

**Estudio comparativo de métodos numéricos
para resolver ecuaciones en derivadas
parciales lineales**

D. Vives Saumell

Estudio comparativo de métodos numéricos para resolver ecuaciones en derivadas parciales lineales

D. Vives Saumell

Publicación CIMNE Nº 141, Octubre 1998

Índice

	página
<i>Introducción</i>	1
<i>Fundamentaciones teóricas de ciertos métodos</i>	3
<i>Resolución del problema unidimensional</i>	22
<i>Resolución del problema bidimensional</i>	25
<i>Resultados del problema unidimensional</i>	27
<i>Resultados del problema bidimensional</i>	30
<i>Conclusiones</i>	31
<i>Agradecimientos</i>	32
<i>Referencias</i>	33
<i>Anexos</i>	35

1. Introducción

La principal ventaja del método de los elementos finitos y del método de los volúmenes finitos es la capacidad que tienen de tratar con dominios ciertamente complejos de manera simple dándole un carácter local a la aproximación. Estos métodos dividen el dominio en un número finito de subdominios, que cumplen unas condiciones geométricas regulares. Para el caso 2-dimensional, ambos métodos no presentan grandes dificultades para la generación de una malla, mientras que en el caso 3-dimensional ello resulta bastante complicado y es uno de los problemas que actualmente se están estudiando con mayor profundidad, ya que en la mayoría de los casos, la creación de una malla resulta computacionalmente más caro que la resolución numérica del problema.

Principalmente por este motivo, se empezaron a estudiar los denominados métodos sin malla. Los primeros métodos se basaron en un intento de generalizar el método de las diferencias finitas a mallas irregulares.

Otro de los primeros métodos estudiados son los denominados Smooth Particle Hydrodynamics (SPH). Estos métodos trabajan la ausencia de contornos, aunque no son tan precisos, como los métodos de elementos finitos regulares. Esta clase de métodos suele utilizarse frecuentemente para modelar fenómenos astrofísicos que no posean contornos.

Recientemente, se han estudiado una clase de métodos, donde no es necesaria la creación de una malla.

Los dos principales métodos son el método de los elementos difusos (DE), cuyo principal precursor fue Nayroles y el método Element-Free Galerkin (EFG). Ambos se basan en que las funciones interpolatorias son polinomios que tratan de aproximar la función en los nodos por un método de aproximación por mínimos cuadrados. En los dos casos nos basta para formular las ecuaciones de Galerkin con una colección de nodos y una descripción del contorno. La diferencia entre ambos métodos radica es que en los métodos EFG se añaden términos adicionales a las derivadas de los interpolantes, que en el método de los elementos difusos no se consideran necesarios.

Los dos métodos anteriores son consistentes y bastante estables, aunque sustancialmente más caros que los métodos SPH. Gracias a un estudio de Duarte y Oden y a otro de Babuska y Melenk se han comprendido con mayor profundidad, y dicen que son métodos basados en la partición de la unidad. Estos personajes junto con Liu fueron los primeros en probar la convergencia de estos dos métodos.

Finalmente para concluir, hay que destacar la presencia de otra clase de métodos denominados Reproducing Kernel Particle (RKP), cuyo principal precursor fue Liu.

En la sección 2, veremos una introducción teórica a algunos métodos como son elementos finitos, el método de los puntos finitos, el método de los elementos difusos, el método EFG, los métodos SPH y finalmente el método de las diferencias finitas para el caso bidimensional.

En la sección 3, abordaremos algunos aspectos sobre la programación de ellos, que ha sido efectuada, en el caso 1-dimensional, donde se han programado todos los anteriormente citados, salvo los SPH.

La sección 4, contendrá breves remarcas sobre la programación de los métodos en el caso 2-dimensional, donde se han implementado los mismos métodos que en el caso 1-dimensional, con la excepción única de reemplazar el método de los elementos finitos por el de las diferencias finitas.

La sección 5 y 6 se comentarán los resultados obtenidos para el caso 1-dimensional y 2-dimensional respectivamente.

La sección 7 contendrá algunas conclusiones y comentarios sobre el estudio.

2. Fundamentaciones teóricas de ciertos métodos

2.1. Método de los elementos finitos

Supongamos que nuestro problema está regido por una ecuación diferencial del tipo:

$$A(u) = b, \quad \text{en } \Omega$$

con condiciones de contorno:

$$\begin{cases} B(u) = t, & \text{en } \Gamma_t \\ u - u_p = 0, & \text{en } \Gamma_u \end{cases}$$

que pueden también ser escritas de forma compacta como:

$$Mu - q = 0, \quad \text{en } \Gamma$$

en el dominio Ω con contorno $\Gamma = \Gamma_t \cup \Gamma_u$, donde A y B son operadores diferenciales, u es la incógnita del problema, b y t representan las fuerzas externas sobre el dominio Ω y sobre el contorno Γ_t y Γ_u respectivamente y u_p es el valor prescrito de u sobre Γ_u .

2.1.1. Residuos ponderados

2.1.1.1. Aproximación de la ecuación diferencial

Vamos a aproximar nuestra función u por:

$$u \approx u_h = \psi + \sum_{j=1}^M a_j N_j \quad (1)$$

siendo:

a_j : coeficientes constantes.

N_j : funciones de interpolación que cumplen $MN_j = 0$, en Γ .

ψ tal que cumpla las condiciones de contorno en Γ $M\psi - q = 0$, lo que permite debido a la definición de N_j y de ψ que u_h verifique las condiciones de contorno exactamente.

Definiendo M funciones de test ω_i , hay que evaluar los coeficientes a_j tal que:

$$\int_{\Omega} \omega_i (A u_h - b) d\Omega = 0, \quad (2) \quad i = 1, \dots, M$$

donde $\omega_i = 0$, en Γ . Teniendo en cuenta la expresión de u_h (1) y (2), se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$\sum_{j=1}^M a_j \left(\int_{\Omega} \omega_i AN_j d\Omega \right) = - \int_{\Omega} \omega_i A\psi d\Omega + \int_{\Omega} \omega_i b d\Omega, \quad i = 1, \dots, M$$

es decir:

$$\sum_{j=1}^M K_{ij} a_j = f_i, \quad i = 1, \dots, M$$

donde:

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \omega_i AN_j d\Omega$$

$$f_i = - \int_{\Omega} \omega_i A\psi d\Omega + \int_{\Omega} \omega_i b d\Omega$$

Es decir, obtenemos el sistema:

$$K a = f$$

Hay muchas maneras de elegir las funciones test y dependiendo de ello, el resultado será diferente. Vamos a destacar tres:

-Colocación puntual:

$$\omega_i = \delta(x - x_i) = \begin{cases} \infty, & x = x_i \\ 0, & x \neq x_i \end{cases}$$

-Mínimos cuadrados:

$$\omega_i = AN_i$$

-Galerkin:

$$\omega_i = N_i$$

2.1.1.2. Aproximación de la ecuación diferencial y condiciones de contorno

Ahora, la aproximación es de la siguiente forma:

$$u \approx u_h = \sum_{j=1}^M a_j N_j \quad (1)$$

y se deben escoger los a_j de forma que se anulen ambos residuos (dominio y contorno):

$$\int_{\Omega} \omega_i (A u_h - b) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\omega}_i (M u_h - q) d\Gamma = 0 \quad (2)$$

Teniendo en cuenta la expresión de u_h (1) en (2), obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$K a = f$$

donde:

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \omega_i A N_j d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\omega}_i M N_j d\Gamma$$

$$f_i = \int_{\Omega} \omega_i b d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\omega}_i q d\Omega$$

El caso particular de Galerkin consiste en escoger:

$$\omega_i = N_i \quad \bar{\omega}_i = -\omega_i|_{\Gamma}, \quad i = 1, \dots, M$$

2.1.1.3. Aproximación mixta

Se distinguen las condiciones de contorno Dirichlet del resto (Neumann o mixtas).

$$\begin{cases} Au - b = 0, & \text{en } \Omega \\ u - \hat{u} = 0, & \text{en } \Gamma^1 \\ B(u) = t, & \text{en } \Gamma^2 \end{cases}$$

Se define de nuevo una función ψ que verifica las condiciones de Dirichlet, es decir:

$$\psi = \hat{u}; \quad N_j = 0, \quad \omega_i = 0 \quad \text{en} \quad \Gamma_u$$

El método de los residuos ponderados conduce a resolver el siguiente sistema de ecuaciones:

$$K a = f$$

donde ahora:

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \omega_i A N_j d\Omega + \int_{\Gamma_t} \bar{\omega}_i M N_j d\Gamma$$

$$f_i = - \int_{\Omega} \omega_i A \psi d\Omega + \int_{\Omega} \omega_i b d\Omega + \int_{\Gamma_t} \omega_i q d\Gamma - \int_{\Gamma_u} \bar{\omega}_i M \psi d\Gamma$$

2.1.2. Conceptos básicos del método de los elementos finitos

Una vez dicho esto, vamos a entrar un poco más en profundidad en el método de los elementos finitos.

Lo que se pretende con él es subdividir el dominio Ω en subdominios Ω^e disjuntos y cuya unión sea Ω con el propósito de que las integrales anteriores resulten más fáciles de evaluar.

Así:

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \phi d\Omega = \sum_e \int_{\Omega^e} \phi d\Omega$$

Como el valor de la integral depende de la elección de las funciones de interpolación N_i conviene escoger funciones adecuadamente.

En vez de tomar N_i , no nulas en todo Ω , se emplean interpolantes locales.

Las funciones de interpolación se toman nulas en todos los nodos, excepto en uno donde vale 1.

La función ψ asociada a las condiciones de Dirichlet se desarrolla en función de interpolantes del mismo tipo.

Por tanto, los coeficientes a_i del desarrollo son los valores de la función incógnita u_h en los nodos.

En todo momento del estudio, escogeremos funciones lineares triangulares N_i que toman valor unidad en el nodo i y 0 en el resto de los nodos.

Así pues, a partir del desarrollo de los residuos ponderados ya habíamos visto que obteníamos fórmulas para K_{ij} y f_i .

Debido a que se ha subdividido el dominio en elementos, resulta que:

$$K_{ij} = \sum_e K_{ij}^e \quad y \quad f_i = \sum_e f_i^e$$

siendo:

$$K_{ij}^e = \int_{x_e}^{x_{e+1}} g(x) dx$$

$$f_i^e = \int_{x_e}^{x_{e+1}} h(x) dx$$

donde $g(x)$ y $h(x)$ hacen referencia a las fórmulas obtenidas en los anteriores apartados.

Como consecuencia de la utilización de interpolantes locales, obtenemos:

-si $i \neq e$ y $i \neq e + 1$, entonces $K_{ij}^e = 0$.

-si $j \neq e$ y $j \neq e + 1$, entonces $K_{ij}^e = 0$.

Evidentemente, no es necesario generar toda la matriz K^e . Se trabajará con una matriz elemental 2 X 2 con numeración local, es decir:

$$K_{e,e}^e \longrightarrow K_{1,1}^e$$

$$K_{e,e+1}^e \longrightarrow K_{1,2}^e$$

$$K_{e+1,e}^e \longrightarrow K_{2,1}^e$$

$$K_{e+1,e+1}^e \longrightarrow K_{2,2}^e$$

Vamos a definir el término ensamblaje. El ensamblaje es el proceso por el cual una matriz elemental con numeración local "coloca" sus elementos en la posición correcta de la matriz global y las suma a otras matrices elementales.

Con las matrices K y el vector f vamos a efectuar su pertinente ensamblaje.

