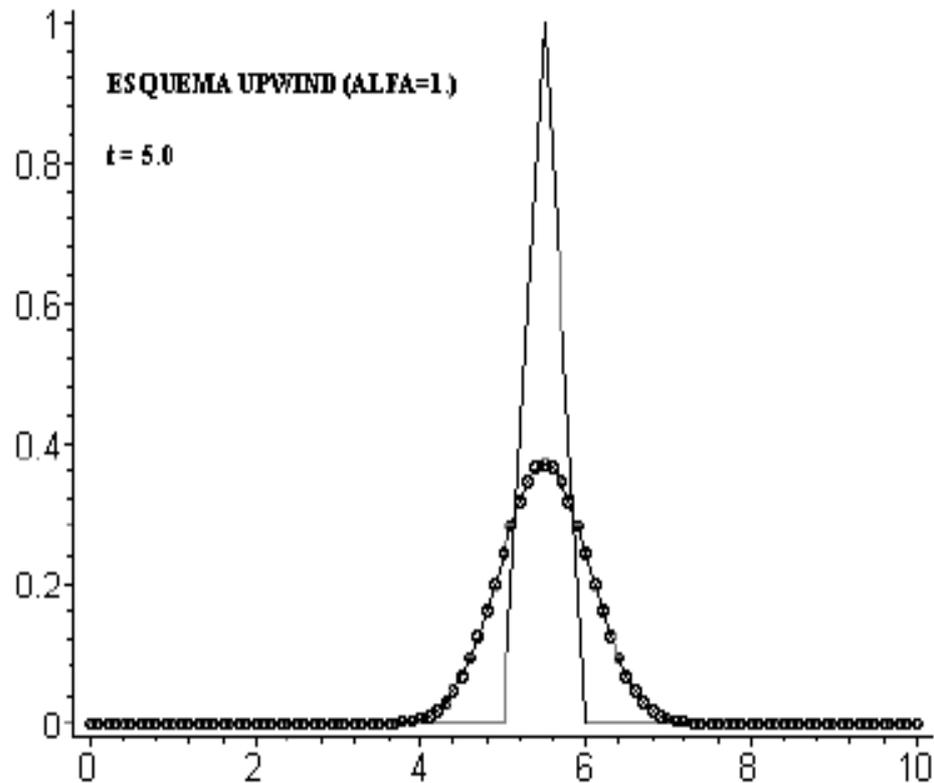
ESQUEMA UPWIND (ALFA=1.5)

t = 0.1



ESQUEMA UPWIND (ALFA=1.5)

t = 2.5



**Teorema:** Una condición necesaria y suficiente para que el esquema “upwind” sea estable es que se verifique la condición:

$$c = V \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1.$$

## 6. Resolución de problemas de difusión-convección-reacción en dominios 2D

Sea  $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ , un rectángulo abierto de  $\mathbb{R}^2$ , de frontera  $\partial\Omega$ . Consideremos ahora el problema formulado por la EDP:

$$\begin{aligned} -D_1 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) - D_2 \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y) + V_1 \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) + V_2 \cdot \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) + \\ + q \cdot u(x, y) = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \end{aligned}$$

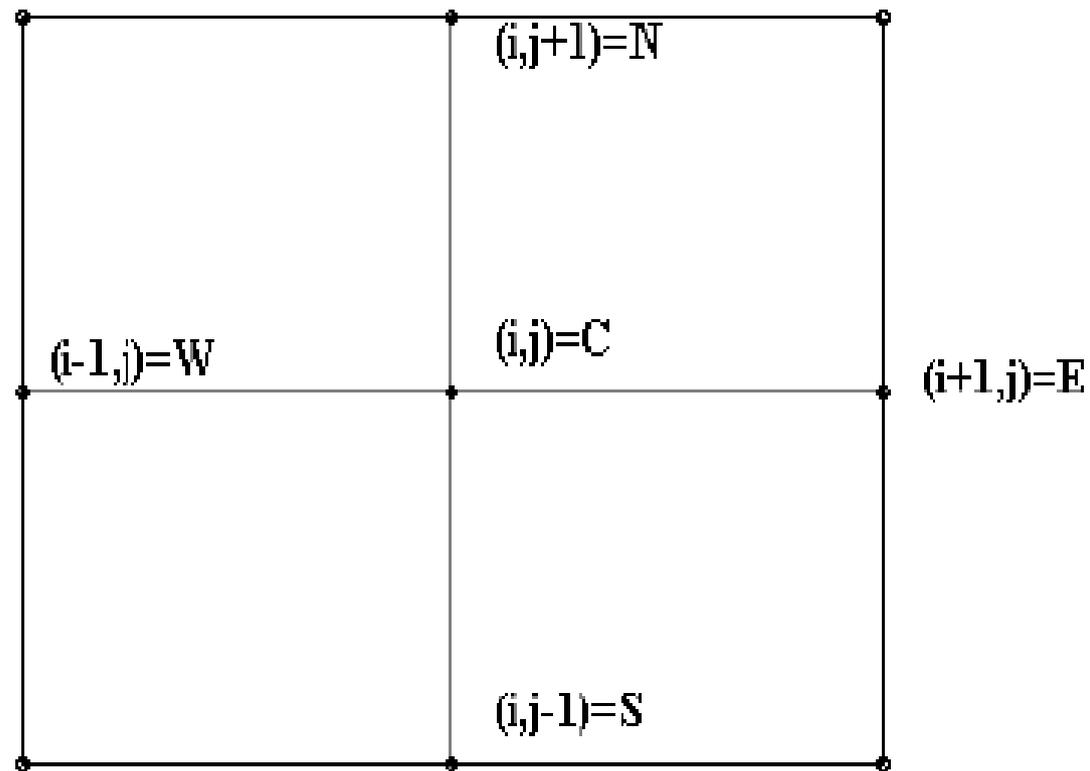
con la condición de contorno:  $u(x, y) = u_D(x, y)$ ,  $(x, y) \in \partial\Omega$ .

