Elementos de Cálculo Numérico (M) - Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2015

1 Trabajo Práctico: Ecuación del calor

Consideremos la ecuación en derivadas parciales:

$$u_t = u_{xx} \tag{1}$$

llamada ecuación del calor, para $(t, x) \in [0, 1] \times [0, 1]$, con condiciones de contorno

$$u(t, 0) = 0 \qquad u(t, 1) = 0 \tag{2}$$

y dato inicial

$$u(0, x) = \operatorname{sen}(\pi x) \tag{3}$$

Esta ecuación refleja la evolución de la temperatura en una barra que ocupa el segmento $[0, 1]$, sin pérdidas laterales de calor, y con una temperatura inicial dada por (3). Además, los extremos se mantienen a temperatura igual a cero para todo t. El problema con este tipo de condiciones de contorno se denomina problema de Dirichlet.

Ejercicios:

1. Resuelva este problema numéricamente de la siguiente manera. Primero discretice el espacio con una malla $0 = x_0 < \cdots < x_n = 1$, después defina las funciones incógnita $\phi_i(t), i = 0, \ldots, n$, como los valores de la solución $\phi_i(t) = u(t, x_i)$.

   Ahora muestre que si aproximamos u_{xx} por

   $$u_{xx}(t, x) \backsimeq \frac{u(t, x + h) - 2u(t, x) + u(t, x - h)}{h^2}, \tag{4}$$

   para h pequeño, obtenemos un sistema de ecuaciones ordinarias para las $\phi_i, 0 < i < n$ de la forma:

   $$\frac{d\boldsymbol{\phi}}{dt}(t) = A_h\, \boldsymbol{\phi}(t), \tag{5}$$

   en donde A_h es una matriz que depende del paso $h = 1/n$. Para este ítem puede consultar el capítulo 9 de R.Kincaid & W. Cheney, *Análisis Numérico* o bien el capítulo 12 de R. Burden & J. Faires, *Análisis Numérico*.

   Observe que las condiciones (2) pueden ser usadas para generar ecuaciones para ϕ_0 y ϕ_n respectivamente.

   A continuación obtenga la solución exacta del problema (5) con $\phi_0(t) = \phi_n(t) = 0$ para todo $t \in [0, 1]$ y $\phi_i(0) = \operatorname{sen}(\pi x_i)$ para $i \in \{1, \ldots, n - 1\}$. Compare con la solución del problema (1), condiciones de contorno (2) y dato inicial (3), que es $u(t, x) = e^{-\pi^2 t}\operatorname{sen}(\pi x)$ (se puede obtener mediante el método de separación de variables).

2. Ahora discretice además el tiempo: $0 = t_0 < \cdots < t_m = 1$ con $k = \frac{1}{m}$ y aproxime u_t por:

$$u_t(t, x) \backsimeq \frac{u(t, x) - u(t-k, x)}{k}. \tag{6}$$

De (4) y (6) verifique que se puede armar el siguiente esquema para aproximar los valores $u(t_j, x_i)$ por los u_i^j (observación: u_i^j se puede despejar en función de términos "previos").

$$\frac{u_i^j - u_i^{j-1}}{k} = \frac{u_{i+1}^{j-1} - 2u_i^{j-1} + u_{i-1}^{j-1}}{h^2}. \tag{7}$$

Programe este método para conseguir una solución numérica al problema inicial.

Muestre la evolución de la temperatura en la barra a lo largo del tiempo mediante una secuencia de gráficos. Estudie el comando `subplot`. Compare gráficamente la solución numérica con la solución exacta.

Elementos de Cálculo Numérico (M) - Cálculo Numérico
Primer Cuatrimestre 2015

2 Trabajo Práctico: Simulación de un ecosistema simple

Consideremos un ecosistema simple que consiste de conejos, que disponen de una cantidad de recursos ilimitada, y de zorros que los depredan para comer. Un modelo clásico de este problema, debido a Volterra, es el siguiente par de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales de primer orden:

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= 2r - \alpha r f & \qquad r(0) &= r_0 \\ \frac{df}{dt} &= -f + \alpha r f & \qquad f(0) &= f_0 \end{aligned}$$

donde t es el tiempo, $r = r(t)$ es el número de conejos, y $f = f(t)$ es el número de zorros. Cuando $\alpha > 0$ los zorros encuentran a los conejos con una probabilidad que es proporcional al producto de sus cantidades. Esto resulta en una disminución del número de conejos, y en un aumento en el número de zorros (por disponibilidad de alimento). ¿Qué ocurre si $\alpha = 0$?

