Cálculo Simbólico y Numérico en ED: sobre formulaciones variacionales. Método de Galerkin / Elementos Finitos.

Mª Eugenia Pérez Martínez
meperez@unican.es

ETSI Caminos, Canales y Puertos
Universidad de Cantabria

Curso 2012–2013

Problema de contorno: Formulación variacional

Dado un problema de contorno regular:

$$(\mathbf{PC}) \begin{cases} (p(x)y')' + q(x)y = r(x)\,, & x \in (a,b), \\ y(a) = 0 \quad , & y(b) = 0\,, \end{cases}$$

$p(x), p'(x), q(x), r(x)$ funciones continuas en $[a,b]$,
$p(x) > 0\,,\ \forall x \in [a,b]$, $-\infty < a < b < \infty$,

(**PC**) Admite una **formulación variacional** o **formulación débil** equivalente:
Encontrar $y(x)$ verificando $y(a) = y(b) = 0$ y

$$(\mathbf{FV}) \quad -\int_a^b p(x)y'(x)\varphi'(x)dx + \int_a^b q(x)y(x)\varphi(x)dx = \int_a^b r(x)\varphi(x)dx$$

$\forall\varphi$ continua en $[a,b]$/ φ' continua a trozos en $[a,b]$, $\varphi(a) = \varphi(b) = 0$.

- La solución de (PC) es solución de (FV)
- La solución de (FV) regular es solución de (PC)

- Para condiciones de contorno más generales:

$$y'(a) = \alpha y(a), \quad y'(b) = \beta y(b)$$

cambia (**FV**):

$$-\int_a^b p(x)y'(x)\varphi'(x)dx - p(a)y'(a)\varphi(a) + p(b)y'(b)\varphi(b) +$$

$$\int_a^b q(x)y(x)\varphi(x)dx = \int_a^b r(x)\varphi(x)dx$$

$\forall\varphi$ continua en $[a, b]$/ φ' continua a trozos en $[a, b]$.

- α o β arriba pueden ser cero; también afectar sólo a un punto: e.g., $y'(a) = 0,\ y(b) = 0 \Rightarrow$ tomar $\varphi(b) = 0$.

- Extensión a otras condiciones de contorno (homogéneas y no homogéneas) para $y(x)$ y/o $y'(x)$ sobre a y/o sobre b.

Método de Galerkin

Dadas las funciones $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^N$ suficientemente regulares tal que $\varphi_i(a) = \varphi_i(b) = 0$. Buscar la aproximación de la solución $y(x)$ de (PC):

$$y_N(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x)$$

para ciertas constantes c_i a determinar tales que

$$\int_a^b [(p(x)y_N')' + q(x)y_N - r(x)]\varphi_i(x)\,dx = 0, \quad \forall i = 1, 2, \cdots, N$$

La determinación de los coeficientes $c_i \Rightarrow$ resolución de un sistema de ecuaciones para una matriz simétrica: $A\bar{c} = \bar{f}$

$$A = (a_{i,j})_{i,j=1,2,\cdots,N},\ \bar{c} = (c_1, c_2, \cdots, c_N)^T,\ \bar{f} = (f_1, f_2, \cdots, f_N)^T$$

$$a_{i,j} = -\int_a^b p(x)\varphi_i'(x)\varphi_j'(x)\,dx + \int_a^b q(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\,dx$$

$$f_i = \int_a^b r(x)\varphi_i(x)\,dx$$

Necesidad de:

- estimar el error $|y(x) - y_N(x)|$ para N grande
- integraciones numéricas
- resolver numéricamente un sistema con muchas ecuaciones
- una base $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^{\infty}$ adecuada de funciones para reducir cálculos numéricos

Esquema para un programa:

- Introducir datos p, q, r y N, y las funciones de base $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^{N}$

  (e.g., $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^{\infty}$ las funciones propias de un problema regular de valores propios en (a, b))
- Calcular las integrales para introducir el sistema
  Resolver el sistema de N ecuaciones con N incógnitas

$$A\bar{c} = \bar{f}$$

  (para cada $i = 1, 2, \cdots N$, c_i aproximaría al i-ésimo coeficiente del desarrollo en serie de Fourier de la solución exacta $y(x)$)
- Dibujar la aproximación de la solución $y_N(x) = \displaystyle\sum_{i=1}^{N} c_i\varphi_i(x)$
- Comparar si se puede $y_N(x)$ la solución exacta $y(x)$ y c_i con los coeficientes de Fourier α_i