Mallado:  $0 = x_1 < \dots < x_i < \dots < x_{NX} < x_{NX+1} = L_x$ ,  $h = x_i - x_{i-1}$ ,

$$0 = y_1 < \dots < y_i < \dots < y_{NY} < y_{NY+1} = L_y, \quad k = y_i - y_{i-1}$$

Nodos:  $n_{i,j} = (x_i, y_j)$  ( $i = 1, 2, \dots, NX + 1$ ;  $j = 1, 2, \dots, NY + 1$ ).

$NN = (NX + 1) \cdot (NY + 1) :=$  número total de nodos,  
 $NF = 2 \cdot (NX + NY + 1) :=$  número de nodos frontera.



Esquema centrado puede realizarse planteando la EDP en el nodo C:

$$-D_1 \cdot \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_C - D_2 \cdot \left( \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_C + V_1 \cdot \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_C + V_2 \cdot \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_C + q \cdot u_C = f_C$$

$$\rightsquigarrow -D_1 \cdot \frac{u_W - 2 \cdot u_C + u_E}{h^2} - D_2 \cdot \frac{u_S - 2 \cdot u_C + u_N}{k^2} + V_1 \cdot \frac{u_E - u_W}{2 \cdot h} +$$

$$+ V_2 \cdot \frac{u_N - u_S}{2 \cdot k} + q \cdot u_C = f_C \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left( \frac{-D_2}{k^2} - \frac{V_2}{2 \cdot k} \right) u_S + \left( \frac{-D_1}{h^2} - \frac{V_1}{2h} \right) u_W + \left( \frac{2D_1}{h^2} + \frac{2D_2}{k^2} + q \right) u_C +$$

$$+ \left( \frac{-D_1}{h^2} + \frac{V_1}{2h} \right) u_E + \left( \frac{-D_2}{k^2} + \frac{V_2}{2k} \right) u_N = f_C$$

$$a_S \cdot u_S + a_W \cdot u_W + a_C \cdot u_C + a_E \cdot u_E + a_N \cdot u_N = f_C$$

Caso descentrado:

$$a_S \cdot u_S + a_W \cdot u_W + a_C \cdot u_C + a_E \cdot u_E + a_N \cdot u_N = f_C$$

$$a_S = \left( -\frac{D_2}{k^2} - \frac{\rho_2 \cdot V_2}{k} \right), \quad a_W = \left( -\frac{D_1}{h^2} - \frac{\rho_1 \cdot V_1}{h} \right)$$

$$a_C = \left( \frac{2 \cdot D_1}{h} + \frac{2 \cdot D_2}{k} + \frac{(2 \cdot \rho_1 - 1) \cdot V_1}{h} + \frac{(2 \cdot \rho_2 - 1) \cdot V_2}{k} + q \right)$$

$$a_E = \left( \frac{(1 - \rho_1) \cdot V_1}{h} - \frac{2 \cdot D_1}{h} \right), \quad a_N = \left( \frac{(1 - \rho_2) \cdot V_2}{k} - \frac{2 \cdot D_2}{k} \right)$$

$$\rho_1 = (1/2) + |V_1|/(2 \cdot V_1), \quad \rho_2 = (1/2) + |V_2|/(2 \cdot V_2).$$

B. Aproximación del operador laplaciano por esquemas de 5 puntos y de 9 puntos.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta u(x, y) = f(x, y) \text{ en } \Omega, \\ u(x, y) = u_D(x, y) \text{ en } \partial\Omega. \end{array} \right\}$$

$C = (i, j)$ ,  $N = (i, j + 1)$ ,  $S = (i, j - 1)$ ,  $W = (i - 1, j)$ ,  $E = (i + 1, j)$ .

$$\frac{u_{i-1,j} - 2 \cdot u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j-1} - 2 \cdot u_{i,j} + u_{i,j+1}}{k^2} = f_{i,j}$$

$$\frac{1}{k^2} \cdot u_{i,j-1} + \frac{1}{h^2} \cdot u_{i-1,j} - \left( \frac{2}{h^2} + \frac{2}{k^2} \right) \cdot u_{i,j} + \frac{1}{h^2} \cdot u_{i+1,j} + \frac{1}{k^2} \cdot u_{i,j+1} = f_{i,j}$$

Esquema de 5 puntos (en cruz), uno de los más frecuentemente utilizados para la aproximación de este tipo de operadores. Si  $h = k$  el esquema queda:

$$\frac{u_{i,j-1} + u_{i-1,j} - 4 \cdot u_{i,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}}{h^2} = f_{i,j}$$

Esquema de nueve puntos:

$$\Delta u(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i-1,j-1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j+1}}{6 \cdot h^2} + \frac{4 \cdot (u_{i,j-1} + u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j+1}) - 20 \cdot u_{i,j}}{6 \cdot h^2},$$

presenta un orden de consistencia local del orden  $O(h^2)$ .