Ejercicios:
Para $\alpha = 0.01$

1. resuelva numéricamente y grafique la solución con $r_0 = 300$ y $f_0 = 150$. ¿Qué observa?

2. resuelva numéricamente y grafique la solución con $r_0 = 15$, y $f_0 = 22$. ¿En algún momento la cantidad de conejos se hace menor que 1? ¿Cómo interpretaría esta situación? Halle condiciones iniciales para las cuales se extingan los zorros. Halle condiciones iniciales con $r_0 = f_0$ de modo que ambas especies se extingan. Grafique cada una de las últimas situaciones.

3. Se han propuesto muchas modificaciones de este sistema simple para reflejar con más precisión lo que ocurre en la naturaleza. Por ejemplo, la modificación

$$\frac{dr}{dt} = 2r\left(1 - \frac{r}{R}\right) - \alpha r f \qquad r(0) = r_0$$

impide que el número de conejos pueda hacerse infinito. Investigue o infiera el papel de R, asígnele un valor adecuado, conteste las mismas preguntas, resuelva numéricamente y haga los mismos gráficos que para el sistema inicial.

Elementos de Cálculo Numérico (M) - Cálculo Numérico
Primer Cuatrimestre 2015

3 Trabajo Práctico: Oscilaciones de una membrana cuadrada I

El problema de la oscilación de una membrana cuadrada fija por sus bordes, puede ser descripto, al menos para pequeñas elongaciones, por la ecuación de ondas con condición de contorno:

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2 \Delta u & (x, y) \in \Omega = [0,1] \times [0,1] \\ & u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

Aquí el operador $\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$. Los datos iniciales adecuados son, por ejemplo, la posición inicial de la membrana y su velocidad inicial. Sin pérdida de generalidad supondremos que $c = 1$.

Ejercicios:

1. Resuelva este problema numéricamente de la siguiente manera. Primero discretice el dominio con una malla $(x_i, y_j) = (i/N, j/N), 0 \leq i, j \leq N$, y el tiempo $t_n = nk$ hasta un T máximo.

   Considerando $u^n_{i,j}$, la aproximación de $u(x_i, y_j, t_n)$ (el valor de la función en el nodo (x_i, y_j, t_n) de la malla), la ecuación puede discretizarse

   $$u^{n-1}_{i,j} - 2u^n_{i,j} + u^{n+1}_{i,j} = \frac{c^2 k^2}{h^2}[u^n_{i-1,j} - 2 + u^n_{i+1,j} + u^n_{i,j-1} - 4u^n_{i,j} + u^n_{i,j+1}] \qquad (1)$$

   donde $h = 1/N$. Por lo tanto, suponiendo conocidos la posición de la membrana a tiempo 0 y a tiempo $-k$, se puede calcular la posición para cualquier t_n posterior. La solución a tiempo cero se conoce por el dato inicial. La condición inicial en la derivada respecto del tiempo permite plantear una ecuación adicional

   $$u^0_{i,j} - u^{-1}_{i,j} = k\frac{du}{dt}(x_i, y_j, t_0)$$

   de la cual despejar el valor de $u^{-1}_{i,j}$. Reemplazando este valor en la ecuación (1), para $n = 0$, se obtiene el valor de u^1.

2. Escriba un programa que resuelva el problema de la membrana, con dato de contorno 0, posición inicial

   $$u_0(x, y) = \text{sen}(\pi x)\text{sen}(\pi y) \qquad (x, y) \in [0,1] \times [0,1]$$

   y velocidad inicial cero. Grafique las soluciones para tiempo $t = 0$, $t = 1$ y otros 7 tiempos intermedios. Estudie el comando `subplot`.