Las integrales anteriormente expuestas no siempre resultan fáciles de calcular. Por ello, las evaluaremos mediante integración numérica utilizando cuadraturas de Gauss.

2.2. El método de los puntos finitos

2.2.1. Conceptos básicos de los métodos sin malla

Supongamos que queremos resolver un problema del tipo:

$$A(u) = b, \quad \text{en } \Omega$$

con condiciones de contorno:

$$\begin{cases} B(u) = t, & \text{en } \Gamma_t \\ u - u_p = 0, & \text{en } \Gamma_u \end{cases}$$

donde el contorno de Γ es $\Gamma = \Gamma_t \cup \Gamma_u$, A y B son operadores diferenciales, u es la función incógnita, b y t representan fuerzas externas o fuentes que actúan sobre Ω y sobre Γ_t respectivamente y u_p es el valor de u en Γ_u .

Para resolver el anterior sistema, normalmente se utiliza el método de los residuos ponderados, en el que la función incógnita u es aproximada por alguna aproximación \hat{u} y las ecuaciones anteriores equivalen a cumplir:

$$\int_{\Omega} W_i [A\hat{u} - b] d\Omega + \int \bar{W}_i [B\hat{u} - t] d\Gamma + \int_{\Gamma_u} \bar{\bar{W}}_i [\hat{u} - u_p] d\Gamma = 0$$

Con el objetivo de dar un carácter local a nuestro problema (lo cual nos llevará a matrices en banda), la función u se aproximará por $\tilde{u}(x)$ de la siguiente forma:

$$u(x) \approx \tilde{u}(x) = \sum_{i=1}^{np} N_i(x) u_i^h = N^t(u) u^h$$

donde np es el número de puntos del dominio y $N_i(x)$ cumple:

$$N_i(x) \neq 0 \quad \text{si } x \in \Omega_i$$

$$N_i(x) = 0 \quad \text{si } x \notin \Omega_i$$

donde Ω_i es un subdominio de Ω que contiene n puntos, $n \ll np$ y u_i^h es un valor aproximado de u en el punto i .

Estos dominios Ω_i reciben el nombre de dominios de interpolación o nubes.

Vamos a desarrollar un poco más en profundidad la forma de encontrar la solución a nuestro problema inicial.

2.2.2 Aproximaciones por mínimos cuadrados

Sea Ω_k nuestro dominio de interpolación de nuestra función $u(x)$ y sea $s_j, j = 1, \dots, n$ una colección de puntos tales que $x_j \in \Omega_k$. Dicho esto, aproximaremos nuestra función u en Ω_k por:

$$u(x) \cong \hat{u}(x) = \sum_{i=1}^m p_i(x) \alpha_i = p(x)^T \alpha$$

donde $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_m]^T$ y el vector $p(x)$ está formado por monomios. Así pues, si estamos trabajando en problemas unidimensionales, si escogemos $m = 3$, $p(x) = [1, x, x^2]$; en 2D, si $m = 6$, escogemos $p(x) = [1, x, y, x^2, xy, y^2]$.

Así pues:

$$u^h = \begin{Bmatrix} u_1^h \\ \dots \\ u_n^h \end{Bmatrix} \cong \begin{Bmatrix} \hat{u}_1 \\ \dots \\ \hat{u}_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} p_1^t \\ \dots \\ p_n^t \end{Bmatrix} \alpha = C h$$

donde $u_j^h = u(x_j)$ son los valores incógnitas de u en el punto j que buscamos, $\hat{u}_j = \hat{u}(x_j)$ son los valores aproximados y $p_j = p(x_j)$.

Observamos que el método de los elementos finitos es un caso particular del método de los puntos en el caso que $n = m$.

Vamos a tratar los dos casos:

a) Si $n = m$, C es una matriz cuadrada de dimensión n , y por tanto:

$$\alpha = C^{-1} u^h$$

De aquí resulta:

$$u \cong \hat{u} = p^T C^{-1} u^h = N^T u^h = \sum_{j=1}^n N_j u_j^h$$

donde $N^T = [N_1, \dots, N_n] = p^T C^{-1}$ y $N_j = \sum_{i=1}^m p_i(x) C_{ij}^{-1}$

Las funciones $N_j(x)$ satisfacen la condición: $N_j(x) = 1$, si $j = i$ y $N_j(x) = 0$, si $j \neq i$, $i, j = 1, \dots, n$, que es lo que pasaba en el método de los elementos finitos.

Si $n > m$ (aproximación por mínimos cuadrados), C ya no es una matriz cuadrada y la aproximación no se ajusta para todos los valores u_j^h . Este problema se resuelve determinando los valores de \hat{u} que minimicen la suma de los cuadrados de las distancias del error en cada punto

$$J = \sum_{j=1}^n (u_j^h - \hat{u}(x_j))^2 = \sum_{j=1}^n (u_j^h - p_j^T \alpha)^2$$

con respecto a los parámetros α_i .

Esta minimización nos conduce a:

$$\alpha = \bar{C}^{-1} u^h, \text{ donde } \bar{C}^{-1} = A^{-1} B$$

$$A = \sum_{j=1}^n p(x_j) p^T(x_j)$$

$$B = [p(x_1), \dots, p(x_n)]$$

Ahora las nuevas funciones de forma son:

$$N_j^k = \sum_{i=1}^m p_i(x) \bar{C}_{ij}^{-1}$$

donde el superíndice k se utiliza para recalcar que la función N_j^k puede ser diferente para cada nube Ω_k .

Debido al hecho de utilizar una aproximación por mínimos cuadrados, tenemos que:

$$u_j = u^h(x_j) \neq \hat{u}(x_j)$$

es decir, los valores de la función aproximante no coinciden con los valores incógnitas en los nodos. Además \hat{u} es la función que impondremos que cumpla la ecuación diferencial y las condiciones de contorno y u_j^h son simplemente los parámetros incógnita buscados.

Sólo en el caso de que $n = m$, estamos en el método de los elementos finitos, y en tal caso $\hat{u}(x_j) = u^h(x_j)$.

La aproximación anterior utilizando mínimos cuadrados puede ser modificada un poco si dicha aproximación la hacemos utilizando funciones de peso φ_i . Teniendo en cuenta esto, el funcional a minimizar es:

$$J_i = \sum_{j=1}^n \varphi_i(x_j - x_i) (u_j^h - \hat{u}(x_j))^2 = \sum_{j=1}^n \varphi_i(x_j - x_i) (u_j^h - p_j^T \alpha)^2$$

Normalmente se suele construir $\varphi_i(x - x_i)$ que tome valor 1 en el punto i (llamado nodo estrella) y que desaparezca fuera del dominio Ω_i . (Si $n = m$, los pesos no afectan a la solución y estamos en el caso anterior). Por tanto, supondremos que $n > m$.

La minimización de J_i con respecto a α_i nos lleva a ecuaciones muy similares a las obtenidas anteriormente. Más concretamente:

$$\alpha = \bar{C}^{-1} u^h, \text{ con } \bar{C}^{-1} = A^{-1} B$$

$$A = \sum_{j=1}^n \varphi_j(x_j - x_i) p(x_j) p^T(x_j)$$

$$B = [\varphi_i(x_1 - x_i) p(x_1), \dots, \varphi_i(x_n - x_i) p(x_n)]$$

2.2.3. Obtención del sistema de ecuaciones

Recordamos que nuestro problema venía dado por:

$$A(u) = b, \quad \text{en } \Omega$$

con condiciones de contorno:

$$\begin{cases} B(u) = t, & \text{en } \Gamma_t \\ u - u_p = 0, & \text{en } \Gamma_u \end{cases}$$

donde A , B , Γ_t , Γ_u , u , u_p , t y b han sido descritos en el apartado anterior.

Para la resolución de este problema, nos planteamos la siguiente forma variacional:

$$\int_{\Omega} \phi_i [A\hat{u} - b] d\Omega + \int \hat{\phi}_i [B\hat{u} - t] d\Gamma + \int_{\Gamma_u} \hat{\phi}_i [\hat{u} - u_p] d\Gamma = 0$$

Dependiendo de la elección de los pesos, el conjunto de las ecuaciones variará.

En el método de colocación puntual no vamos a necesitar evaluar dichas integrales (necesidad de una malla auxiliar); nos permite obtener un verdadero método sin malla.

En nuestro caso, no necesitamos emplear ningún tipo de cuadratura y los cálculos se reducen a evaluar las funciones de forma y sus derivadas en los nodos.

La elección más simple para estas funciones de peso es la delta de Dirac:

$$\phi_i = \hat{\phi}_i = \hat{\hat{\phi}}_i = \delta_i$$

El sistema de ecuaciones obtenidas será:

$$[A(\hat{u})]_i - b_i = 0, \text{ en } \Omega$$

$$[B(\hat{u})]_i - t_i = 0, \text{ en } \Gamma_t$$

$$\hat{u}_i - u_p = 0, \text{ en } \Gamma_u$$

Recordamos también la expresión de \hat{u} que habíamos dado:

$$\hat{u} = \sum_{i=1}^{np} N_i(x) u_i^h$$

Teniendo en cuenta esto, podemos escribir el nuevo sistema como:

$$K u^h = f$$

donde la matriz de coeficientes K será una matriz en banda, pero no necesariamente simétrica, que se obtiene:

$$K = K_{ij} = [A(N_j)]_i + [B(N_j)]_i$$

donde u^h contiene las incógnitas del problema u_i^h y f es un vector donde se almacenan las acciones en el dominio Ω y el contorno Γ_t junto con los valores prescritos u_p en Γ_u .

2.2.4. Imposición de las condiciones de contorno

Ahora bien, para obtener una solución única a nuestro problema, es necesario imponerle las condiciones de contorno a nuestro sistema de ecuaciones. Veamos la manera de hacerlo.

Las condiciones de contorno se imponen en el segundo y tercer miembro de la integral.

En consecuencia, si tenemos condiciones de contorno de tipo Dirichlet: $u - u_p = 0$, en Γ_u ; su imposición se traduce en $\hat{u}(x_i) = u_p(x_i)$, $\forall x_i$ en Γ_u .

En la mayoría de los casos, las funciones de base no verifican la condición estándar de interpolación, y por consiguiente, las aproximaciones no pasan por los nodos.

Ahora bien, si las condiciones a imponer son: $B(u) = t$ en Γ_t , las aproximaremos de la siguiente forma: $B(\hat{u}(x_i)) = t(x_i)$, $\forall x_i$ en Γ_t .

2.3. Aproximación por Moving Least Square

El método de los mínimos cuadrados móviles es una aproximación ponderada por mínimos cuadrados en la cual se permite que la función de peso se desplace en función del punto donde queremos obtener la aproximación.

Supongamos que queremos obtener una aproximación de la función incógnita en una serie de puntos u_i , $i = 1, \dots, n$, definidos en los n puntos x_i .

Asumiremos que nuestra función aproximada cumple la siguiente relación:

$$u(x) \approx \hat{u}(x) = \sum_{i=1}^m p_i(x) \alpha_i = p^T(x) \alpha$$

donde p_i es un conjunto linealmente independiente de funciones y $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_m]$ es el vector de las incógnitas, el cual va a ser determinado por nuestro algoritmo.