Imposición de condiciones de contorno :

**Tipo Dirichlet**

$$u(x, y) = u_D(x, y) \quad (x, y) \in \partial\Omega$$

**De flujo**

$$\left( [\alpha(x, y)] \cdot \nabla u(x, y) + \vec{\beta}(x, y) \cdot u(x, y) \right) \bullet \vec{n} = g(x, y) \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega$$

**Ejercicio 4.4** Considera el dominio abierto  $\Omega$  de frontera formada por los lados  $L1$ ,  $L2$ ,  $L3$  y  $L4$  que se recoge en la Figura 4.3. Sobre dicho dominio se pretende resolver mediante un método en diferencias finitas el problema de contorno siguiente:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (\nabla u(x, y)) + \nabla \cdot (\vec{V}(x, y) \cdot u(x, y)) + u(x, y) = 0 & \text{en } \Omega \\ [-\nabla u(x, y) + \vec{V}(x, y) \cdot u(x, y)] \cdot \vec{n}(x, y) = 0 & \text{en } L3 \cup L4 \\ u(x, y) = 0 & \text{en } L1 \cup L2. \end{cases}$$

donde  $\vec{V}(x, y)$  es el campo de velocidades de convección dado por:

$$\vec{V}(x, y) = \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix}$$

Se pide escribir las ecuaciones algebraicas a las que conduce el plantear un esquema en diferencias finitas de 5 puntos en cruz para la aproximación del término difusivo y descentrado contracorriente para la aproximación del término convectivo, junto a, en su caso, la imposición de las correspondientes condiciones de contorno, en los nodos 9, 10 y 12 del mallado dado.

|    |    |    |    |         |
|----|----|----|----|---------|
|    | L2 |    |    |         |
|    | 13 | 14 | 15 | 16      |
|    | 9  | 10 | 11 | 12      |
| L1 | 5  | 6  | 7  | L3<br>8 |
|    | 1  | 2  | 3  | 4       |
|    | L4 |    |    |         |

En primer lugar operamos en la ecuación:

$$-\nabla \bullet (\nabla u(x, y)) + \nabla \bullet (\vec{V}(x, y) \cdot u(x, y)) + u(x, y) = 0$$

teniendo en cuenta la definición de  $\vec{V}(x, y)$  para obtener que:

$$-\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + \frac{\partial}{\partial x}(-yu) + \frac{\partial}{\partial y}(xu) + u = 0,$$

$$-\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) - y \frac{\partial u}{\partial x} + x \frac{\partial u}{\partial y} + u = 0.$$

Comenzamos hallando la ecuación para el nodo interior 10 de coordenadas  $(1, 2)$ , aplicando el esquema en diferencias que nos dice el enunciado: 5 puntos en cruz para aproximar el operador laplaciano y descentrado contracorriente para el término convectivo.

$$-\left(\frac{u_{14} + u_9 - 4u_{10} + u_6 + u_{11}}{1^2}\right) + (-2)\left(\frac{u_{11} - u_{10}}{1}\right) + \frac{u_{10} - u_6}{1} + u_{10} = 0,$$

es decir, la ecuación para el nodo 10 es:

$$-2u_6 - u_9 + 8u_{10} - 3u_{11} - u_{14} = -2u_6 + 8u_{10} - 3u_{11} = 0,$$

puesto que  $u_9 = 0$  y  $u_{14} = 0$  por la condición de contorno.

Para el nodo 12, de coordenadas (3, 2), nos damos cuenta de que vamos a necesitar trabajar con un nodo ficticio  $A$  a su derecha, es decir, localizado en la coordenadas  $A = (4, 2)$ . El esquema queda como sigue:

$$-\left(\frac{u_{16} + u_{11} - 4u_{12} + u_A + u_8}{1^2}\right) + (-2)\left(\frac{u_A - u_{12}}{1}\right) + 3\left(\frac{u_{12} - u_8}{1}\right) + u_{12} = 0.$$

Para eliminar el valor nodal ficticio utilizamos la condición de contorno en el nodo 12 y tenemos que como  $\vec{n}_{12} = (1, 0)$ , entonces:

$$\left[-\left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right)_{12} + (-2u_{12}, 3u_{12})\right] \cdot (1, 0) = 0 \quad , \text{ es decir, } \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{12} = -2u_{12}$$

Usando la fórmula en diferencias finitas centradas nos queda que

$$\left(\frac{u_F - u_{12}}{1}\right) = -2u_{12},$$

que operando queda como

$$u_F = -u_{12}$$

Por tanto, sustituyendo en la ecuación en diferencias que teníamos para el nodo 12, resulta que la ecuación para el nodo 12 es:

$$-4u_8 - u_{11} + 11u_{12} - u_{16} = -4u_8 - u_{11} + 11u_{12} = 0,$$

puesto que  $u_{16} = 0$  por la condición de contorno.