Un ejemplo para el Método de Galerkin:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} y'' - y & = & x^2, \quad x \in (0,1) \\ y(0) = 0 & , & y(1) = 0 \end{array} \right.$$

$y(x)$ la solución se aproxima por $y_N(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(x)$. Tomar para aproximar las funciones propias del problema de valores propios:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} y'' + \lambda y & = & 0, \quad x \in (0,1) \\ y(0) = 0 & , & y(1) = 0 \end{array} \right. ,$$

$$\{\varphi_k(x)\}_{k=1}^{\infty} \equiv \{\sin(k\pi x)\}_{k=1}^{\infty}.$$

Para $i, j = 1, 2, 3, 4...., N$

$$a_{i,j} = -\int_0^1 ij\pi^2 \cos(i\pi x)\cos(j\pi x)dx - \int_0^1 \sin(i\pi x)\sin(j\pi x)dx$$

$$f_i = \int_0^1 x^2 \sin(i\pi x)\, dx$$

Ejemplo: método de Galerkin (continua)

De las características de los datos $p(x) = 1$, $q(x) = -1$, y $r(x) = x^2$, se tiene:

- una matriz diagonal A
- cálculos explícitos de las integrales
- resolución del sistema: $c_i = f_i a_{i,i}^{-1}$
- comparación de la solución con la solución aproximada y de los c_i con los coeficientes de Fourier de la solución
- Los primeros coeficientes c_i son los más significativos
-error pequeño en la aproximación

De manera general, para (**PC**):

$$(p(x)y')' + q(x)y = r(x) \quad x \in (0, 1)$$

$$y(0) = 0, \quad y(1) = 0$$

$$a_{i,j} = -\int_0^1 ij\pi^2 \cos(i\pi x)\cos(j\pi x)p(x)\,dx + \int_0^1 \sin(i\pi x)\sin(j\pi x)q(x)\,dx$$

$$f_i = \int_0^1 r(x)\sin(i\pi x)\,dx$$

Esquema del programa:

- Introducir datos p, q, r y N, y calcular las integrales

$$a_{i,j} = -\int_0^1 ij\pi^2 \cos(i\pi x)\cos(j\pi x)p(x)\,dx + \int_0^1 \sin(i\pi x)\sin(j\pi x)q(x)\,dx$$

$$f_i = \int_0^1 r(x)\sin(i\pi x)\,dx, \qquad i,j = 1,2,\cdots N$$

- Resolver el sistema de N ecuaciones con N incógnitas

$$A\bar{c} = \bar{f}$$

Para cada $i = 1,2,\cdots N$, c_i aproxima al i-ésimo coeficiente de Fourier de la solución exacta $y(x)$:

$$\alpha_i = \frac{\int_0^1 y(x)\sin(i\pi x)\,dx}{\int_0^1 (\sin(i\pi x))^2\,dx}$$

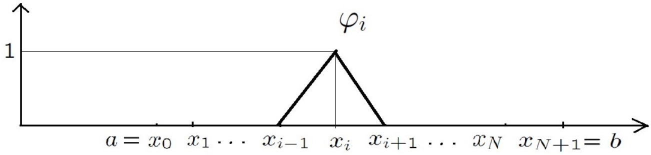
- Dibujar la aproximación de la solución $y_N(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i \sin(i\pi x)$
- Comparar si se puede $y_N(x)$ con la solución exacta $y(x)$ y c_i con los coeficientes de Fourier α_i

Método de los Elementos Finitos

Tomar como funciones de base las funciones lineales a trozos, $\{\varphi_i\}_{i=1}^N$, asociadas a los nodos de la partición en $[a,b]$:

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots x_N < x_{N+1} = b$$

$$x_i = a + i\,h, \quad h = \frac{b-a}{N+1}, \quad i = 0,1,2,\cdots,N+1$$

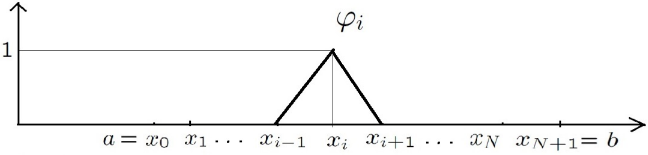


$\{\varphi_i\}_{i=1}^N$ funciones de base de elementos finitos

$\{\varphi_i\}_{i=1}^N$, φ_i polinomio de grado 1 en $[x_j, x_{j+1}]$

$\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}$, $i = 1,2,\cdots,N$, $j = 0,1,2,\cdots,N+1$

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{h} & si \quad x \in [x_{i-1}, x_i] \\ -\frac{x-x_{i+1}}{h} & si \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & si \quad x > x_{i+1} \text{ o } x < x_{i-1} \end{cases}$$



Propiedades importantes

- La matriz A es tridiagonal: $a_{i,j} = 0$ si $|i - j| > 1$
- La matriz A es simétrica: $a_{i,j} = a_{j,i}$
- Integraciones sobre cada segmento $[x_j, x_{j+1}]$
- Integrales afectando a φ_i no nulas en $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.
- La resolución del sistema $A\bar{c} = \bar{f}$ nos da $c_i = y_N(x_i)$: la aproximación de la solución exacta de (PC) en los puntos de la partición $y(x_i)$.
- Estimación del error, supuesto $q(x)$; $r(x)$ continuas en $[0, 1]$, para la ecuación $y'' + q(x)y = r(x), \quad x \in (0, 1)$:

$$|y(x_i) - c_i| \leq Ch\,, \forall i = 1, 2, \cdots, N$$

- Extensión de la estimación del error a otros problemas bajo condiciones de regularidad de la solución.

Ejemplo y fórmulas para el Método de los Elementos Finitos

Para $q(x) \leq 0$, se considera el problema:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} y'' + q(x)y & = & r(x), \quad x \in (0,1), \\ y(0) = 0 & , & y(1) = 0, \end{array} \right. ,$$

$$\textbf{(FV)} \quad -\int_0^1 y'(x)\varphi'(x)dx + \int_0^1 q(x)y(x)\varphi(x)dx = \int_0^1 r(x)\varphi(x)dx$$

φ continua en $[0,1]$/ φ' continua a trozos en $[0,1]$, $\varphi(0) = \varphi(1) = 0$

$$y(x) \approx y_N(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i\varphi_i(x), \quad \varphi_i(0) = \varphi_i(1) = 0$$

$\Rightarrow$ resolución del sistema: $A\bar{c} = \bar{f}$

$$A = (a_{i,j})_{i,j=1,2,\cdots,N}, \ \bar{c} = (c_1, c_2, \cdots, c_N)^T, \bar{f} = (f_1, f_2, \cdots, f_N)^T$$

$$a_{i,j} = -\int_a^b \varphi_i'(x)\varphi_j'(x)\,dx + \int_a^b q(x)\varphi_i(x)\varphi_j(x)\,dx$$

$$f_i = \int_a^b r(x)\varphi_i(x)\,dx$$

Ejemplo: método de los elementos finitos (continua)

Las integrales y definiciones de $\{\varphi_i\}_{i=1}^N \Rightarrow$: $\quad a_{i,j} = 0 \;$ si $\; |i-j| > 1$

$$a_{i,i} = \frac{1}{h^2}(-2h + Q_i + R_i), \quad i = 1, 2, \cdots, N\,,$$

$$a_{i,i+1} = \frac{1}{h^2}(h - S_{i+1}), \quad i = 1, 2, \cdots, N-1\,,$$

$$a_{i,i-1} = \frac{1}{h^2}(h - S_i), \quad i = 2, 3, \cdots, N\,,$$

donde

$$R_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} q(x)(x - x_{i+1})^2\,dx\,, \quad Q_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} q(x)(x - x_{i-1})^2\,dx\,,$$

$$S_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} q(x)(x - x_{i-1})(x - x_i)\,dx\,,$$

$$f_i = \frac{1}{h}\int_{x_{i-1}}^{x_i} r(x)(x - x_{i-1})\,dx + \frac{1}{h}\int_{x_i}^{x_{i+1}} r(x)(-x + x_{i+1})\,dx\,,$$