El problema de obtener una aproximación por mínimos cuadrados definida para cada punto \hat{x} del dominio, viene determinada por resolver el siguiente problema:

$$J(\hat{x}) = \min \sum_{k=1}^n \varphi_{\hat{x}}(x_k - \hat{x}) [u_k - p^T(x_k) \alpha(\hat{x})]^2$$

donde $\varphi_{\hat{x}}$ puede generalmente cambiar su forma dependiendo de la posición del punto \hat{x} . Por tanto, los α_i dependen de la posición seleccionada para el punto \hat{x} . Una vez calculados los $\alpha_i(\hat{x})$, la aproximación a nuestra función $u(x)$ viene determinada por:

$$u(x) \approx \hat{u}(x) = \sum_{i=1}^m p_i(x) \alpha_i(\hat{x})|_{\hat{x}=x}$$

Utilizamos la notación $\varphi_{\hat{x}}(x_k - \hat{x})$ para destacar la posibilidad de una función que cambia en cada punto donde se imponga la minimización.

En el caso más simple, de tener los puntos equiespaciados, es frecuente escoger:

$$\varphi_{\hat{x}}(x_k - \hat{x}) = \varphi(x_k - \hat{x})$$

y suponer que la forma del peso sea invariante con la posición.

En el caso de no tener los puntos equidistantes, el problema de definir $\varphi_{\hat{x}}$ para cada punto \hat{x} es muy complejo. En este caso, es conveniente suponer que las funciones de peso están asociadas a los puntos x_k y escoger:

$$\varphi_{\hat{x}}(x_k - \hat{x}) = \phi_k(\hat{x} - x_k)$$

Con esta reducción, las funciones de peso ϕ_k son fijas en cada x_k y la función a minimizar es:

$$J(\hat{x}) = \min \sum_{k=1}^n \phi_k(\hat{x} - x_k) [u_k - p^T(x_k) \alpha(\hat{x})]^2$$

Definimos las funciones de peso de la siguiente forma:

$$\phi_k(y) = \begin{cases} f_k(y), & \text{si } |y| < r_k \\ 0, & \text{si } |y| \geq r_k \end{cases}$$

entonces los términos de la suma anterior son nulos cuando $y = \hat{x} - x_k$, $|y| \geq r_k$. El perímetro r_k se denomina radio de la bola en x_k (en la frontera de la bola se anula).

La solución a nuestro problema de minimización nos conduce a que:

$$\alpha_{\hat{x}} = A^{-1}(\hat{x}) \sum_{j=1}^n B_j(\hat{x}) u_j$$

donde:

$$A(\hat{x}) = \sum_{k=1}^n \phi_k(\hat{x} - x_k) p(x_k) p^T(x_k)$$

$$B_j(\hat{x}) = \phi_j(\hat{x} - x_j) p(x_j)$$

Del hecho de definir las funciones de peso en cada punto x_k en función del radio r_k (donde fuera de éste vale cero), resulta claro que sólo un número limitado de términos contribuyen al sumatorio anterior.

Por último, es importante resaltar el hecho de que el algoritmo de los mínimos cuadrados móviles produce soluciones para α que dependen de los puntos seleccionados para cada aproximación.

Si ahora utilizamos la siguiente notación:

$$N_j(x) = p^T(x) A^{-1}(\hat{x}) B_j(\hat{x})|_{\hat{x}=x}$$

el problema de encontrar la función $\hat{u}(x)$ se puede reescribir como:

$$\hat{u}(x) = \sum_{j=1}^n N_j(x) u_j$$

También es necesario obtener expresiones para las derivadas de la función $u(x)$. Veamos el modo de hacerlo. Definimos:

$$\alpha(\hat{x})|_{\hat{x}=x} = \sum_{j=1}^n \omega_j(x) u_j$$

y teniendo en cuenta la siguiente relación:

$$N_j(x) = p^T(x) \omega_j(x)$$

en la que se cumple:

$$A(x) \omega_j(x) = B_j(x)$$

La primera derivada se puede obtener de la siguiente forma:

$$\frac{dN_j}{dx} = \frac{dp^T}{dx} \omega_j + p^T \frac{d\omega_j}{dx} \quad (1)$$

y

$$A \frac{d\omega_j}{dx} + \frac{dA}{dx} \omega_j = \frac{dB_j}{dx} \quad (2)$$

donde:

$$\frac{dA}{dx} = \sum_{k=1}^n \frac{d\phi_k(x - x_k)}{dx} p(x_k) p^T(x_k) \quad (3)$$

y:

$$\frac{dB_j(x)}{dx} = \frac{d\phi_j(x - x_j)}{dx} p(x_j) \quad (4)$$

Aislando

$$\frac{d\omega_j}{dx}$$

de (2) y sustituyéndolo en (1), obtenemos que:

$$\frac{dN_j}{dx} = \left(\frac{dp^T}{dx} - p^T A^{-1} \frac{dA}{dx} \right) \omega_j + p^T A^{-1} \frac{dB_j}{dx} \quad (5)$$

Las derivadas de orden superior se obtienen utilizando el mismo razonamiento.

Este proceso requiere para el cálculo de las derivadas, el cálculo de las derivadas tanto de A , como de B_j .

Por ello, Nayroles et al. sugirieron que las aproximaciones ignoraran las derivadas de α y suponer que $\alpha(x)$ sea constante. Por ello, utilizamos:

$$\frac{dN_j}{dx} \approx \frac{d\hat{N}_j}{dx} = \frac{dp^T}{dx} \omega_j \quad (6)$$

En nuestro estudio, utilizaremos las expresiones (5) y 6 para el caso de los mínimos cuadrados móviles.

La expresión (5) calcula correctamente la derivada para nuestra función, mientras que (6) lo hace de un modo aproximado.

El método que utiliza la expresión (5) para la derivada se llama EFG, y el que usa la (6) se llama el método de los elementos difusos.

2.4. Métodos Smooth Particle Hydrodynamics (SPH)

Uno de los métodos sin malla más antiguo son los SPH. La base de estos métodos es la expresión de la aproximación para la función $u(\mathbf{x})$ en un dominio Ω . Dicha expresión viene dada por:

$$u^h(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h) u(\mathbf{y}) d\Omega_{\mathbf{y}} \quad (1)$$

donde $u^h(\mathbf{x})$ es la aproximación, $\omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h)$ es la función de peso o núcleo y h es la longitud del soporte.

Las funciones de peso anteriormente citadas deben cumplir las siguientes propiedades:

- (1) $\omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h) > 0$ en un subdominio de Ω , Ω_I .
- (2) $\omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h) = 0$ fuera del subdominio Ω_I .
- (3) $\int_{\Omega} \omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, h) d\Omega = 1$.
- (4) $\omega(s, h)$ es una función monótona decreciente, donde $s = d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.
- (5) $\omega(s, h) \rightarrow \delta(s)$ cuando $h \rightarrow 0$, donde $\delta(s)$ es la función delta de Dirac.

La segunda condición es crucial, ya que proporciona a la aproximación un carácter local, es decir, $u^h(\mathbf{x})$ sólo dependerá de aquellos valores de u de los nodos en los cuales la función de peso sea diferente de cero. El dominio donde $\omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \neq 0$ se suele llamar dominio de influencia o soporte de la función de peso. La tercera condición es crucial para probar la convergencia del método.

Para esta clase de métodos, se suelen utilizar diversas funciones de peso, aunque la más común es la función de peso spline:

$$\omega(s, h) = \frac{2}{3h} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}q^2 + \frac{3}{4}q^3, & q \leq 1 \\ \frac{1}{4}(2 - q)^3, & 1 \leq q \leq 2 \\ 0, & q > 2 \end{cases}$$

donde $q = s/h$. Esta función es de clase C^2 .

Es posible generar funciones de peso utilizando productos tensoriales, es decir:

$$\omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) = \omega(x - x_I)\omega(y - y_I)$$

La discretización de la fórmula (1) se obtiene mediante una cuadratura numérica, y así obtener una fórmula para $u^h(\mathbf{x})$ en términos de los valores en los nodos $u_I = u(\mathbf{x}_I)$. Así, en el caso 1-dimensional tenemos que:

$$u^h(x) = \sum_I \omega(x - x_I) u_I \Delta x_I$$

donde $\Delta x_I = (x_{I+1} - x_{I-1})/2$ para los nodos interiores. Para los extremos, obtenemos una fórmula bastante similar.

El sumatorio anterior sólo incluye los puntos donde $\omega(x - x_I) > 0$.

En más dimensiones, las fórmulas vienen dadas por:

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_I \omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) u_I \Delta v_I$$

donde Δv_I es una medida del dominio alrededor del nodo I .

Designaremos por $\phi_I(\mathbf{x}) = \omega(\mathbf{x} - \mathbf{x}_I) \Delta v_I$. A estas funciones se las denomina funciones de forma SPH de la aproximación. Cabe destacar que en la mayoría de los casos se cumple que $u_I \neq u^h(\mathbf{x}_I)$, así que los parámetros u_I no deben ser tratados exactamente como los valores en los nodos.

2.5. Método de las diferencias finitas (en 2 dimensiones)

Por comodidad en la notación del método, cuando hagamos referencia a la coordenada t temporal en este apartado, nos referiremos a la ordenada y .

Dentro de esta técnica, distinguiremos tres métodos numéricos: Estos tres son:

-Explícito.

-Implícito.

-Crank-Nicholson.

Para cada uno de ellos, estudiaremos su fundamentación teórica y hablaremos sobre la convergencia y la consistencia de cada uno de ellos. Antes de nada, empezaremos a introducir la notación que utilizaremos en este apartado.

La solución analítica de nuestro problema será la función $u(x, t)$, su aproximación numérica la designaremos por $U(x, t)$.

Si $\frac{1}{\Delta x}$ es un número entero, definiremos M como $M = \frac{1}{\Delta x} - 1$. Cuando se hable de x_i y de t^n haremos referencia respectivamente a $x_i = i \Delta x = i h$ para $i = 0, \dots, M + 1$ y a $t^n = n \Delta t$. Continuando con esta notación u_i^n nos indicará el valor de la solución $u(x, t)$ evaluada en el punto (x_i, t^n) . Para U_i^n tendremos la misma notación.

Finalmente cuando nos refiramos a U^n entenderemos que se trata del vector (U_1^n, \dots, U_M^n) .

Vamos a estudiar a continuación algunos aspectos teóricos de cada uno de estos métodos.

2.5.1. Método explícito

También llamado Forward-Time centered-space (FTCS).

En este método, el punto base para la aproximación en diferencias finitas de la ecuación en derivadas parciales es el punto (x_i, t^n) .

La ecuación en diferencias finitas correspondiente a este método la obtenemos sustituyendo el operador $\frac{\partial}{\partial t}$ mediante una fórmula hacia delante de primer orden en el tiempo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^n = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

y el operador $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ se discretiza usando una fórmula de segundo orden centrada en el espacio:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^n = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

La ecuación en diferencias obtenida es:

$$U_i^{n+1} = r U_{i-1}^n + (1 - 2r) U_i^n + r U_{i+1}^n$$

$$y \ r = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

El error de truncamiento cometido es $\tau = O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$. Se cumple que si $r = 1/6$, conseguimos mejorar el error de truncamiento y éste vale $\tau = O(\Delta t^2) + O(\Delta t \Delta x^2) + O(\Delta x^4)$.

El método será convergente, ya que cuando hacemos tender el Δt y el Δx a 0 la solución U converge hacia su solución exacta.

Si hablamos de estabilidad, el método será estable si $r \leq 1/2$, lo que nos indica que el método es condicionalmente estable, ya que no podemos escoger los Δx y los Δt que queremos.