**Ejercicio 4.5** Sea  $\Omega$  el triángulo rectángulo de vértices  $(0,0)$ ,  $(4,0)$  y  $(0,4)$ . En él se considera el mallado que aparece en la Figura 4.4 y el problema siguiente:

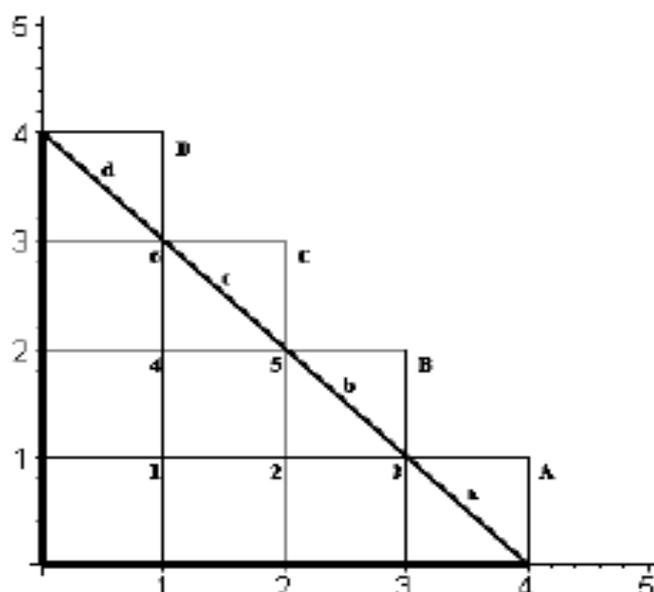


Figura 4.4: Dominio triangular  $\Omega$  con un mallado de tamaño  $h = 1$ .

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (3 \cdot \nabla u(x, y)) + \nabla \cdot (\vec{V}(x, y) \cdot u(x, y)) + u(x, y) = f(x, y) & \text{en } \Omega \\ u(x, 0) = 0, \quad u(0, y) = 0, \\ (-3 \cdot \nabla u(x, y) + \vec{V}(x, y) \cdot u(x, y)) \cdot \vec{n}(x, y) = 0 & \text{en } L \end{cases}$$

donde

$$\vec{V}(x, y) = \begin{pmatrix} -x \\ y \end{pmatrix}, \quad f(x, y) = xy$$

y  $L$  es el lado que une los vértices  $(4,0)$  y  $(0,4)$  del triángulo.

*Se pide obtener una aproximación del valor que toma la solución en los nodos 2, 3, y 6 del mallado mediante un esquema de diferencias finitas de 5 puntos en cruz para el término difusivo y descentrado contracorriente para el término convectivo.*

**Solución.** En primer lugar operamos en la ecuación de transporte para obtener:

$$-3 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - x \frac{\partial u}{\partial x} + y \frac{\partial u}{\partial y} + u = xy.$$

Comenzamos hallando la ecuación para el nodo 6 de coordenadas  $(2, 1)$ , aplicando el esquema en diferencias que nos dice el enunciado: 5 puntos en cruz para aproximar el operador laplaciano y descentrado contracorriente para el término convectivo, tomando como paso de discretización tanto en  $x$  como en  $y$ ,  $h = 1$ . Considerando que el valor de  $u$  en el nodo que está debajo del 2 es cero por la condición  $u(x, 0) = 0$ , resulta

$$-3 \left( \frac{u_5 + 0 - 4u_2 + u_1 + u_3}{1^2} \right) + (-2) \left( \frac{u_3 - u_2}{1} \right) + \frac{u_2 - 0}{1} + u_2 = 2,$$

es decir, la ecuación para el nodo 2 queda como:

$$-3u_1 + 16u_2 - 5u_3 - 3u_5 = 2.$$

En referencia al nodo 3 de coordenadas  $(3, 1)$ , nos damos cuenta de que vamos a necesitar trabajar con dos nodos ficticios,  $A$  y  $B$ . El esquema queda como sigue:

$$-3 \left( \frac{u_2 + u_A - 4u_3 + 0 + u_B}{1^2} \right) + (-3) \left( \frac{u_A - u_3}{1} \right) + \frac{u_3 - 0}{1} + u_3 = 3.$$

Nótese que el valor de  $u$  en el nodo que está debajo del 3 es cero por la condición  $u(x, 0) = 0$ . Para eliminar los valores nodales ficticios utilizamos la condición de contorno en los puntos  $a = (3.5, 0.5)$  y  $b = (2.5, 1.5)$ , siendo para ambos la normal exterior  $\vec{n} = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ . Entonces:

$$\left[ -3 \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right)_a + (-3.5u_a, 0.5u_a) \right] \cdot \vec{n} = 0 \quad \implies \quad -3 \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} - \frac{3}{\sqrt{2}} u_a = 0$$

Al aplicar la fórmula en diferencias descentrada para la derivada normal se tiene  $-3 \frac{u_A - u_a}{\sqrt{2}/2} - \frac{3u_a}{\sqrt{2}} = 0$  y  $u_a = \frac{u_3 + 0}{2}$ , obtenemos entonces que

$$u_A = \frac{1}{4} u_3.$$

Por otro lado,

$$\left[ -3 \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right)_b + (-2.5u_b, 1.5u_b) \right] \cdot \vec{n} = 0 \quad \implies \quad -3 \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} - \frac{1}{\sqrt{2}} u_b = 0$$

Al aplicar la fórmula en diferencias descentrada para la derivada normal se tiene  $-3\frac{u_A - u_a}{\sqrt{2}/2} - \frac{3u_a}{\sqrt{2}} = 0$  y  $u_a = \frac{u_3 + 0}{2}$ , obtenemos entonces que

$$u_A = \frac{1}{4}u_3.$$

Por otro lado,

$$\left[ -3 \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right)_b + (-2.5u_b, 1.5u_b) \right] \cdot \vec{n} = 0 \quad \Rightarrow \quad -3\frac{\partial u}{\partial \vec{n}} - \frac{1}{\sqrt{2}}u_b = 0$$

