MÉTODOS NUMÉRICOS CON APLICACIONES

- Curso: Master Matemática e Informática Aplicadas en Ciencias e Ingeniería
- Cuatrimestre: 1º
- Créditos ECTS: total 5 (30 horas de teoría / 15 de prácticas / 80 de trabajo)
- Tipo: optativa
- Especialidad Matemática Aplicada y Computacional
- Área de conocimiento: Matemática Aplicada
- Departamentos: Matemática Aplicada (UMU) y Matemática Aplicada y Estadística (UPCT)

Profesorado

- Sergio Amat Plata sergio.amat@upct.es
- Julio Guerrero juguerre@um.es

Presentación

La modelización de fenómenos de la Ciencia y Tecnología se realiza mediante ecuaciones diferenciales. Los más habituales son precisamente la de modelos de evolución en los que se describe la dinámica a lo largo del tiempo de determinada cantidad o variable (también a veces denominada estado) que puede representar objetos de lo más diversos que van desde la posición de un satélite en el espacio hasta la dinámica de un átomo, pasando por los índices bursátiles o el grado en que una enfermedad afecta a la población. En otras palabras, los modelos dinámicos o de evolución son los más naturales en la medida que reproducen nuestra propia concepción del mundo: un espacio tri-dimensional que evoluciona y cambia en el tiempo. Cuando el estado o variable de un modelo o sistema de evolución es finito-dimensional, el modelo más natural es un sistema de EDO, cuya dimensión coincide precisamente con el del número de parámetros necesarios para describir dicho estado. Así, por ejemplo, para posicionar una partícula en el espacio necesitamos de tres variables dependientes del tiempo y para describir su dinámica un sistema de tres ecuaciones diferenciales. Pero en muchas ocasiones, como es el caso sistemáticamente en el contexto de la Mecánica de Medios Continuos, la variable de estado es infinito-dimensional. Esto ocurre por ejemplo cuando se pretende describir la deformación de cuerpos elásticos o la temperatura de un cuerpo sólido en los que la deformación o temperatura de cada uno de los puntos de ese medio continuo constituye una variable o incógnita del sistema. Los modelos matemáticos naturales en este caso son las EDP. Dado que estos tipos de ecuaciones no pueden resolverse se hace imprescindible el uso de métodos numéricos. En esta asignatura se estudiarán los algoritmos más usados para la aproximación de estos modelos.

Descriptores

Resolución numérica de EDO, Resolución numérica de EDP, Fundamentos del MEF, Aplicaciones a las ciencias experimentales.

Objetivos

El objetivo fundamental del curso es explicar al alumno los principales métodos de resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) y ecuaciones en derivadas parciales (EDPs), así como introducirlos en el campo de los elementos finitos. Se motivará con ejemplos realistas la necesidad de disponer de algoritmos de resolución aproximada de ecuaciones diferenciales. Serán estudiados conceptos como la convergencia, orden, estabilidad, error y eficacia de los métodos numéricos, y se dotará al estudiante de criterios para decidir cual es el método numérico más adecuado para cada problema. En la parte práctica de la asignatura se desentrañará la programación de algunos de los métodos numéricos más importantes, los cuales serán sometidos a distintas pruebas para determinar su eficacia.

Conocimientos previos

Haber cursado alguna asignatura de Análisis Numérico básico.

Programa de teoría

Tema 1. Resolución numérica de EDO's
- 1.1 Generalidades de ecuaciones diferenciales ordinarias
- 1.2 Discretización de una ecuación diferencial ordinaria
- 1.3 Conceptos teóricos fundamentales: convergencia, orden, estabilidad, error y eficacia
- 1.4 Esquemas de un paso: métodos de Taylor y Runge-Kutta
- 1.5 Algoritmos de cambio de paso
- 1.6 Métodos lineales multipaso

Tema 2. Resolución numérica de EDP
- 2.1 Generalidades de ecuaciones en derivadas parciales
- 2.2 Algoritmos de diferencias finitas para una ecuación en derivadas parciales
- 2.3 Resolución de varios ejemplos particulares de ecuaciones en derivadas parciales