La restricción que hemos obtenido sobre la estabilidad del método, nos comporta un serio obstáculo en cuanto a la utilidad de éste para resolver una EDP. Veamos un posible motivo. Nos gustaría el modo de saber si una solución obtenida es suficientemente buena. Un posible procedimiento sería dividir el Δx por 2 y repetir la misma solución en el mismo nivel temporal, para ver si ésta ha variado significativamente. Para hacerlo en nuestro método, tendremos que dividir por 2 el Δx ; mantener la r fija supondrá que tendremos que dividir el Δt por 4. Ello significará que se requerirán cuatro veces más de pasos temporales para llegar al mismo nivel temporal que antes, y a su vez para cada paso se requiere el doble de trabajo, así que el coste computacional se verá multiplicado por ocho.

En resumen, este método explícito es consistente, convergente y condicionalmente estable (estable si $r \leq \frac{1}{2}$).

2.5.2. Método implícito

También llamado Backward-Time centered-space (BTCS).

El método anterior es un ejemplo de método en diferencias explícito, en el que las aproximaciones en diferencias finitas de las derivadas parciales son evaluadas en el nivel temporal n , así que como las soluciones son evaluadas en un punto en el nivel $n + 1$ pueden ser expresadas explícitamente en términos de la solución conocida en el nivel temporal n . Veremos que esto no ocurre ni en el método explícito, ni en Crank-Nicholson.

Recordemos también que el método anterior tenía algún problema en cuanto a la estabilidad del método, ya que era condicionalmente estable. Veremos que tanto en el implícito como en Crank-Nicholson esto no sucede. La ecuación en diferencias resulta de sustituir las derivadas temporales y espaciales respectivamente (por una fórmula hacia atrás):

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^{n+1} = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i^{n+1} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

Realizando estas sustituciones en nuestra ecuación en derivadas parciales e imponiendo que se cumpla la solución en el punto (x_i, t^{n+1}) , obtenemos la siguiente ecuación en diferencias:

$$-r U_{i-1}^{n+1} + (1 + 2r) U_i^{n+1} - r U_{i+1}^{n+1} = U_i^n$$

Este método será incondicionalmente estable, lo cual supone una notable mejoría respecto al anterior. El error de truncamiento coincidirá con el método explícito, es decir, $\tau = O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$.

A pesar de todo, esta técnica tiene un gran inconveniente, que en el explícito no existía. Este obstáculo es que la solución que queremos encontrar en un punto en un cierto nivel temporal depende de una serie de puntos desconocidos. En consecuencia, no podemos obtener la solución de forma directa, ya que para ello es necesario resolver un sistema de ecuaciones en cada paso de tiempo.

El sistema que se obtiene es de la forma: (en el caso de tener condiciones de contorno Dirichlet)

$$A U^{n+1} = B U^n + F$$

, donde

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 2r & -r & & & \\ -r & 1 + 2r & -r & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & -r & 1 + 2r \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & \\ 0 & 1 & 0 & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$F^T = r(g^{n+1}, 0, \dots, 0, h^{n+1})$$

y donde $g(t) = u(0, t)$ y $h(t) = u(1, t)$, y A y B son matrices cuadradas de orden M .

2.5.3. Método de Crank-Nicholson

En los dos métodos anteriores teníamos que la ecuación en diferencias finitas de la derivada espacial era de segundo orden, pero, en cambio, la aproximación en diferencias finitas de la derivada temporal era de primer orden. En Crank-Nicholson se utilizará una aproximación de segundo orden para calcular la derivada temporal y así obtener una mejora en la precisión de la solución.

La ecuación en diferencias finitas la obtenemos aproximando la derivada temporal en el punto $(x_i, t^{n+1/2})$ por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^{n+1/2} = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

y la derivada espacial en este mismo punto por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i^{n+1/2} = \frac{u_{i+1}^{n+1/2} - 2u_i^{n+1/2} + u_{i-1}^{n+1/2}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

Teniendo en cuenta esta relación, la ecuación en diferencias obtenida viene determinada por:

$$-r U_{i-1}^{n+1} + 2(1+r) U_i^{n+1} - r U_{i+1}^{n+1} = r U_{i-1}^n + 2(1-r) U_i^n + r U_{i+1}^n$$

Este método es incondicionalmente estable y consistente.

Su error de truncamiento es $\tau = O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2)$, que es mejor que en los anteriores métodos.

De la ecuación en diferencias anterior, vemos que Crank-Nicholson es un método explícito. El sistema que hay que resolver en cada paso temporal viene dado por:

$$A U^{n+1} = B U^n + F$$

, donde

$$A = \begin{pmatrix} 1 + 2\theta r & -\theta r & & & \\ -\theta r & 1 + 2\theta r & -\theta r & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & -\theta r & 1 + 2\theta r \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 - 2(1-\theta)r & (1-\theta)r & & & \\ (1-\theta)r & 1 - 2(1-\theta)r & (1-\theta)r & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & (1-\theta)r & 1 - 2(1-\theta)r \end{pmatrix}$$

$$F^T = r(\theta g^{n+1} + (1-\theta)g^n, 0, \dots, 0, \theta h^{n+1} + (1-\theta)h^n)$$

y donde $g(t) = u(0, t)$ y $h(t) = u(1, t)$, A y B son matrices cuadradas de orden M y $\theta = 1/2$.

3. Resolución del problema unidimensional

3.1. Planteamiento del problema

En este documento se pretende estudiar la solución de la siguiente ecuación diferencial:

$$\begin{cases} k \frac{d^2 u}{dx^2} + Q(x) = 0, & x \in (0, 1) \\ u - \bar{u} = 0, & x = 0 \\ k \frac{du}{dx} + \bar{q} = 0, & x = 1 \end{cases}$$

utilizando diversos métodos numéricos para resolverla y posteriormente se estudiará el error cometido en la aproximación, ya que la podemos comparar con la exacta, la cual es fácil de hallar.

Los métodos empleados son:

- a) Método de los elementos finitos.
- b) Método de los puntos finitos.
- c) Método de los elementos Difusos.
- d) Método de Element-Free Galerkin (EFG).

Sobre la implementación de cada uno de ellos, hay que recalcar una serie de aspectos técnicos.

3.1.1. Método de los elementos finitos

Las funciones de forma que se utilizan en este método son lineales (valen uno en un nodo y en los demás cero).

Después también hay que destacar el procedimiento que utilizamos para evaluar integrales del tipo:

$$\int_{x_e}^{x_{e+1}} g(x) dx$$

Para ello, lo primero que haremos será una transformación isoparamétrica, que no es nada más que un cambio de variable lineal que nos transforma el intervalo (x_e, x_{e+1}) en el intervalo $(-1, 1)$. Debido a esto, la nueva integral viene dada por:

$$\int_{-1}^1 h(t) dt$$

Una vez realizado esto, se procede a la integración numérica de esta última integral. Para ello, se utilizan cuadraturas de Gauss, que con n evaluaciones de la función que queremos integrar, podemos integrar exactamente un polinomio de grado $2n - 1$. En este estudio utilizaremos 3 evaluaciones de la función.

3.1.2. Método de los puntos finitos

La base de polinomios que se hace servir en este documento es cuadrática, y por tanto, sus funciones de forma también lo serán.

Para encontrar la solución numérica, dividiremos el dominio en una serie de subdominios. Cada subdominio estará formado por una nube de puntos. Cada una de ellas estará formada por una nube de puntos, las cuales estarán formadas por tres o más puntos. La primera y la última nube estarán formadas respectivamente por los tres primeros y últimos puntos. La segunda y la penúltima nube contendrán los cuatro primeros y últimos puntos. El resto estarán compuestas por el nodo estrella, junto con los dos puntos anteriores y los dos posteriores a él.

Por cada subdominio, interpolaremos la función $u(x)$ que queremos determinar por una parábola utilizando la técnica de mínimos cuadrados.

Las funciones de peso utilizadas son dos:

Función de ponderación $\omega_{i1}(x)$: Si llamamos a, b, c, d y e a los puntos que forman nuestro dominio de interpolación (de tal forma que $a < b < c < d < e$), definimos la siguiente función de peso a trozos: (le llamaremos función de peso triangular)

$$\omega_{i1}(x) = \begin{cases} 1 + 10 \frac{x-p}{p-11} \frac{1}{a+b}, & x \in [a, p] \\ 1 + 10 \frac{x-p}{p-11} \frac{1}{e+d}, & x \in [p, e] \end{cases}$$

es decir, la función de peso toma valor 1 en el punto p y está formada por dos rectas: una que va del punto $(a - \frac{1}{10}(b-a), 0)$ al $(p, 1)$ y otra que va desde este último punto al $(e + \frac{1}{10}(e-d), 0)$. En el resto de los puntos del dominio, la función de ponderación es nula.

Observamos que por la forma de definir $\omega_{i1}(x)$ se cumple que en todo el dominio de interpolación la función de ponderación es estrictamente positiva. Por último, remarcar que $\omega_{i1}(x)$ es una función continua, pero no es diferenciable en el punto p .

Función de ponderación $\omega_{i_2}(x)$. Le llamaremos función de Gauss truncada, y está definida de la siguiente forma:

$$\omega_{i_2}(x) = \frac{e^{-\frac{dist^2}{f}} - e^{-\frac{d_{max}^2}{f}}}{1 - e^{-\frac{d_{max}^2}{f}}}$$

donde $dist = |x - x_i|$, $d_{max} = \frac{4}{np}$, np es el número de puntos y finalmente f es un factor que determina el apuntamiento del dominio; en nuestro caso, cogemos $f = 0.5 d_{max}$. La función de Gauss truncada, tal y como la hemos definido vale uno en el punto x y es C^∞ .

3.1.3. Método de los elementos difusos (DE)

Las funciones de peso empleadas son las mismas que en el anterior método. En cuanto a la base completa de polinomios utilizada, remarcar que es cuadrática, pero ahora en vez de escoger la base cuadrática usual $p(x) = [1, x, x^2]$, tomaremos $p(x) = [1, (x - x_j), (x - x_j)^2]$, cuando estamos trabajando sobre el nodo $J(x_j)$, ya que con esta elección podemos evitar un mal condicionamiento de la matriz del sistema que hay que resolver.

3.1.4. Método de Element-Free Galerkin (EFG)

Ahora no usaremos la función de peso triangular, sólo la de Gauss. Ello es debido a que la función de ponderación triangular no es una función C^2 , que es lo que necesitamos al usar el método, ya que en él efectuamos un cálculo correcto de las derivadas. La base de polinomios es la misma que la especificada en el método de los elementos difusos.

4. Resolución del problema bidimensional

4.1. Planteamiento del problema

Se desea conocer numéricamente la solución de la siguiente ecuación en derivadas parciales:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx}, t > 0, x \in (0, 1) \\ u(0, t) = 0; u(1, t) = 0; \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases}$$

La función $u(x, y) = 1 - x + e^{-\pi^2 y} \sin(\pi x)$ es solución de nuestra e.d.p. y por ser la solución única, debido a que la condición inicial es continua, tenemos que $u(x, y)$ es la solución exacta al problema.

Otro aspecto que tendremos en cuenta es que la solución de nuestro problema tenderá a la recta $1 - x$, a medida que aumente la y . Ello se puede verificar fácilmente de dos maneras:

a) Directamente, utilizando la expresión de la solución exacta $u(x, y) = 1 - x + e^{-\pi^2 y} \sin(\pi x)$. Vemos que a medida que incrementamos la y , el último término de la expresión de $u(x, y)$ irá hacia 0.

b) Sin necesidad de conocer la solución exacta. Si consideramos la siguiente ecuación en derivadas parciales:

$$\begin{cases} v_y = v_{xx}, y > 0, x \in (0, 1) \\ v(0, y) = 0; v(1, y) = 0; \\ v(x, 0) = \sin(\pi x) \end{cases}$$

La función solución $v(x, y)$ satisface la ecuación en derivadas parciales que estamos inicialmente estudiando, pero ahora tiene condiciones de Dirichlet homogéneas, lo que provoca que tienda a 0 a medida que la y tienda a infinito. En consecuencia, nuestra solución $u(x, y)$ tenderá a la recta $1 - x$.