Como  $\frac{u_B - u_b}{\sqrt{2}/2} = -\frac{u_b}{3\sqrt{2}}$  y  $u_b = \frac{u_3 + u_5}{2}$ , queda entonces

$$u_B = \frac{5}{6}(u_3 + u_5).$$

Por tanto, sustituyendo en la ecuación en diferencias que tendíamos para el nodo 3, resulta que la ecuación para el nodo 3 es:

$$-3u_2 + \frac{57}{4}u_3 - \frac{5}{4}u_5 = 3.$$

En referencia al nodo 6 de coordenadas  $(1, 3)$ , nos damos cuenta de que vamos a necesitar trabajar con dos nodos ficticios,  $C$  y  $D$ . El esquema queda como sigue:

$$-3 \left( \frac{u_D + u_4 + u_A - 4u_6 + 0 + u_C}{1^2} \right) + (-1) \left( \frac{u_C - u_6}{1} \right) + 3 \left( \frac{u_6 - u_4}{1} \right) + u_6 = 3.$$

Para eliminar los valores nodales ficticios utilizamos la condición de contorno en los puntos  $c = (1.5, 2.5)$  y  $d = (0.5, 3.5)$ , siendo para ambos la normal exterior  $\vec{n} = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ , entonces:

$$\left[ -3 \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right)_c + (-1.5u_c, 2.5u_c) \right] \cdot \vec{n} = 0 \quad \Longrightarrow \quad -3 \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} + \frac{1}{\sqrt{2}} u_c = 0$$

Utilizando la fórmula en diferencias descentradas, se tiene que  $\frac{u_C - u_c}{\sqrt{2}/2} = \frac{u_c}{3\sqrt{2}}$  y como  $u_c = \frac{u_6 + u_5}{2}$ , entonces

$$u_C = \frac{7}{12}(u_6 + u_5).$$

Por otro lado,

$$\left[ -3 \left( \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right)_d + (-0.5u_d, 3.5u_d) \right] \cdot \vec{n} = 0 \quad \Longrightarrow \quad -3 \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} + \frac{3}{\sqrt{2}} u_d = 0$$

Como  $\frac{u_D - u_d}{\sqrt{2/2}} = \frac{u_d}{\sqrt{2}}$  y  $u_d = \frac{u_6 + 0}{2}$ , entonces

$$u_D = \frac{3}{4}u_6.$$

Finalmente, sustituyendo en la ecuación en diferencias que tendíamos para el nodo 6, resulta que la ecuación para el nodo 6 es:

$$-6u_4 - \frac{7}{4}u_5 + \frac{149}{12}u_6 = 3.$$

# 7. Resolución con Octave

## 6.6.1. Problemas de transporte estacionario 1-dimensionales

- Coeficientes constantes y condiciones frontera tipo Dirichlet. El siguiente problema de transporte:

$$\begin{cases} -Du''(x) + Vu'(x) + Qu(x) = f(x), & x \in (a, b) \\ u(a) = u_a \\ u(b) = u_b \end{cases}$$

se resuelve mediante el comando:

```
> [xh,uh] = bvpdirichlet(a,b,numeronodos,D,V,Q,f,ua,ub)
```

en donde:

D, V, Q: constantes.

f: función inline o anónima.

numeronodos =  $N+2=1 + \frac{b-a}{h}$ : número de nodos,  
siendo  $h$  es el paso de discretización.

xh: vector que contiene los nodos de la discretización  $xh = (x_1, \dots, x_{N+2})$ .

uh: vector que contiene las aproximaciones numéricas  $uh = (u_1, \dots, u_{N+2})$ .

- Coeficientes no constantes y condiciones frontera generales. El siguiente problema de transporte:

$$\begin{cases} -D(x)u''(x) + V(x)u'(x) + Q(x)u(x) = f(x), & x \in (a, b) \\ c_{11}u'(a) + c_{12}u(a) = u_a \\ c_{21}u'(b) + c_{22}u(b) = u_b \end{cases}$$

se resuelve mediante el comando:

```
> [x,u] = bvp2cvrobinup(a,b,N,D,V,Q,f,c11,c12,...
>c21,c22,ua,ub,esquema)
```

en donde:

D, V, Q: funciones inline o anónimas.

f: función inline o anónima.

N : *número de nodos internos* es decir,  $N = \frac{b-a}{h} - 1$  en donde  $h$  es el paso de discretización.

esquema : 'C' para usar fórmulas centradas,

'U' para usar un esquema, a contracorriente (*upwind*)

para aproximar el término convectivo.

xh: vector que contiene los nodos espaciales,  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_{N+2})$ .

uh: vector que contiene las aproximaciones numéricas  $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_{N+2})$ .