Tema 3. Fundamentos del MEF
- 3.1 Modelización matemática en mecánica de medios continuos
- 3.2 Ecuaciones en Derivadas Parciales
- 3.3 Método de los Elementos Finitos

Tema 4. Aplicaciones a las ciencias experimentales

Programa de prácticas

Práctica 1. EDO's

Introducción al Análisis Numérico y a los manipuladores simbólicos
Métodos Runge-Kutta
Comportamiento del error y análisis de datos
Métodos lineales multipaso

Práctica 2. EDP's
Generalidades de ecuaciones en derivadas parciales
Algoritmos de diferencias finitas para una ecuación en derivadas parciales
Resolución de varios ejemplos particulares de ecuaciones en derivadas parciales

Práctica 3. Fundamentos del M.E.F.
Simulación Numérica con Matlab

Sistema y criterios de evaluación

La evaluación del curso estará basada en la asistencia a clase y en la realización de los ejercicios y cuestiones que se propondrán a lo largo del curso. También se podrá proponer al alumno un trabajo sobre algún tema específico.

Bibliografía

- M. Calvo, J. I. Montijano y L. Rández, Curso de Análisis Numérico (Métodos de Runge-Kutta para la resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias). Servicio de Publicaciones de la Universidad de Zaragoza, 1985.
- P.G. Ciarlet, The finite element method for elliptic problems, North-Holland (1978).
- E. Hairer, S. P. Norsett y G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems (segunda edición). Springer Berlin, 1993.
- J. D. Lambert, Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem. John Wiley & Sons, 1991.
- J. C. Strikwerda, Finite Difference Schemes and partial Differential Equations. Chapman and Hall/CRC Press, 1989.

Planificación de la docencia y la evaluación

Las clases de pizarra supondrán aproximadamente el 75% del total. En ellas estudiaremos los conceptos teóricos y resolveremos manualmente ejercicios sencillos que faciliten al alumno su comprensión. En las prácticas de informática realizaremos una programación desde cero de algunos importantes métodos numéricos, y estudiaremos su comportamiento numérico. Estas prácticas se realizarán en MATHEMATICA y/o Matlab. Para la prácticas podría colaborar la Prof. Sonia Busquier de la UPCT.

Tema 1. (Julio Guerrero 10h. teoría, Sergio Amat 5h. prácticas; 26 h. Trabajo; 33% Evaluación)
En primer lugar se revisarán los conceptos de ecuación diferencial ordinaria y ecuación en derivadas parciales, y se recordarán las condiciones de existencia y unicidad de soluciones.

Como hay muy pocos casos que se sepan resolver se introducirá el concepto de ecuación en diferencias, cuya solución es fácilmente implementable de forma algorítmica. Se recordará el teorema de existencia de soluciones de un problema de valores iniciales, que sólo requiere que la función sea continua. Si además se exige a la función una condición de Lipschitz respecto a la variable vectorial se puede garantizar la unicidad de solución global. Se revisará además la definición de EDP. La cuestión de la unicidad de soluciones es más compleja que para EDOs, porque el conjunto en el que se desea calcular la solución puede ser mucho más complejo que un intervalo. En la sección dedicada a los métodos de un paso se introducirá el concepto de error local, y a partir de él se comprobará la estabilidad de este tipo de métodos. También se mostrará que, al igual que para las reglas de cuadratura compuestas, en el error global se produce la pérdida de una unidad en el exponente debido a la acumulación de errores locales. Se presentarán distintos algoritmos en función del número de pasos que involucren. Se explicará el método basado en el polinomio de Taylor, y se destacará su elevado coste computacional. Para solventar esta cuestión se presentarán los métodos de tipo Runge-Kutta explícitos, que evitan el cálculo de diferenciales elementales sustituyéndolas por evaluaciones de función. Esta clase de algoritmos presentan problemas para obtener órdenes elevados, e involucran un alto número de evaluaciones de función. Estos dos inconvenientes pueden subsanarse con métodos lineales multipaso. Se estudiarán con profundidad los métodos de Adams, para los que es indispensable el conocimiento de la forma de Newton de la interpolación de Lagrange. La desventaja que presentan los métodos multipaso radica en su inicialización, que en muchas ocasiones se realiza a partir de un método de un paso. Aunque en muchos textos se obvia, consideramos imprescindible la inclusión de una sección dedicada a los métodos de paso variable, pues estos son los más utilizados en la práctica.