3. Comparando con la solución exacta

$$u(x, y, t) = \text{sen}(\sqrt{2}\pi ct)\text{sen}(\pi x)\text{sen}(\pi y),$$

grafique el error cometido al aproximar $u(x, y, 1)$ en función de h y k, para algún (x, y) en el interior de la malla.

4. Si tiene `Matlab`, podría hacer una animación para ver la oscilación en el tiempo (ver comandos `movie` y `getframe` de `Matlab`).

Elementos de Cálculo Numérico (M) - Cálculo Numérico
Primer Cuatrimestre 2015

4 Trabajo Práctico: Oscilaciones de una membrana cuadrada II

El problema de la oscilación de una membrana cuadrada fija por sus bordes, puede ser descripto, al menos para pequeñas elongaciones, por la ecuación de ondas con condición de contorno:

$$\begin{cases} u_{tt} = c^2 \Delta u & (x,y) \in \Omega = [0,1] \times [0,1] \\ & u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \tag{1}$$

Aquí el operador $\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$. Los datos iniciales adecuados son, por ejemplo, la posición inicial de la membrana y su velocidad inicial. Sin pérdida de generalidad supondremos que $c = 1$.

Resolviendo por el método de separación de variables, se buscan soluciones de la forma $U(t,x,y) = T(t)Z(x,y)$; de modo que

$$\frac{T''(t)}{T(t)} = \frac{\Delta Z(x,y)}{Z(x,y)} = \lambda,$$

para alguna constante λ. Usando la condición de contorno, tenemos que

$$Z|_{\partial\Omega} = 0$$

es decir que y por lo tanto λ es un autovalor de la ecuación de Laplace con datos de contorno Dirichlet homogéneo

$$\begin{cases} \Delta Z - \lambda Z = 0 & (x,y) \in \Omega = [0,1] \times [0,1] \\ & Z|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \tag{2}$$

Se sabe que la ecuación (2) tiene una sucesión de autovalores negativos $\{\lambda_n\}_n$ con correspondientes autofunciones $Z_n(x,y)$ y que $\lambda_n \to -\infty$ cuando $n \to +\infty$. La correspondiente función T_n es una solución de la ecuación

$$T'' - \lambda_n T = 0$$

Si $\lambda_n = -\omega_n^2$ resulta que $T_n(t) = a_n \cos(\omega_n t) + b_n \mathrm{sen}(\omega_n t)$, y de este modo, las soluciones de (1) son de la forma

$$u(t,x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(\omega_n t) + b_n \mathrm{sen}(\omega_n t)) Z_n(x,y) \tag{3}$$

donde los valores a_n y b_n se obtienen a partir de las condiciones iniciales. A los autovalores λ_n se los llama los modos *normales de oscilación*.

Para hallar las soluciones en la forma (3) se necesita calcular los autovalores λ_n y las autofunciones Z_n del problema de Laplace.

Ejercicios:

1. Resuelva este problema numéricamente de la siguiente manera. Primero discretice el dominio $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ con una malla $(x_i, y_j) = (i/N, j/N)$, $0 \leq i, j \leq N$.

   Llamando $h = 1/N$ se obtiene el siguiente esquema, sobre la malla introducida, para aproximar la ecuación (2).

   $$\frac{z_{i+1,j} - 2z_{i,j} + z_{i-1,j}}{h^2} + \frac{z_{i,j+1} - 2z_{i,j} + z_{i,j-1}}{h^2} = \lambda z_{i,j} \quad i, j = 1, \ldots, N-1.$$

   Reescriba esto como un problema lineal $Az = \lambda z$.

2. Calcule los seis primeros autovalores de A, $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_6$, y sus correspondientes autovectores $z^{(1)}, z^{(2)}, \ldots, z^{(6)}$.

3. A partir de (3), se aproxima u:

   $$u(t, x_i, y_j) \backsimeq \sum_{n=1}^{6} (a_n \cos(\sqrt{-\lambda_n} t) + b_n \mathrm{sen}(\sqrt{-\lambda_n} t)) z_{i,j}^{(n)} \tag{4}$$

   y se despejan a_n y b_n para resolver el problema con dato inicial

   $$u_0(x, y) = \mathrm{sen}(\pi x)\mathrm{sen}(\pi y) \quad (x, y) \in [0,1] \times [0,1]$$

   y velocidad inicial cero (es decir $u_t(0, x, y) = 0$, y esto nos lleva a $b_n = 0$ para todo n).

