ASIGNATURA DE MÁSTER:

MÉTODOS NUMÉRICOS AVANZADOS

Curso 2017/2018

(Código:21156030)

1.PRESENTACIÓN

Los métodos numéricos que se estudian en esta asignatura están orientados a la resolución de problemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden con condiciones de contorno, problemas de autovalores y problemas de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.

La modelización de muchos problemas físicos se realiza mediante una o varias ecuaciones diferenciales acompañadas de condiciones de contorno. Por otra parte muchas de las ecuaciones fundamentales de la física, como son la ecuación del calor, la ecuación de Schrödinger, la ecuaciones de Maxwell, etc. son ecuaciones en derivadas parciales. Sin embargo, no es posible, en general, encontrar una solución analítica exacta para estas ecuaciones, por lo que es necesario acudir a los métodos numéricos. Para ver en qué condiciones pueden utilizarse estos métodos y hasta qué punto son precisas las soluciones así obtenidas, hay que entender la base analítica de los mismos.

Por ello, el objetivo de la asignatura no es tanto la aplicación mecánica de algoritmos sino el estudio de los propios algoritmos y su adaptación a problemas concretos.

2.CONTEXTUALIZACIÓN

En el Grado en Física de esta Universidad hay una asignatura de Métodos Numéricos (Física Computacional II) que incluye los temas de resolución de ecuaciones no lineales, resolución de sistemas de ecuaciones lineales, análisis de datos, diferenciación e integración numéricas y resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (problemas de condiciones iniciales).

En este curso del Máster en Física de Sistemas Complejos se incluye el estudio de la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias (problemas de condiciones de contorno) y de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Este tipo de ecuaciones es muy abundante en Física.

3.REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Puesto que el objetivo de la asignatura es aproximar conjuntos de datos por funciones analíticas u obtener soluciones a problemas que tienen una difícil solución analítica, es necesario un conocimiento previo de tales problemas. Por lo tanto, es necesario conocer la teoría de funciones analíticas y su representación gráfica, nociones básicas de cálculo diferencial e integral, cálculo de máximos y mínimos, ideas básicas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Asimismo es necesario conocer las ideas básicas de la teoría de espacios vectoriales y aplicaciones lineales, matrices y determinantes.

Es usual que los estudiantes de máster hayan realizado en el grado un curso básico de métodos numéricos por lo que se supone que conocen los conceptos de diferenciación e integración numéricas y de resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (problemas de condiciones iniciales) al nivel más elemental (esquemas simples de diferencias finitas y métodos Runge-Kutta).

Es aconsejable que el alumno conozca alguno de los lenguajes de programación más usuales para que pueda poner en práctica los métodos estudiados.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

1. Conocer los distintos tipos de condiciones de contorno y su significado físico.
2. Conocer los principales métodos iterativos para la resolución de matrices y determinantes, así como el cálculo de valores y vectores propios.
3. Clasificar los diferentes tipos de ecuaciones en derivadas parciales.
4. Entender las propiedades de las curvas características y su significado físico.
5. Estudiar el cálculo con operadores en diferencias y generar esquemas en diferencias finitas.
6. Establecer las condiciones de consistencia, convergencia y estabilidad de los métodos en diferencias.
7. Conocer los esquemas en diferencias más simples y saber aplicarlos a la resolución de las ecuaciones en derivadas parciales más frecuentes en física.
8. Entender la relación entre la formulación en ecuaciones diferenciales y la formulación variacional.
9. Tener un conocimiento básico del método de los elementos finitos.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

Tema 1. Problemas de condición de contorno para ecuaciones diferenciales ordinarias.

1.1 El método del disparo lineal para problemas lineales
1.2 El método del disparo lineal para problemas no lineales
1.3 Métodos de diferencias finitas para problemas lineales
1.4 Métodos de diferencias finitas para problemas no lineales

Orientaciones sobre los contenidos del tema

La solución de ecuaciones diferenciales ordinarias en las que las condiciones del problema se especifican en un cierto valor inicial o extremo de la variable independiente se denominan *problemas de valor o valores iniciales*, dependiendo del orden de la ecuación. Sin embargo, existen ecuaciones diferenciales para las que no se establecen las condiciones en un determinado valor extremo, sino que se especifican en distintos valores de la variable independiente. Generalmente estos valores son considerados fronteras o puntos extremos de algún dominio de interés, por lo que la solución de este tipo de ecuaciones diferenciales se conocen como *problemas de condiciones de contorno*.

La mayor parte del capítulo trataremos con la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden con dos valores de contorno. En el caso de problemas unidimensionales estudiaremos el método del disparo, que es una adaptación de los procedimientos y métodos aplicados para un problema de valor inicial (por ejemplo los métodos Runge-Kutta).

Veremos también cómo aproximar las soluciones de los problemas de contorno de condición Dirichlet, de condición Newmann o condición mixta, con el método del disparo y con el de diferencias finitas.

Tema 2. Problemas de valores característicos.

2.1 Álgebra lineal y valores característicos
2.2 Método iterativo de la potencia
2.3 Método QR

Orientaciones sobre los contenidos del tema

Una clase especial de problemas de condiciones de contorno en una región unidimensional presenta soluciones únicamente para unos valores especiales de algún parámetro del problema, llamados *valores característicos*. Por eso estos problemas son conocidos como *problemas de valores característicos*..

