

Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

Ecuación de Poisson: ec. elíptica → problemas de valores de contorno

En 1D,
$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\rho(x)$$

en un dominio $[0, L]$

c. c. $\phi(x=0)$, $\phi(x=L)$

Dirichlet

$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x=0)$, $\frac{\partial \phi}{\partial x}(x=L)$

Neumann

discretizamos: $x_j = j\Delta x$, $j = 0, 1, \dots, N$

$\phi_j \rightarrow \phi(x_j)$, $\rho_j \rightarrow \rho(x_j)$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\phi_{j+1} + \phi_{j-1} - 2\phi_j}{(\Delta x)^2}$$

$$\phi_{j+1} + \phi_{j-1} - 2\phi_j = -(\Delta x)^2 \rho_j$$

$$\bar{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_{N-1})$$

ϕ_0 , $\phi_N \rightarrow$ dato

Se puede escribir en forma matricial,

$$\mathbf{A} \bar{\phi} = \bar{\mathbf{w}}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

sistema de (N-1)x(N-1)

→ matriz tridiagonal

$$\bar{\mathbf{w}} = (-\phi_0 - (\Delta x)^2 \rho_1, -(\Delta x)^2 \rho_2, -(\Delta x)^2 \rho_3, \dots, -\phi_N - (\Delta x)^2 \rho_{N-1})$$

$$\Rightarrow \bar{\phi} = \mathbf{A}^{-1} \bar{\mathbf{w}}$$

→ hay que invertir una matriz tridiagonal → algoritmo TDMA

más general → ec. de la forma

$$f(x) \frac{d^2 \phi}{dx^2} + g(x) \frac{d\phi}{dx} + h(x) \phi = w(x)$$

$$\left(a \frac{d\phi}{dx} + b \phi \right)_{x_0} = c \quad \left(a' \frac{d\phi}{dx} + b' \phi \right)_{x_N} = c'$$

c.c. Robin

$$f_j \frac{(\phi_{j+1} + \phi_{j-1} - 2\phi_j)}{(\Delta x)^2} + g_j \frac{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})}{2\Delta x} + h_j \phi_j = w_j$$

$$\alpha_j \phi_{j+1} + \beta_j \phi_j + \gamma_j \phi_{j-1} = w'_j$$

$$\alpha_j = 2(\Delta x)^2 f_j + \Delta x g_j, \quad \beta_j = 2(\Delta x)^2 h_j - 4, \quad \gamma_j = 2(\Delta x)^2 f_j - \Delta x g_j, \quad w'_j = 2(\Delta x)^2 w_j$$

$$\text{c. c.} \rightarrow a\phi_1 + (b\Delta x - a)\phi_0 = c\Delta x \quad \alpha_0 = a, \quad \beta_0 = b\Delta x - a, \quad \gamma_0 = 0, \quad w'_0 = c\Delta x$$

$$-a'\phi_{N-1} + (b'\Delta x + a')\phi_N = c'\Delta x \quad \text{a } O(\Delta x)$$

$$\alpha_N = 0, \quad \beta_N = b\Delta x + a', \quad \gamma_N = -a', \quad w'_N = c'\Delta x$$

→ sist. tridiagonal → algoritmo TDMA

Ecuación de Poisson en 2D → ej: potencial eléctrico o gravitatorio

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) = -\rho(x, y)$$

Si es un dominio rectangular → $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$

con c.c. Dirichlet o Neumann

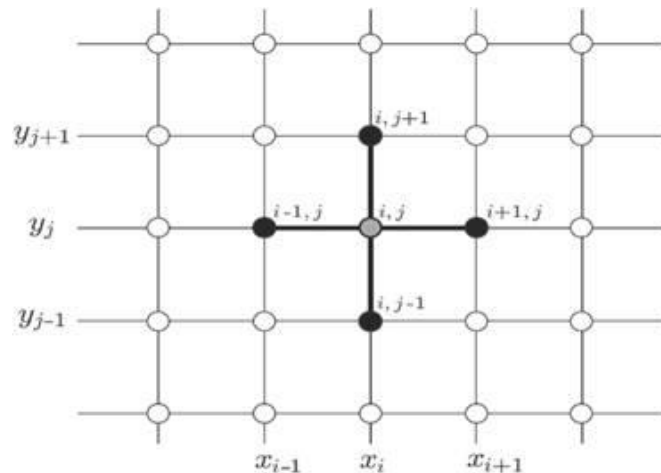
Discretización

$$x_i = i\Delta x \quad ; \quad i = 1, \dots, N-1 \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{(\Delta x)^2}$$

$$y_j = j\Delta y \quad ; \quad j = 1, \dots, M-1 \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \rightarrow \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{(\Delta y)^2}$$

Sup. $\Delta x = \Delta y = \Delta$

$$\boxed{(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}) - 4\phi_{i,j} = -\Delta^2 \rho_{i,j}}$$



Armamos un vector con los valores a determinar de la función incógnita,

$$\bar{\phi} = \phi_{(i-1) \times (M-1) + j} \iff \phi_{i,j} \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, N-1 \\ j = 1, \dots, M-1 \end{array} \rightarrow \text{vector de } (N-1) \times (M-1) \text{ elementos}$$

La ecuación en diferencias es:

$$\mathbf{A} \bar{\phi} = \bar{\mathbf{w}} \rightarrow \text{tiene las c.c. y los valores de } \rho_{i,j}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{pmatrix}$$

→ es una *matriz de bandas* de

$$[(N-1) \times (M-1)]^2$$

→ ejemplo con N=4, M=4

→ vector de 9 elementos

→ matriz de 9x9

$\mathbf{A} \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{w}}$ → sistema en general

$$a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \dots + a_{1m}u_m = w_1$$

$$\mathbf{A}_{ij} = a_{ij}$$

$$a_{21}u_1 + a_{22}u_2 + \dots + a_{2m}u_m = w_2$$

→ sistema de mxm

...