GRÁFICA la solución aproximada: unir por rectas los puntos $(0,0)$, (x_1, c_1), (x_2, c_2), ..., (x_N, c_N), $(1,0)$.
Comparar si se puede con la gráfica solución exacta

Ejemplo: método de los elementos finitos (continua)

- La matriz A es tridiagonal y simétrica
- Integraciones sobre cada segemento $[x_j, x_{j+1}]$
- Integraciones afectando a φ_i no nulas en $[x_{i-1}, x_{i+1}]$.
- La resolución del sistema $A\bar{c} = \bar{f}$ nos da $c_i = y_N(x_i) \approx y(x_i)$.
- Error (con $q(x)$, $r(x)$ continuas en $[0,1]$): $|y(x_i) - c_i| \leq Ch$,
- Mayor error con integración numérica: e.g., fórmula del punto central $\Rightarrow \int_a^b \chi(x)dx \approx (b-a)\chi(\frac{a+b}{2})$

$$f_i = hr(x_i)\,, \quad Q_i = q(\frac{(x_i + x_{i-1})}{2})\frac{h^3}{4}\,,$$

$$R_i = q(\frac{(x_i + x_{i+1})}{2})\frac{h^3}{4}\,, \quad S_i = -q(\frac{(x_i + x_{i-1})}{2})\frac{h^3}{4}$$

- Matrices con muchos ceros $\Rightarrow$ ventajas de almacenamiento
- La matriz del sistema A, obtenida con el método de elementos finitos, se denomina *matriz de rigidez*, y en general, suele obtenerse como suma o *ensamblaje* de *matrices de rigidez elementales* en cada segmento (*elemento finito*)
- Extensiones a problemas de contorno planteados con EDP

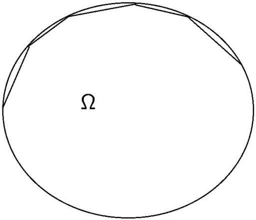
Elementos finitos para un problema de contorno en $\Omega \subset \mathbf{R}^2$

- Aproximación del dominio Ω por un dominio con frontera poligonal
- Introducción de una cierta *triangularización regular*

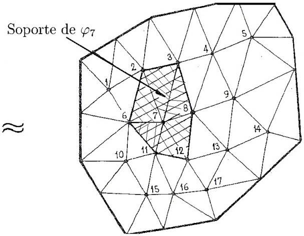
...con *tamaño de los triángulos* $\rightarrow 0$

- Numeración conveniente de los vértices / nodos

$\Rightarrow$ matriz tridiagonal por bloques



$\approx$



Formulación variacional / elementos finitos para un problema de Dirichlet: esquema

$$(\mathbf{PC}) \begin{cases} -\Delta u = f\,, & \text{en} \quad \Omega \\ y = 0 & \text{sobre} \quad \partial\Omega\,. \end{cases}$$

Para ciertas funciones $\varphi_j(x, y)$ lineales a trozos, φ_i tomando el valor 1 en el nodo j y 0 en el resto de los nodos ($\varphi_j(x, y) = a^j x + b^j y + c^j$ sobre cada triángulo, para ciertos coeficientes a^j, b^j, c^j a determinar), $\varphi_j = 0$ sobre $\partial\Omega$,

se busca $u(x, y) \approx \sum_{j=1}^{N} c_j \varphi_j(x, y)$ tal que

$$\int_\Omega \nabla u . \nabla \varphi_i \, dx\, dy = \int_\Omega f \varphi_i \, dxdy\,, \quad \forall i = 1, 2, \cdots N$$

$$\Rightarrow \text{Sistema :} \quad A\bar{c} = \bar{f}$$

donde A matriz simétrica y definida positiva, $A = \left(a_{i,j}\right)_{i,j=1}^{N}$, $\bar{f} = (f_1, f_2, \cdots f_N)^T$,

$$a_{i,j} = \int_\Omega \nabla\varphi_i . \nabla\varphi_j \, dx\, dy, \quad f_j = \int_\Omega f \varphi_j \, dx\, dy\,,$$

y $\bar{c} = (c_1, c_2, \cdots c_N)^T$, con c_j la aproximación de u en el nodo j.