**Ejercicio 4.1** *Se considera el problema de transporte difusivo-convectivo definido por el Problema de Valores de Contorno (PVC):*

$$\begin{cases} -u''(x) + u'(x) = e^x, & x \in (0, 1) \\ u(0) = 1, & u(1) = 0 \end{cases}$$

*cuya solución exacta es  $u(x) = -xe^x + e^x$ .*

- (a) Resolver el problema tomando un paso de discretización  $h = 0.25$  utilizando fórmulas en diferencias finitas centradas, calculando primeramente el sistema asociado al problema en la forma  $A\bar{u} = \bar{b}$ .*
- (b) Calcular el error cometido en los puntos  $x = 0.5$  y en  $x = 1$ .*
- (c) (Octave) Aplicar el algoritmo `bvp.m` para calcular la solución en  $[0, 1]$  tomando un paso de discretización constante  $h = 0.01$ . Calcula la aproximación obtenida en los puntos  $x = 0.5$  y  $x = 1$ . ¿Qué error comete el método en dichas aproximaciones?*
- (c) (Octave) Dibuja la gráfica de la aproximación junto con la solución exacta y la gráfica del error cometido en todo el intervalo  $[0, 1]$ .*

(c) Necesitamos definir

```
> a = 0; b = 1; ua = 1; ub = 0; numerodenodos=1+((b-a)/h);
> D = 1; V = 1; Q = 0;
> f = @(x) exp(x);
```

y llamar al programa

```
> [x,u] = bvpdirichlet(a,b,numeronodos,D,V,Q,f,ua,ub);
```

Los valores en 0.5 y en 0.75 de la solución numérica son respectivamente  $u(51)$  y  $u(101)$ , dando como aproximaciones 0.82436 y 0. La posición 51, por ejemplo, puede obtenerse mediante el comando `find(x==0.5)` o como  $0.5/h+1$ .

Definiendo la solución exacta, podemos calcular el error cometido en  $x = 0.5$  mediante:

```
> uexac = @(x) -x.*exp(x)+exp(x);
> error = abs(u(51)-uexac(0.5))
```

que da como resultado  $2.558724 \cdot 10^{-6}$ . En  $x = 0$  el error es nulo.

(d) Calculamos el vector con los errores cometidos

```
> verror = abs(u-uexact(x));
```

y las gráficas (ver Figura 4.1) se obtienen mediante los comandos

```
> figure; plot(x,u,x,uexact(x)); legend('aprox','exacta')
```

```
> figure; plot(x,verror); title('ERROR')
```

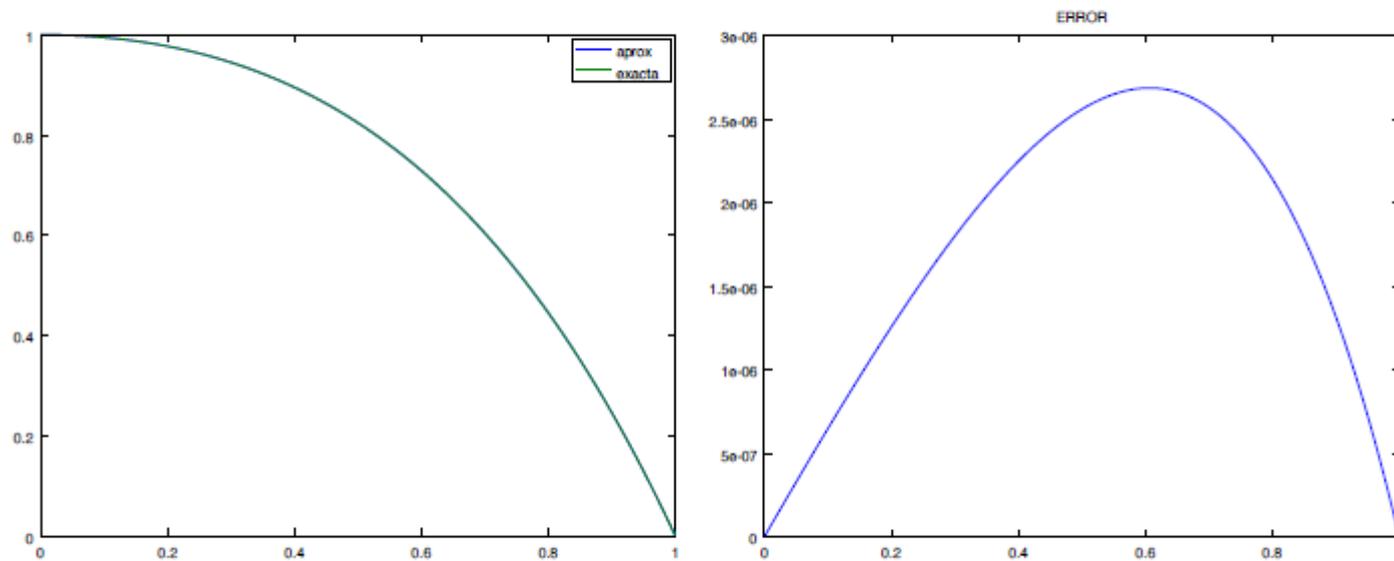


Figura 4.1: Gráfica de la aproximación obtenida (izquierda) y la gráfica del error cometido (derecha).

Se observa como la aproximación y la solución exacta están prácticamente superpuestas y el error es como mucho del orden de  $10^{-6}$ .

### 6.6.2. Problemas de difusión evolutiva 1-dimensionales

El siguiente Problema de Valor Inicial y de Contorno (PVIC)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t) & \forall (x, t) \in (a, b) \times (0, T) \\ u(x, t) = g(x, t) & x = a, \quad x = b \\ u(x, 0) = u_0(x) & x \in (a, b) \end{cases}$$

se resuelve mediante el comando:

```
> [x,uf] = ecucalor(c,intespacio,intiempo,...
> pasosespacio,pasost tiempo,theta,u0,g,f)
```

en donde:

|                              |                                                                                                   |
|------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| intespacio = [a,b]           | - Intervalo espacial.                                                                             |
| intiempo = [0,T]             | - Intervalo temporal.                                                                             |
| pasosespacio y pasost tiempo | - número de intervalos espaciales y temporales.                                                   |
| theta = $\theta$             | - $\theta$ -método de la parte temporal<br>( $\theta = 0$ EE, $\theta = 0.5$ CN, $\theta = 1$ EI) |
| c:                           | constante positiva                                                                                |
| u0,g,f:                      | funciones <code>inline</code> o anónimas.                                                         |

En la salida Octave almacena en el vector  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{N+2})$  los puntos del mallado espacial y en  $\mathbf{uf} = (u_1^T, u_2^T, \dots, u_{N+2}^T)$  los valores de la aproximación buscada en el instante  $t = T$ .