Tema 2. (Sergio Amat 10h. teoría + 5h. prácticas, 27 h. Trabajo, 33% Evaluación)
En esta parte del curso se realizará un breve acercamiento a la resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales. Se estudiarán algunas ecuaciones particulares de interés, y se plantearán esquemas numéricos basados en diferencias finitas. En primer lugar se definirá el concepto de carácter de una EDP en dos variables en función del signo de su discriminante. Se explicará el algoritmo de resolución cuando una de las variables físicas se corresponde con el tiempo, y se estudiará la estabilidad a partir del factor de amplicación. También se comentará que la aparición de dos amplitudes de paso distintas genera la aparición de dos órdenes de consistencia distintos. Para centrar al alumno en casos concretos se estudiarán las ecuaciones del calor y ondas unidimensional y la de Poisson bidimensional. En todos los casos se considerarán condiciones de tipo Dirichlet, y se construirán algoritmos de segundo orden e incondicionalmente estables. Se analizará el tema con una introducción a la resolución numérica de las leyes de conservación, que son de gran interés en dinámica de fluidos.

Tema 3. (Julio Guerrero 5h. teoría, Sergio Amat 5h teoría + 5 prácticas; 27 Trabajo; 34% Evaluación)
El método de los elementos finitos (MEF en castellano o FEM en inglés) es un método numérico muy general para la resolución de ecuaciones diferenciales muy utilizado en diversos problemas de ingeniería y física. En este tema se presenta una introducción del mismo. El método se basa en dividir el cuerpo, estructura o dominio (medio continuo) sobre el que están definidas ciertas ecuaciones integrales que caracterizan el comportamiento físico del problema en una serie de subdominios no intersectantes entre si

denominados elementos finitos. El conjunto de elementos finitos forma una partición del dominio también denominada discretización. Dentro de cada elemento se distinguen una serie de puntos representativos llamados nodos. Dos nodos son adyacentes si pertenecen al mismo elemento finito, además un nodo sobre la frontera de un elemento finito puede pertenecer a varios elementos, el conjunto de nodos considerando sus relaciones de adyacencia se llama malla. Los cálculos se realizan sobre una malla o discretización creada a partir del dominio con programas especiales llamados generadores de mallas, en una etapa previa a los cálculos que se denomina pre proceso. De acuerdo con estas relaciones de adyacencia o conectividad se relaciona el valor de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo y denominadas grados de libertad. El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable entre los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales (o linealizadas), la matriz de dicho sistema de ecuaciones se llama matriz de rigidez del sistema. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos. Típicamente el método de los elementos finitos, se programa computacionalmente para calcular el campo de desplazamientos y posteriormente a través de relaciones cinemáticas y constitutivas las deformaciones y tensiones respectivamente, cuando se trata de un problema de a mecánica de sólidos deformable o más generalmente un problema de mecánica de medios continuos. El método de los elementos finitos es muy usado debido a su generalidad y a la facilidad de introducir dominios de cálculo complejos (en dos o tres dimensiones). Además el método es fácilmente adaptable a problemas de difusión del calor, de mecánica de fluidos para calcular campos de velocidades y presiones o de campo electromagnético. Dada la imposibilidad práctica de encontrar la solución analítica de estos problemas, con frecuencia en la práctica ingenieril los métodos numéricos, y en particular los elementos finitos se convierten en la única alternativa práctica de cálculo. Una importante propiedad del método es la convergencia, si se consideran particiones de elementos finitos sucesivamente más finas la solución numérica calculada converge rápidamente hacia la solución exacta del sistema de ecuaciones.

Tema 4.
Incluido en los tres anteriores.

La distribución del trabajo entre los profesores implicados queda:

	Teoría	Prácticas	Trabajo	Evaluación	Créditos
Sergio Amat	15	15	48	60%	3
Julio Guerrero	15	0	32	40%	2