Este hecho nos servirá de gran ayuda para ver si la solución obtenida numéricamente es suficientemente buena.

Para obtener la solución numérica, hemos recurrido a las siguientes técnicas:

- Método de los puntos finitos.
- Método de los elementos difusos.

-Método de Element-Free Galerkin (EFG).

-Método de las diferencias finitas (analizaremos resultados del método explícito, implícito y de Crank-Nicholson).

Para encontrar la solución numérica empleando cada uno de estos métodos, se ha empleado una malla regular.

En todos los métodos, menos el de diferencias finitas, hay una serie de aspectos a reseñar. En ellos, hemos intentado interpolar nuestra función $u(x, y)$ por un polinomio de segundo grado $p(x, y)$ en cada subdominio. Así:

$$p(x, y) = a + bx + cy + dx^2 + exy + fy^2$$

Por tanto, para determinar $p(x, y)$ debemos determinar unívocamente los valores de los parámetros a, b, c, d, e y f . Por analogía al caso unidimensional, se podría pensar que por cada 6 puntos pasa un único polinomio de segundo grado. Pero esto, en general, no es cierto, ya que si imponemos que pase por los puntos $(x_i, y_i, u(x_i, y_i))$, $i = 0 \dots 5$, obtenemos un sistema lineal de la forma $Av = f$, donde $v = (a, b, c, d, e, f)^T$ y A es la siguiente matriz:

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & y_0 & x_0^2 & x_0 y_0 & y_0^2 \\ 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1 y_1 & y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2 y_2 & y_2^2 \\ 1 & x_3 & y_3 & x_3^2 & x_3 y_3 & y_3^2 \\ 1 & x_4 & y_4 & x_4^2 & x_4 y_4 & y_4^2 \\ 1 & x_5 & y_5 & x_5^2 & x_5 y_5 & y_5^2 \end{pmatrix}$$

Esta matriz tiene determinante nulo, y por tanto, no obtenemos una solución única para el sistema anterior, en el caso de que en esos 6 puntos en cuestión, tengamos cuatro o más ordenadas o abscisas iguales, ya que en ese caso tendríamos que las filas que las contengan serían linealmente dependientes, y en tal caso, el determinante valdría cero.

Una vez dicho esto, vamos a especificar como elegimos los puntos que forman cada nube.

Para ello, ordenaremos en primer lugar los puntos de nuestro dominio con el orden lexicográfico. Vamos a recordar un poco como funciona este orden. Diremos que $(x_1, y_1) < (x_2, y_2)$ (en orden lexicográfico), si o bien se cumple que $x_1 < x_2$, o bien en el caso que $x_1 = x_2$, entonces $y_1 < y_2$.

Después de la ordenación de los puntos, ya podemos pasar directamente a explicitar la composición de cada nube. Supondremos en todo momento que los puntos están ordenados lexicográficamente. Las cuatro primeras y las cuatro últimas nubes contendrán respectivamente los nueve primeros y los nueve últimos puntos. El resto de las nubes estarán formadas por el nodo estrella y los cuatro puntos anteriores y los cuatro posteriores a él. En resumen, todas las nubes estarán compuestas por nueve puntos.

La base completa de polinomios utilizada es cuadrática. Más concretamente, $p(x, y) = [1, x, y, x^2, xy, y^2]$.

5. Resultados del problema unidimensional

El objetivo de este apartado es estudiar la solución de la siguiente ecuación diferencial:

$$\begin{cases} k \frac{d^2 u}{dx^2} + Q(x) = 0, & x \in (0, 1) \\ u - \bar{u} = 0, & x = 0 \\ k \frac{du}{dx} + \bar{q} = 0, & x = 1 \end{cases}$$

utilizando diversos métodos numéricos para resolverla y posteriormente se estudiará el error cometido en la aproximación, ya que la podemos comparar con la exacta, la cual es fácil de hallar.

Cabe remarcar que a la hora de ejecutar el programa, lo haremos con puntos equidistantes y con puntos no equidistantes. En el caso de puntos no equidistantes, escogeremos como lista inicial de puntos la formada por:

$$[0, 0.15, 0.43, 0.56, 0.87, 1]$$

Si queremos doblar el número de puntos, es decir, pasar de 6 a 11, lo único que haremos es intercalar entre cada dos puntos consecutivos su punto medio. Para volver a doblar, lo mismo. Trabajaremos, con listas de 6, 11, 21 y 41 puntos en el caso que éstos sean no equidistantes.

Resolveremos la ecuación anterior para 3 valores concretos de carga $Q(x)$ y con unas determinadas condiciones de Dirichlet en el 0 y de Neumann en el 1.

5.1. Resultados sobre la ecuación 1

La ecuación que vamos a resolver es:

$$\begin{cases} \frac{d^2 u}{dx^2} = 1, & x \in (0, 1) \\ u(0) = 0, & x = 0 \\ \frac{du}{dx}(1) = 1, & x = 1 \end{cases}$$

La solución exacta de este problema viene dada por la función $u(x) = x^2/2$.

Ejecutando el problema para mallas regulares e irregulares, obtenemos para cada uno de los métodos solución exacta en los nodos.

5.2. Resultados sobre la ecuación 2

La ecuación que vamos a resolver es:

$$\begin{cases} \frac{d^2 u}{dx^2} = x, & x \in (0, 1) \\ u(0) = 0, & x = 0 \\ \frac{du}{dx}(1) = 1, & x = 1 \end{cases}$$

La solución exacta de este problema viene dada por la función $u(x) = x^3/6 + 0.5x$.

Las superposiciones entre las soluciones exacta y las numéricas son en general bastante buenas para todos los métodos (ver gráficas 1-7), a excepción del método EFG cuando usamos puntos no equidistantes. Si observamos la gráfica 2, vemos que el resultado, para 6 puntos no equidistantes, no es lo suficientemente preciso. Ello nos podría hacer pensar que es debido a que no utilizamos un número de puntos suficiente; así que doblamos el número de puntos y vemos que la gráfica 3 se ajusta mucho a la exacta. Pero, si volvemos a doblar el número de puntos, volvemos a tener problemas (gráfica 4).

Para saber bien si la solución es buena o no, pasaremos a estudiar los logaritmos de los errores en función del número de puntos utilizados para la resolución de la ecuación.

En el caso de tener los puntos equiespaciados, el comportamiento de los métodos es bueno, y la curva va descendiendo a medida que aumente el número de puntos, y esto nos asegura la convergencia de ellos (gráfica 8).

Para el caso de puntos no equidistantes, observando la gráfica 9, vemos que tenemos algún problema en cuanto a la convergencia de los métodos, ya que nos interesaría que la curva del logaritmo del error relativo descendiera a medida que aumentáramos el número de puntos. Pero esto no sucede si utilizamos funciones de ponderación de Gauss.

En general, viendo estas dos últimas gráficas, nos damos cuenta que los métodos que emplean funciones de ponderación triangular nos conducen a un error menor en la estimación de soluciones que utilizando funciones de peso de Gauss.

En cuanto al método de las diferencias finitas, destacar que como antes, se obtienen soluciones exactas en los nodos, y por tanto, no tiene estudiar su error, ya que funciona a la perfección.

5.3. Resultados sobre la ecuación 3

La ecuación que vamos a resolver es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 u}{dx^2} = -\sin(x), \quad x \in (0, 1) \\ u(0) = 0, \quad x = 0 \\ \frac{du}{dx}(1) = 3, \quad x = 1 \end{array} \right.$$

La solución exacta viene dada por la función $u(x) = \sin(x) + (3 - \cos(1))x$

Los resultados que se obtienen para esta carga en particular son bastante parecidos a los de la ecuación anterior.

Las soluciones exactas y aproximadas prácticamente se superponen para cada uno de los métodos (gráficas 9-12) y los métodos que utilizan funciones triangulares para ponderarlas funcionan mejor que los que usan las de Gauss.

Si hacemos referencia a las curvas del error (gráficas 13-14), comentar que tenemos un problema parecido al comentado antes, cuando utilizamos el método EFG con funciones de peso de Gauss. En el resto de los casos, se observa una buena convergencia de los métodos. La solución exacta de este problema viene dada por la función $u(x) = \sin(x) + (3 - \cos(1))x$

6. Resultados del problema bidimensional

Se desea conocer numéricamente la solución de la siguiente ecuación en derivadas parciales:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx}, t > 0, x \in (0, 1) \\ u(0, t) = 0; u(1, t) = 0; \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases}$$

Sabemos que la función $u(x, y) = 1 - x + e^{-\pi^2 y} \sin(\pi x)$ es la solución exacta a nuestra e.d.p..

Otro aspecto que tendremos en cuenta es que la solución de nuestro problema tenderá a la recta $1 - x$, a medida que aumente la y .

El caso 2-dimensional se ejecutará sólo con mallas regulares. Empezamos a analizar el método de las diferencias finitas.

Empezamos utilizando el método explícito con $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.003$, por lo que la r vale 0.3. A continuación, dibujamos la solución numérica para los pasos 0, 20, 40, 60, 80 y 100. Vemos que a medida que aumentamos el número de pasos, la solución va convergiendo hacia la recta $1 - x$, que es lo que queremos (gráfica 15).

Veamos ahora qué sucede si aumentamos el valor del parámetro r . Para ello, dejamos fijo el incremento espacial y aumentamos el incremento temporal hasta 0.01. Ello significa que la $r = 1$. Si observamos la gráfica 16, vemos que en los primeros pasos de tiempo, la solución se comportaba bien, hasta que llegando al paso temporal 36, la solución se convierte en inestable. Esto es debido, a como ya hemos anunciado con anterioridad, el método explícito era estable si $r < 1/2$.

Las gráficas 17 y 18 reflejan los resultados obtenidos utilizando el método explícito y Crank-Nicholson, con un valor de $r = 1$, el mismo que antes nos ha dado problemas. Pero vemos, como ya sabíamos, debido a que estos dos métodos son incondicionalmente estables, que la solución se va acercando hacia la recta $1 - x$, que es lo que queremos.

Para el resto de los métodos, utilizaremos una malla de $\Delta x = 0.1$ y $\Delta t = 0.06$. Para cada uno de ellos, obtenemos el mismo error, y la solución converge hacia la recta que queremos al incrementar el tiempo (ver gráfica 19). Esta gráfica contiene el caso de usar el método de los puntos finitos y funciones de peso triangulares. Para el resto de métodos, no se han incluido las gráficas soluciones, ya que son similares a la 19 y no aportan nada nuevo.

El error que se comete al estimar la solución con estos últimos métodos en el paso $u(x, 0.42)$ viene dado por 0.0341871620.

7. Conclusiones

-En general, el mejor método para resolver la ecuación diferencial unidimensional es el método de los elementos finitos, que nos da solución exacta para todas las cargas utilizadas. Sólo en el caso de que $Q(x) = -\sin(x)$, se comete un error despreciable, y es debido al cálculo de integrales por cuadraturas, que nuestras cuadraturas de Gauss sólo integran hasta polinomios de grado 5 con total precisión.