**Observación.** El método es estable sí y sólo sí

$$\iff c(1 - 2\theta) \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2},$$

donde  $\Delta t$  y  $\Delta x$ , son los tamaños de discretización en tiempo y espacio, respectivamente.

**Ejercicio 4.11** (Octave) *Sea dado el PVIC:*

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \\ u(x, t) = g(x, t), \quad x = 0, \quad x = 1, \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in (0, 1) \end{cases}$$

donde

$$\begin{aligned} f(x, t) &= 2t - x^2 + 10xt \\ g(x, t) &= x^2(x - 1), \\ u_0(x) &= 0. \end{aligned}$$

*Aplicar el algoritmo de `ecucalor.m` para calcular la solución en el intervalo temporal  $[0, 1]$  con paso de discretización espacial  $\Delta x = 0.05$  y discretización temporal  $\Delta t = 0.02$ . Dibujar la solución obtenida para  $\theta = 0$  (Euler Explícito). ¿Puedes justificar la gráfica obtenida? Determinar el paso de discretización temporal máximo que asegura estabilidad y calcular la solución para ese paso temporal. ¿Cuánto vale la solución en el punto  $x = 0.85$ ?*

### Solución.

En primer lugar introducimos los datos del problema que vamos a necesitar para ejecutar `ecucalor.m`:

```
> intespacio = [0 1]; inttiempo = [0 1]; pasosespacio=20, pasostiempo=50;
theta = 0; c=1
> u0 = @(x) 0.*x;
> g = @(t,x) x.^2.*(x-1);
> f = @(t,x) 2.*t-x.^2+10.*x.*t;
```

una vez hecho esto, podemos ejecutar el código:

```
> [x,uf] = ecucalor(c,intespacio,inttiempo, ...
> pasosespacio,pasostiempo,theta,u0,g,f);
```

```
> figure;
> plot(x,uf)
```

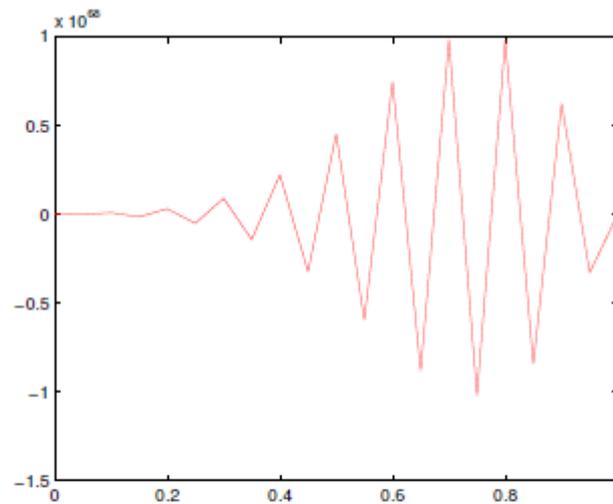
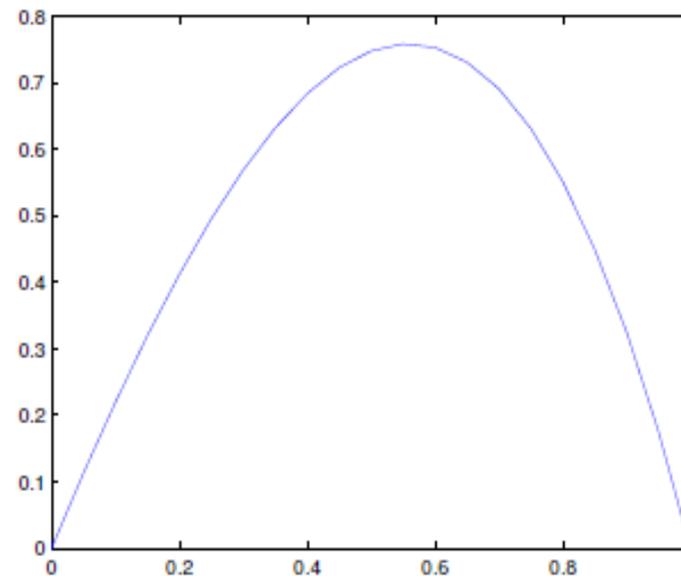


Figura 4.7: Resultados con  $\Delta x = 0.05$  y  $\Delta x = 0.02$ .

```
> pasoespacio=20, pasostiempo=800;
> [x,uf1] =ecucalor(c,intespacio,intiempo, ...
> pasoespacio,pasostiempo,theta,u0,g,f);
> figure;
> plot(x,uf1)
```

Representamos los resultados en la Figura 4.8, y observamos que ahora no aparecen inestabilidades.



{tercersebis2}

Figura 4.8: Resultados con  $\Delta x = 0.05$  y  $\Delta x = 0.00013$ .