   Grafique las soluciones numéricas para tiempo $t = 0$, $t = 1$ y otros 7 tiempos intermedios. Estudie el comando `subplot`.

4. Si tiene `Matlab`, podría hacer una animación para ver la oscilación en el tiempo (ver comandos `movie` y `getframe` de `Matlab`).

Elementos de Cálculo Numérico (M) - Cálculo Numérico

Primer Cuatrimestre 2015

5 Trabajo Práctico: Método de las potencias para el cálculo de autovalores de una matriz

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ diagonalizable (i.e., existe una base de autovectores) con la propiedad de que tiene un solo autovalor de módulo máximo, entonces podemos ordenar sus autovalores de la siguiente manera:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|,$$

y llamemos w al autovector correspondiente a λ_1.

Consideramos un vector cualquiera no nulo $v \in \mathbb{R}^n$ y la sucesión dada por

$$v_k = A^k v.$$

Aunque en general **no vale** que $v_k \to w$, lo que sí es cierto es que a medida que $k \to +\infty$, los vectores v_k se van alineando con w, con la única condición de que el vector inicial no sea ortogonal a w (para la demostración ver R.Kincaid & W. Cheney, *Análisis Numérico*, pág 229 en adelante).

A partir de esto podemos obtener el valor de λ_1 mediante el cociente de Rayleigh:

$$\lambda_1 = \frac{\langle Aw, w\rangle}{\langle w, w\rangle}.$$

Un método práctico para el cálculo de w y de λ_1 es, sabiendo que $v_k = \lambda_1^k(w + \varepsilon^{(k)})$, (donde $\varepsilon^{(k)} \to 0$), podemos considerar una función lineal cualquiera $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, entonces

$$r_k := \frac{\phi(v_{k+1})}{\phi(v_k)} = \lambda_1 \frac{\phi(w) + \phi(\varepsilon^{(k+1)})}{\phi(w) + \phi(\varepsilon^{(k)})} \to \lambda_1. \tag{1}$$

En la implementación práctica también conviene ir normalizando los v_k para descartar los casos en que los v_k convergen a 0, o divergen en módulo.

Matrices simétricas

Si $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es simétrica y supongamos que tiene sus n autovalores de distintos módulos $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| \geq 0$, entonces, por el método antes descripto, podemos calcular λ_1 y w_1. Ahora queremos hallar un método que nos permita calcular los otros autovalores. Para esto usamos el siguiente resultado:

Si A es como en el párrafo anterior, consideremos $\{w_1, \ldots, w_n\}$ una base ortonormal de $\mathbb{R}^n$ tal que w_i es autovector asociado a λ_i para $1 \leq i \leq n$. Entonces, la matriz

$$B = A - \lambda_1 v_1 v_1^t$$

es simétrica y tiene por autovalores a $0, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ y los correspondientes autovectores son $w_1, w_2, \ldots, w_n$.

Por lo tanto, para calcular λ_2 podemos aplicarle el método a B: ¿Cómo seguiría para calcular λ_3 y todos los demás autovalores?

Aceleración (Aitken)

Si $(r_k)_k$ es la sucesión de (1), consideremos la nueva sucesión

$$s_k = \frac{r_k r_{k+2} - r_{k+1}^2}{r_{k+2} - 2r_{k+1} + r_k}.$$

La sucesión $s_k \to \lambda_1$ y lo hace más rápido que r_k.

Ejercicios:

1. En cada uno de los siguientes casos encuentre el autovalor de módulo mayor y su correspondiente autovector. Si la matriz es simétrica, encuentre todos los autovalores. Estudie el error del método. Repita la estimación para la sucesión de Aitken.

   (a) $A = \begin{pmatrix} 6 & 5 & -5 \\ 2 & 6 & -2 \\ 2 & 5 & -1 \end{pmatrix}$, comenzando en $v = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Sugerencia: tome como función lineal para el cálculo práctico a $\phi(x_1, x_2, x_3) = x_2$.

   (b) $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$. Elija el vector inicial v y la función ϕ