-En cuanto a los otros métodos, decir que el de los puntos finitos, el EFG y el de elementos difusos nos proporcionan una solución que se ajusta a la exacta, sobre todo en el caso de los puntos equidistantes. En caso de no ser equidistantes, tenemos problemas cuando utilizamos el EFG. Todo ello se puede ver reflejado cuando dibujamos el logaritmo del error en función del número de puntos, ya que la curva es descendente en casi todos los casos, que es lo que nos muestra que el método es convergente.

-Las funciones de peso utilizadas en este estudio han sido básicamente dos: la de Gauss y la triangular. La función de peso triangular nos proporciona menos error que la función de Gauss.

-El principal inconveniente de los métodos EFG y de los métodos difusos es que si agregamos algún punto a nuestra lista, no siempre disminuye el error, aunque la mayoría de veces sí.

-Para el caso bidimensional, tenemos que para todos los métodos obtenemos una solución bastante buena.

-También es importante reflejar en el caso de las diferencias finitas, que los resultados obtenidos se ajustan con bastante exactitud a la teoría expuesta en el apartado 2.5.

-Para el método explícito, vemos que cuando $r < 0.5$ el método es estable, lo cual no sucede obligatoriamente si $r \geq 0.5$.

-Los otros métodos (Crank-Nicholson y implícito) son incondicionalmente estables, independientemente del valor de r , y convergen hacia la solución.

-Para los otros tres métodos (elementos difusos, EFG y de los puntos difusos) se obtienen soluciones bastante buenas y tienden hacia la recta $1 - x$, lo que nos indica la convergencia del método.

8. Agradecimientos

Desearía agradecer al centro CIMNE (Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería), y en especial, al señor Eugenio Oñate por haberme dado la oportunidad y la confianza de realizar este estudio, ya que sin su colaboración y ayuda no hubiera sido posible su confección.

9. Referencias

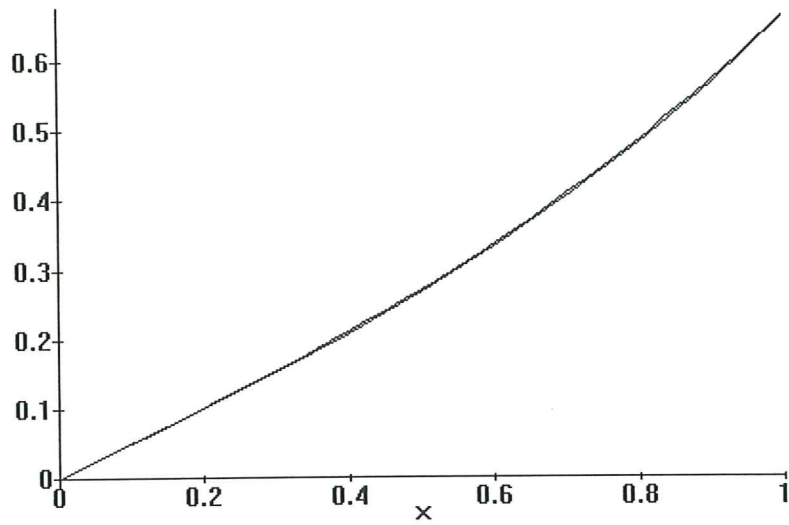
- 1.- E.Oñate, S.Idelsohn, O.C.Zienkiewicz, R.L.Taylor 'A finite method in computational mechanics. Applications to convective transport and fluid flow.' Int. journal for num. methods in engineering. 39 (1996) 3839-3866.
- 2.- E.Oñate, S.Idelsohn, O.C.Zienkiewicz, R.L.Taylor, C.Sacco 'A stabilized finite point method for analysis of fluid mechanics problems'. 139 (Abril-96) 315-346.
- 3.- S.R.Idelsohn, J.C. Heinrich, E.Oñate 'Petrov-Galerkin methods for the transient advective-diffusive equation with sharp gradients', Publicación Número 51 (CIMNE) (Mayo 1994).
- 4.- E. Oñate, 'Una introducción generalizada al método de los elementos finitos', CIMNE 1998
- 5.- O.C. Zienkiewicz, K. Morgan 'Finite elements and approximation', A Wiley-Interscience Publication (1983).
- 6.- Mar Chao López, 'Introducción a los métodos numéricos sin malla: Fundamentación y desarrollo de formulaciones de mínimos cuadrados', Proyecto Técnico en la ETSICCP de la Coruña (Octubre 1997).
- 7.- S.R.Idelsohn, R.L.Taylor, E.Oñate, O.C.Zienkiewicz 'Moving Least Square approximations for solution of differential equations', Publicación Número 74 (CIMNE) (Diciembre 1995).
- 8.- T.Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, P. Krysl 'Meshless methods: An overview and recent developments', Computational Meth. Appl. Mech. Engrg. 139 (1996),3-47.
- 9.- Y.Y. Lu, L.Gu, T.Belytschko, 'A new implementation of the element free Galerkin method' Computational Meth. Appl. Mech. Engrg. 113 (1994), 397-414.
- 10.- C.Armando Duarte, 'A review of some meshless methods to solve partial differential equations', Informe Ticam 95-96, Mayo 1995

11.- B.Nayroles, G.Tozout, P.Villon, 'Generalizing the finite element method: Diffuse approximation and diffuse elements', Computational Meth. Appl. Mech. Engrg. 10 (1992), 307-318.

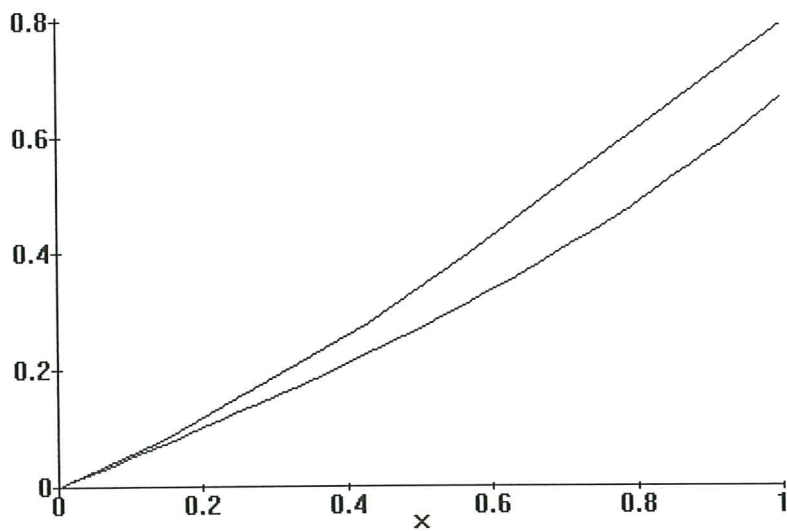
12.- Y.Y. Lu, L.Gu, T.Belytschko, 'Element-Free Galerkin Methods', International Journal for numerical methods in engineering, 37, 229-256 (1994).

Capítulo 9: Anexos .(Gráficas).

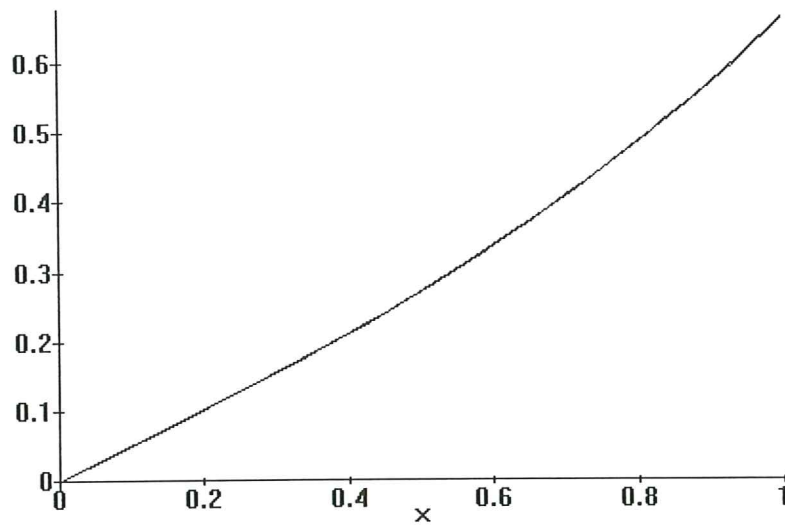
Caso $Q(x)=x$.



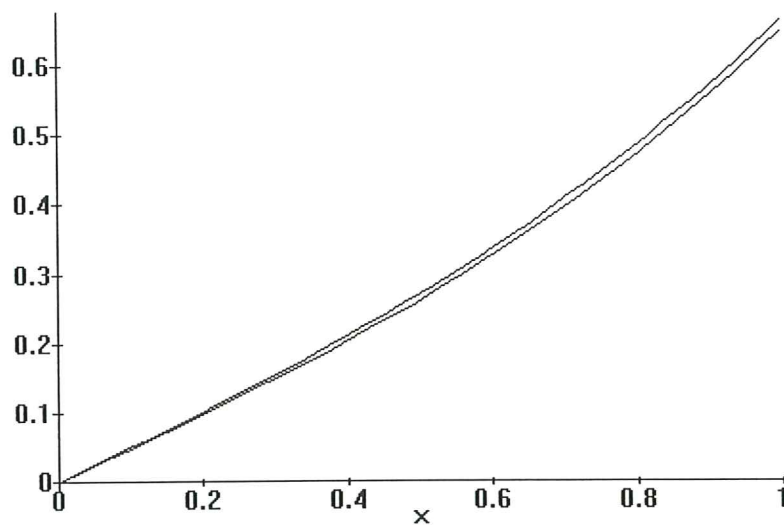
Gráfica 1. Superposición entre la solución exacta y la numérica utilizando el método de Element-Free Galerkin y 10 puntos equidistantes.



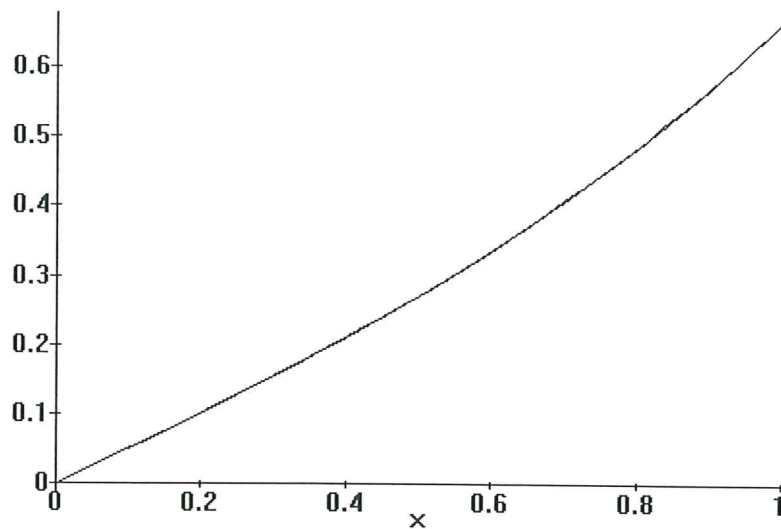
Gráfica 2. Superposición entre la solución exacta y la numérica usando 6 puntos no equidistantes con el método EFG.