### 6.6.3. Problemas de transporte estacionario 2-dimensionales

El siguiente problema de transporte (tipo Poisson):

$$\begin{cases} -\Delta u(x, y) = f(x, y), & \forall (x, y) \in \Omega(a, b) \times (c, d), \\ u(x, y) = cc(x, y), & \forall (x, y) \in \partial\Omega, \end{cases}$$

se resuelve mediante los comandos:

```
> [u,x,y] = ecupoisson(a,b,c,d,dx,dy,f,cc)
> [u,x,y,error] = ecupoisson(a,b,c,d,dx,dy,f,cc,solexac)
```

dependiendo de si la solución exacta es conocida o no. Los argumentos son los siguientes:

- dx es el tamaño de discretización en  $x$ ;
- dy es el tamaño de discretización en  $y$ ;
- f es una función `inline`, con el forzamiento externo;
- cc es una función `inline`, con la condición de contorno;
- solexac es una función `inline`, con la solución exacta (si es conocida);
- error muestra el *error nodal relativo* entre  $u$  y `solexac`  
(error nodal =  $\max_{i,j} |u(x_i, y_j) - u_{ij}| / \max_{i,j} |u(x_i, y_j)|$ ).

Para mostrar la solución utilizamos el comando `mesh(x,y,u)`.

**Ejercicio 4.7** (Octave) *Sea dado el PVC estacionario 2D asociado a la ecuación de Poisson en el dominio  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ :*

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x, y), & (x, y) \in \Omega, \\ u(x, y) = g(x, y), & (x, y) \in \partial\Omega, \end{cases}$$

*en donde*

$$\begin{aligned} f(x, y) &= 4(\cos(x^2 + y^2) - (x^2 + y^2) \sin(x^2 + y^2)), \\ g(x, y) &= 2 - \sin(x^2 + y^2). \end{aligned}$$

*Aplicar el algoritmo de `ecupoisson.m` para calcular la solución utilizando como pasos de discretización  $\Delta x = \Delta y = 0.01$ . Dibujar la solución. Sabiendo que la solución exacta es  $u(x, y) = 2 - (x^2 + y^2)$ , escribir el error cometido en  $(x, y) = (0.24, 0.76)$ .*

**Solución.** Introducimos los datos:

```
> a = 0; b = 1; c = 0; d = 1; dx = 0.01; dy = 0.01;
> f = @(x,y) 4.*(cos(x.^2+y.^2)-(x.^2+y.^2).*sin(x.^2+y.^2));
> g = @(x,y) 2-sin(x.^2+y.^2)

> [uh,x,y,er] = ecupoisson(a,b,c,d,dx,dy,f,g,g);
> surf(x,y,uh)
```

Por último hallamos el error cometido en (0.24, 0.76):

```
> x1 = find(x==0.24); y1 = find(y==0.76); u1 = uh(x1,y1);
> e = u1-g(0.24,0.76)
```

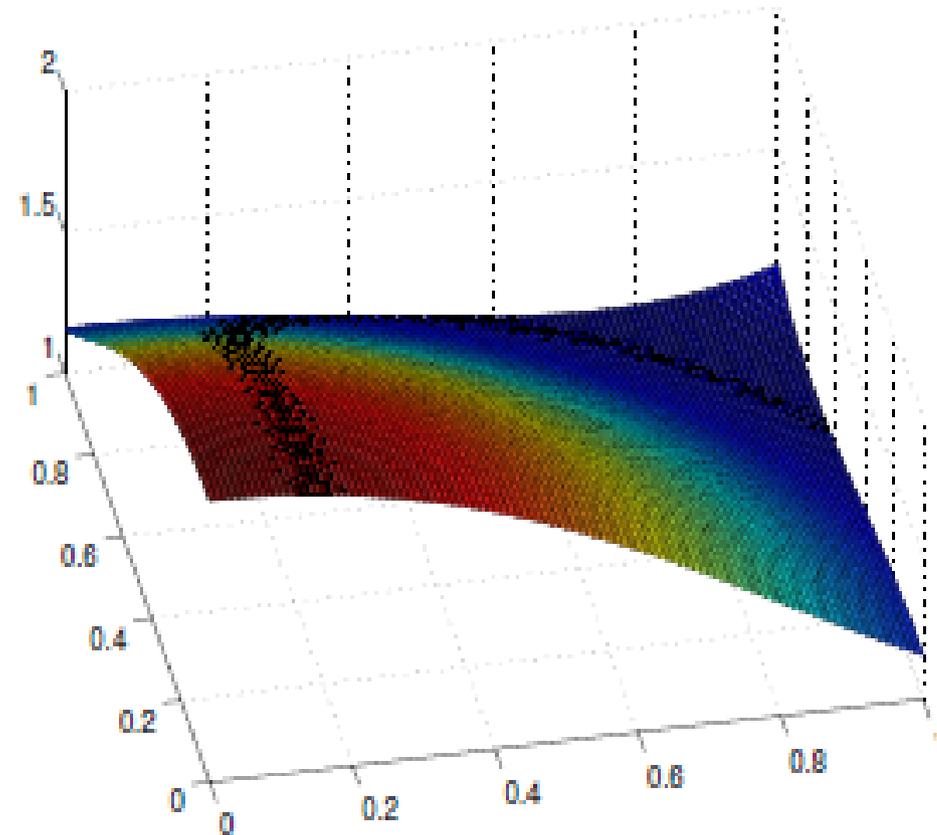


Figura 4.6: Solución numérica.