$$a_{m1}u_1 + a_{m2}u_2 + \dots + a_{mm}u_m = w_m$$

matriz *adjunta*, que resulta de reemplazar la columna j de \mathbf{A} por el vector columna \mathbf{w}

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{A}^{-1} \bar{\mathbf{w}}$$

$$u_j = \frac{\det(\mathbf{A}_j)}{\det(\mathbf{A})}$$

→ regla de Cramer

→ involucra $m!$ operaciones → impráctico

Por *eliminación de Gauss*,

u_1, u_2, \dots, u_m son eliminadas sucesivamente hasta que sólo queda una

sup. empiezo eliminando $u_1 \rightarrow$ multiplicamos ecs 2 a m por a_{11}/a_{i1} y las resto de la ec. 1

$$a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \dots + a_{1m}u_m = w_1$$

$$a'_{22}u_2 + \dots + a'_{2m}u_m = w'_2$$

$$a'_{32}u_2 + \dots + a'_{3m}u_m = w'_3$$

...

$$a'_{m2}u_2 + \dots + a'_{mm}u_m = w'_m$$

$$a'_{ij} = \frac{a_{11}}{a_{i1}}a_{ij} - a_{1j}$$

$$w'_i = \frac{a_{11}}{a_{i1}}w_i - w_1$$

Repito el procedimiento, ahora con u_2

→ sigo hasta que me queda una ec. con una única incógnita u_m

$$a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 \dots + a_{1m}u_m = w_1$$

$$a'_{22}u_2 + a'_{23}u_3 + \dots + a'_{2m}u_m = w'_2$$

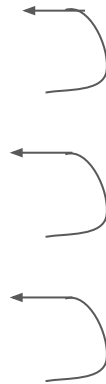
$$a''_{33}u_3 + \dots + a''_{3m}u_m = w''_3$$

...

$$a^{m-1}_{mm}u_m = w^{m-1}_m \rightarrow \text{obtengo } u_m$$



sistema triangular



En términos matriciales esto involucra la factorización de **A** en dos matrices triangulares **L** (lower) y **U** (upper)

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 & 0 \\ x & x & x & 0 & 0 \\ x & x & x & x & 0 \\ x & x & x & x & x \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{w}}$$

$$\mathbf{LU} \bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{w}}$$

$$\mathbf{U} \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{L}^{-1} \bar{\mathbf{w}}$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{L}^{-1} \bar{\mathbf{w}}$$

factorización LU, Cholesky (en el caso de matrices simétricas)

↖ \mathbf{L} es la transpuesta de \mathbf{U}

→ el número de operaciones es de orden m^3

→ paquetes de álgebra lineal: [LAPACK](#)

Sucesor de [LINPACK](#) → [Top500](#) : la lista de las 500 supercomputadoras más rápidas del mundo

Actualmente la más rápida es la supercomputadora [Fugaku](#) en Kobe, Japón

→ **442 PFLOPS** !!



[PFLOPS](#) = Peta Floating Point Operations per Second = 10^{15} FLOPS

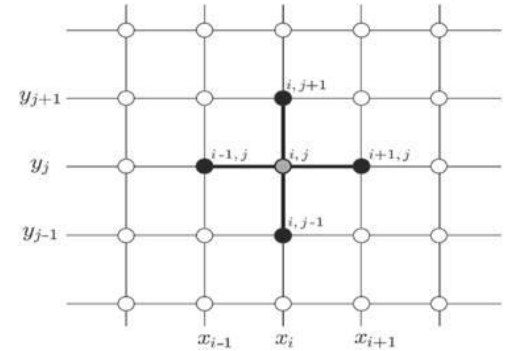
Computadoras hogareñas más rápidas, consolas de videojuegos → TFLOPS = TeraFLOPS = 10^{12} FLOPS

Métodos iterativos

→ Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, ADI

$$(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}) - 4\phi_{i,j} = -\Delta^2 \rho_{i,j}$$

$$\Rightarrow \phi_{i,j} = \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}) + \frac{\Delta^2}{4} \rho_{i,j}$$



Empiezo con una aproximación inicial, por ejemplo $\phi_{i,j}$ = promedio de los valores en los bordes

y luego “barro” todos los puntos i,j , y repito esto n veces, es decir, “itero”

Jacobi:
$$\phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j}^n + \phi_{i-1,j}^n + \phi_{i,j+1}^n + \phi_{i,j-1}^n) + \frac{\Delta^2}{4} \rho_{i,j}^n$$

residuo de la iteración n

La idea es que después de un cierto número de iteraciones la solución no cambie mucho, es decir

$$|\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n| \rightarrow 0$$

(el método converge)

Equivalencia evolución temporal:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nu \nabla^2 \phi + \nu \rho(x, y)$$

→ solución estacionaria

$$\nabla^2 \phi = -\rho(x, y)$$

$$\frac{\phi_{i,j}^{n+1} - \phi_{i,j}^n}{\Delta t} = \nu \frac{\phi_{i+1,j}^n + \phi_{i-1,j}^n + \phi_{i,j+1}^n + \phi_{i,j-1}^n - 4\phi_{i,j}^n}{\Delta^2} + \nu \rho_{i,j}$$

$$\phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{4} (\phi_{i+1,j}^n + \phi_{i-1,j}^n + \phi_{i,j+1}^n + \phi_{i,j-1}^n) + \frac{\Delta^2}{4} \rho_{i,j}$$

$$\text{si } \frac{\nu \Delta t}{\Delta^2} = \frac{1}{4} \rightarrow \Delta t = \frac{\Delta^2}{4\nu}$$