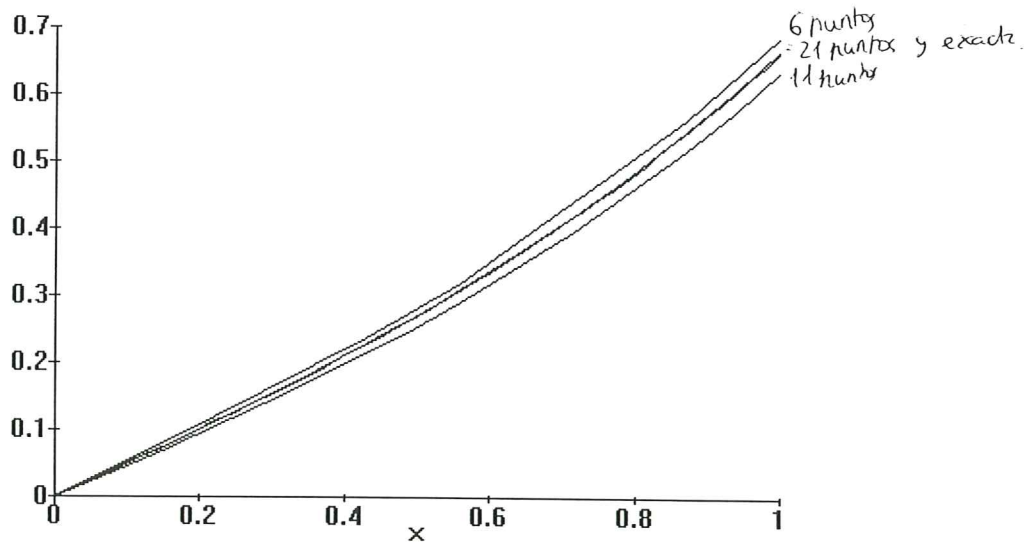
Gráfica 3. En las mismas condiciones que en la gráfica 2, pero ahora doblando el número de puntos.



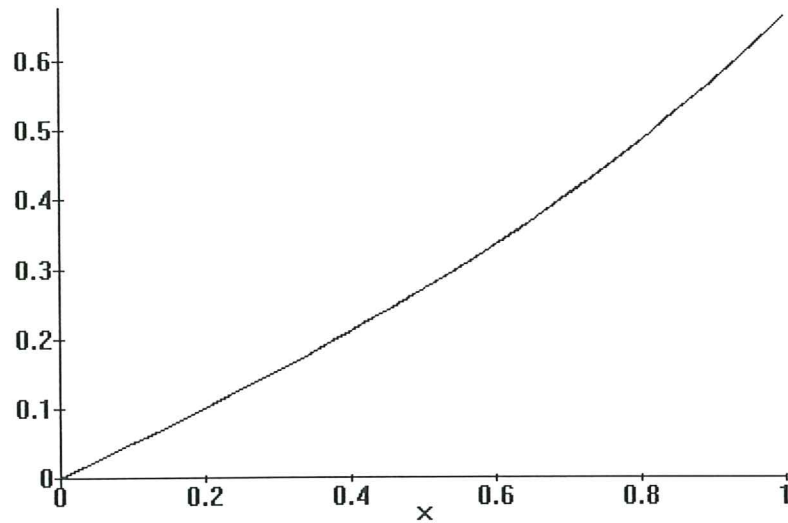
Gráfica 4. En las mismas condiciones que en la gráfica 3, pero doblamos el número de puntos.



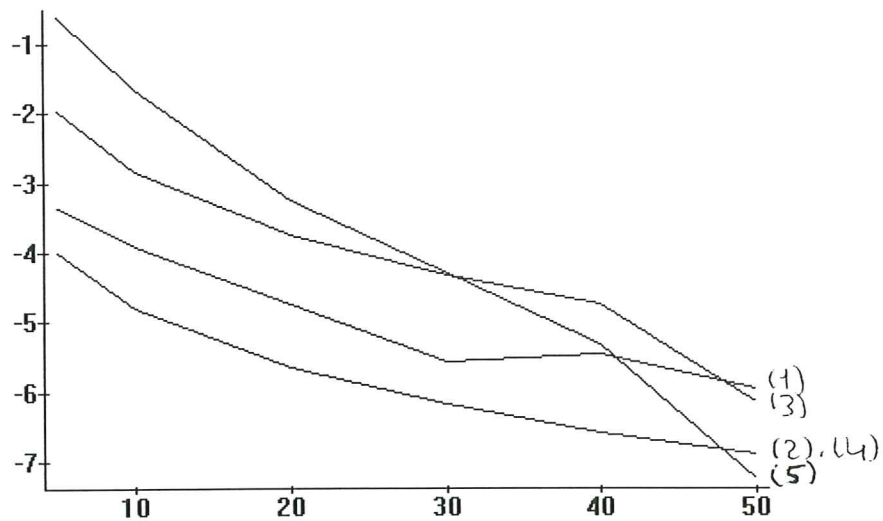
Gráfica 5. Superposición entre la solución exacta y la aproximada mediante Elementos Difusos, 10 puntos equidistantes y funciones de peso triangulares.



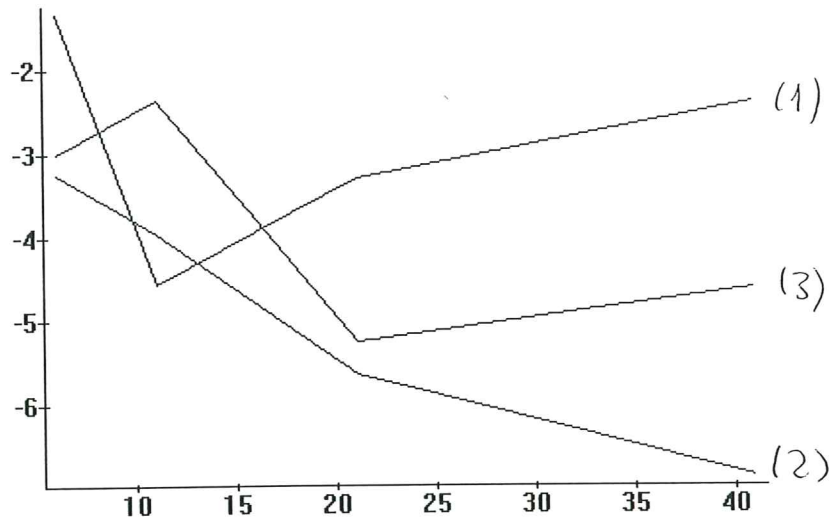
Gráfica 6. Superposiciones entre las soluciones exacta y las aproximadas mediante Elementos Difusos, funciones de peso de Gauss y usando 6, 11 y 21 puntos no equidistantes.



Gráfica 7. Superposición entre la solución exacta y la aproximada mediante el método de los puntos finitos, 20 puntos equidistantes, con funciones de peso de Gauss.

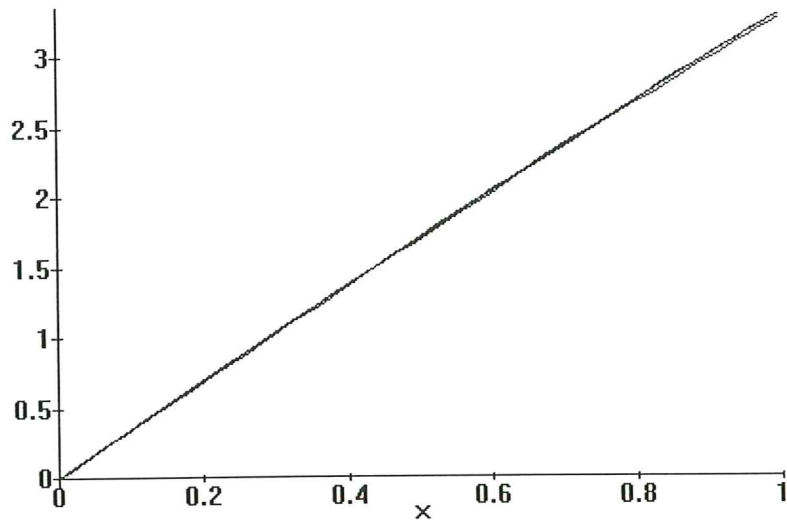


Gráfica 8. Gráfica del logaritmo del error relativo en función del número de puntos, usando los métodos: (1)-EFG, (2)-Elementos Difusos (DE) con funciones de ponderación triangulares, (3)-Elementos Difusos con funciones de Gauss, (4) y (5)-Método de los puntos finitos con funciones triangulares y de Gauss. (para puntos equidistantes, con la norma de los mínimos cuadrados).

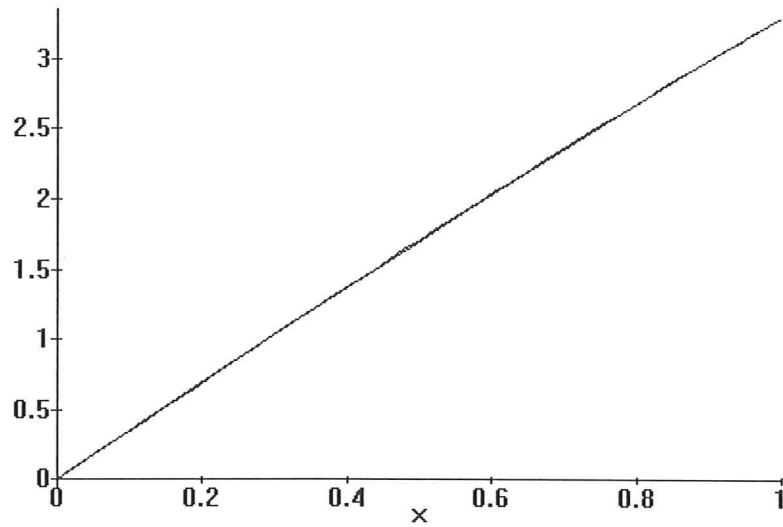


Gráfica 9. Logaritmo del error (norma infinito) para puntos no equidistantes en función del número de puntos utilizando las técnicas: (1), (2) y (3) igual que antes.

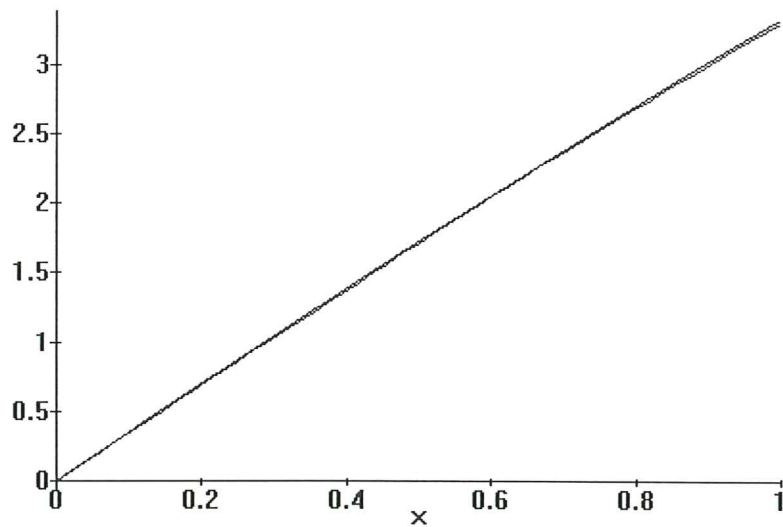
Caso $Q(x) = -\sin(x)$



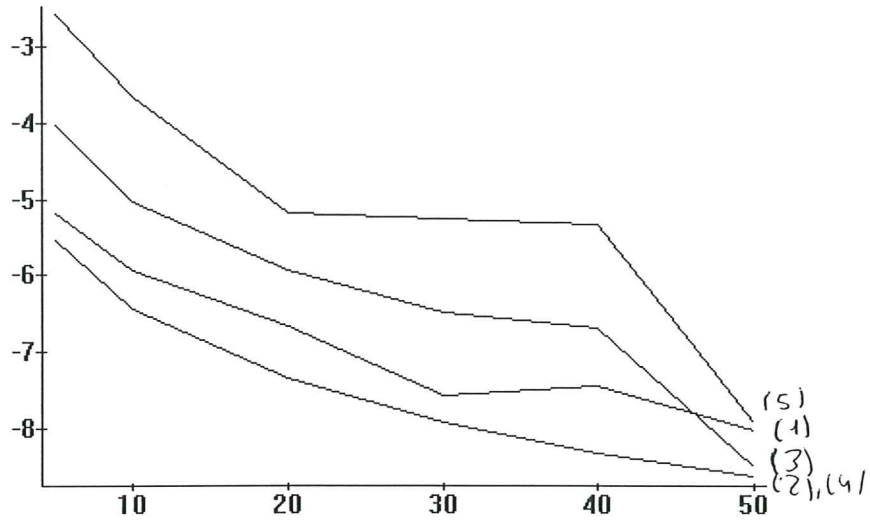
Gráfica 10. Comparación de las soluciones usando el EFG para 11 puntos no equidistantes (1), 41 puntos no equidistantes (2) y la exacta (3).



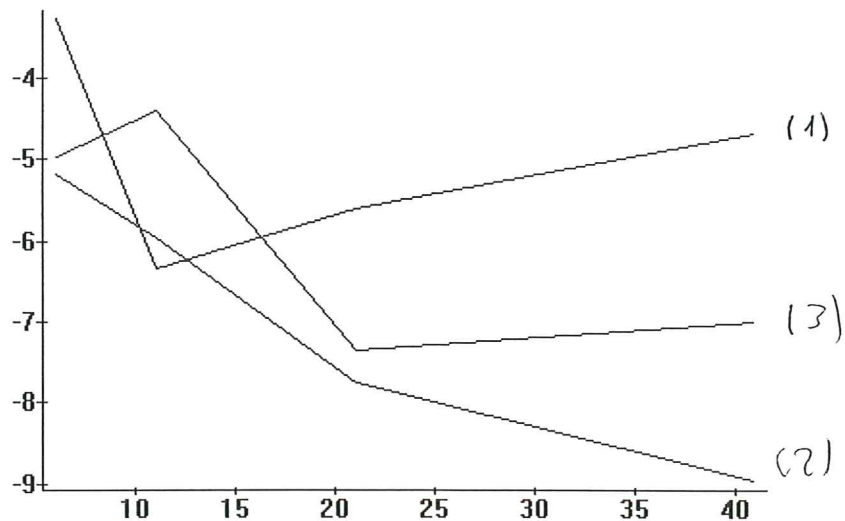
Gráfica 11. Superposición entre la solución exacta y la aproximada utilizando 11 puntos no equidistantes y funciones de peso triangulares.



Gráfica 12. Superposición entre la solución exacta y la aproximada utilizando 11 puntos no equidistantes y funciones de peso de Gauss.

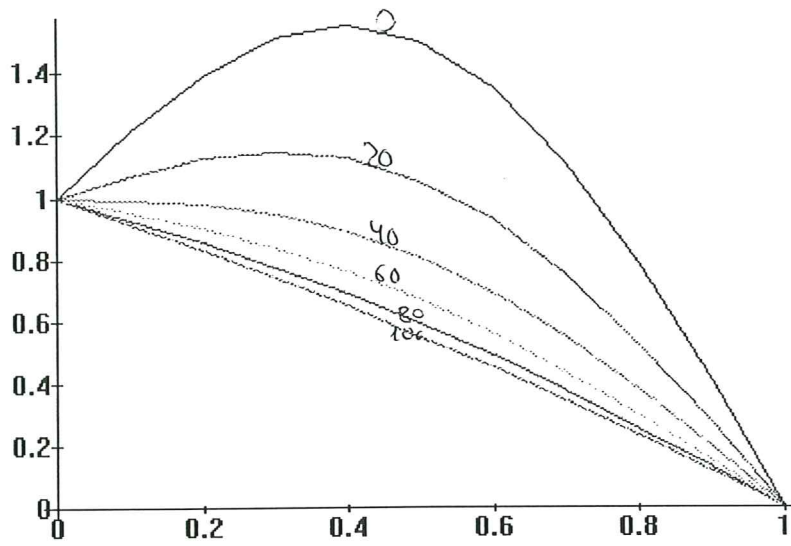


Gráfica 13. Gráfica del logaritmo del error relativo en función del número de puntos, usando los métodos: (1)-EFG, (2)-Elementos Difusos (DE) con funciones de ponderación triangulares, (3)-Elementos Difusos con funciones de Gauss, (4) y (5)-Método de los puntos finitos con funciones triangulares y de Gauss. (para puntos equidistantes, con la norma de los mínimos cuadrados).



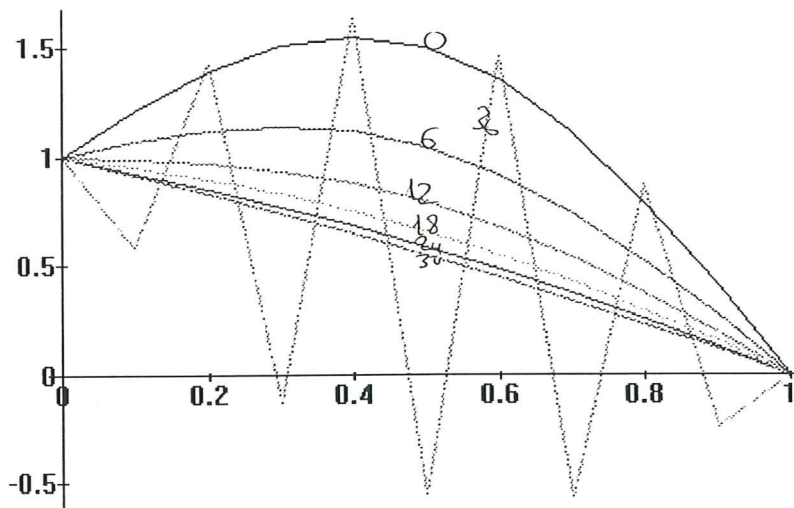
Gráfica 14. Logaritmo del error (norma infinito) para puntos no equidistantes en función del número de puntos utilizando las técnicas: (1), (2) y (3) igual que antes.

CASO 2-DIMENSIONAL:



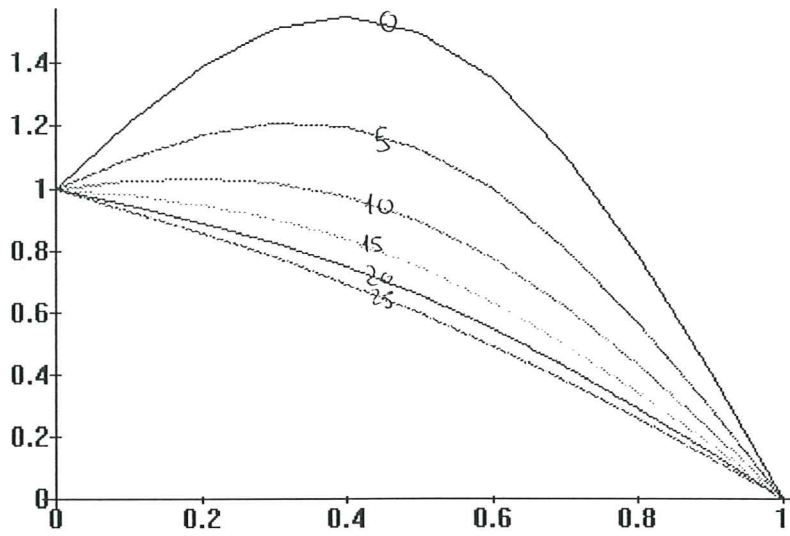
Gráfica 15: $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.003$, pasos=0,20,40,60,80,100, $r=0.3$

Métode explícito



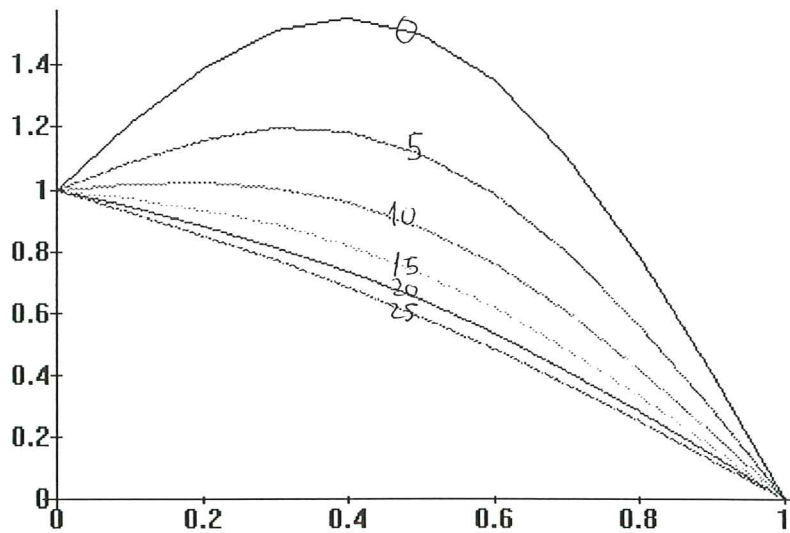
Gráfica 16: $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.01$, pasos=0,6,12,18,24,30,36 $r=1$

Método explícito.



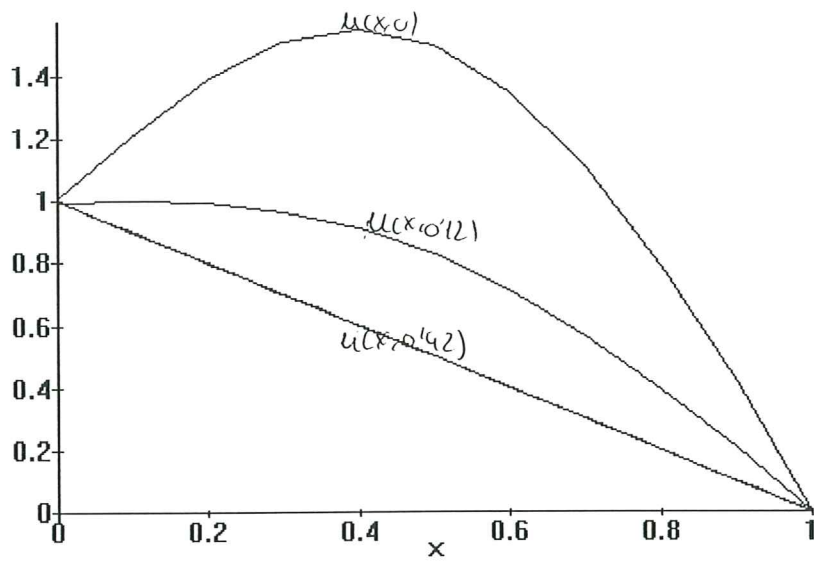
Gráfica 17: $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.01$, pasos=0, 5, 10, 15, 20, 25, $r=1$

Método implícito.



Gráfica 18: $\Delta x=0.1$, $\Delta t=0.01$, pasos=0, 5, 10, 15, 20, 25, $r=1$

Método Crank-Nicholson.



Gráfica 19. Representación de las gráficas correspondientes a $u(x, 0)$ (a), $u(x, 0.12)$ (b), $u(x, 0.42)$ (c) y la recta $1-x$ (d), por el método de los puntos finitos y funciones de peso triangulares.