Los valores y los vectores característicos asociados son cantidades esenciales relacionadas con las matrices y tienen aplicaciones en muchos campos. En este capítulo se estudian varios métodos para la aproximación de los valores y vectores característicos. Se presentarán dos técnicas distintas para obtenerlos: el método iterativo de potencias (útil para matrices pequeñas) y el método QR (de aplicación más general).

El método iterativo de potencias permite determinar el valor característico dominante de una matriz, es decir, el valor característico con mayor magnitud. Una ligera modificación del método permite determinar también otros valores característicos. Un aspecto útil del método de la potencia es que no sólo produce un valor característico, sino que genera el vector característico asociado.

El método de la potencia inversa es una modificación del método de la potencia que ofrece una convergencia más rápida. Se usa para determinar el valor característico de la matriz más cercano a un número específico.

Una vez calculada la aproximación del valor característico dominante de una matriz A, existen muchas técnicas para obtener aproximaciones a los otros valores característicos. En un método de deflación se forma una matriz nueva B cuyos valores característicos sean iguales a los de la matriz A, salvo que el valor característico dominante de A se reemplaza en B por el valor cero. Se aplica en la matriz reducida B' el método de la potencia para determinar su valor característico dominante.

Los métodos de deflación generalmente no son adecuados para calcular todos los valores característicos de una matriz, debido al crecimiento del error de redondeo. El algoritmo QR es una técnica de reducción matricial que permite determinar simultáneamente todos los valores característicos de una matriz simétrica.

Realizando una transformación de semejanza para la matriz A en B de la forma ($M\ A\ M^{(-1)} = B$) siendo M una matriz no singular. El método QR busca la matriz M tal que A se transforme en una matriz triangular superior semejante desde la cual pueden leerse los valores característicos de A a partir de la diagonal de B.

Tema 3. Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales elípticas

3.1.- Introducción. Tipos de ecuaciones en derivadas parciales
3.2.- La ecuación de Laplace. Método de las diferencias finitas.
3.3.- Métodos de relajación
3.4.- El método implícito de dirección alternada

Orientaciones sobre los contenidos del tema

En este tema y en el siguiente se tratan los métodos numéricos para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales basados en la aproximación por diferencias finitas. Un método alternativo es el método de elementos finitos que se tratará en el tema 5. Para utilizar el método de las diferencias finitas se discretiza el problema considerando un número finito de puntos en el dominio. En el caso más simple los puntos se reparten uniformemente en una malla. Las derivadas espaciales se sustituyen por cocientes de diferencias entre valores de la función en los nodos de la malla y así la ecuación diferencial se transforma en una ecuación algebraica.

Consideraremos ecuaciones en derivadas parciales lineales de segundo orden. El ejemplo más conocido de ecuación elíptica es la ecuación de Laplace y será estudiado en este tema. Los problemas que se plantean al estudiar esta ecuación son problemas de condiciones de contorno y la solución es un campo estático, como por ejemplo la distribución de temperatura en un dominio o el campo eléctrico descrito por la ecuación de

Laplace. Se estudiará en primer lugar el método explícito, que en la práctica no suele ser eficaz en problemas de más de una dimensión espacial por generar matrices de gran tamaño. Es más aconsejable la utilización de métodos de relajación, basados en introducir una dependencia artificial del tiempo y la construcción de un método iterativo. Una aproximación muy eficaz es el uso del método implícito de dirección alternada que permite manejar matrices muy grandes.

Tema 4. Ecuaciones diferenciales parciales parabólicas e hiperbólicas.

4.1.- La ecuación del calor
4.2.- Método de Crank-Nicolson
4.3.- Ecuaciones parabólicas en dos y tres dimensiones
4.4.- Solución del problema de la cuerda en vibración
4.5.- La ecuación de ondas en dos dimensiones
4.6.- Método de las características
4.7.- Convergencia y estabilidad

Orientaciones sobre los contenidos del tema

Los problemas de ecuaciones diferenciales parciales que se estudian en este tema son problemas de condiciones iniciales, en los que el tiempo es una variable independiente y las condiciones de contorno son conocidas.

En primer lugar se consideran las *ecuaciones parabólicas*. Se estudia la resolución de la ecuación del calor con un método explícito para el avance del tiempo. La aplicación del método de diferencias finitas para la resolución espacial de la ecuación del calor no es diferente a la resolución de la ecuación de Laplace en el apartado anterior. La estructura de las ecuaciones difiere en cuanto que la solución se obtiene para cada paso de tiempo, utilizando la solución obtenida para un instante anterior. En el apartado siguiente se estudia el método implícito de Cranck Nicolson.

La ecuación de ondas es la *ecuación hiperbólica* más conocida. El primer método que se estudia consiste en sustituir las derivadas con aproximaciones finitas al igual que en los casos anteriores. Las características son curvas en las variables espacial y temporal a lo largo de las cuales se propaga la solución y constituyen un concepto de gran importancia en las ecuaciones hiperbólicas. Se describe el método de las características. Por último se incluye un apartado considerando algunas condiciones que deben satisfacer las soluciones de las ecuaciones en diferencias finitas para ser aceptables como soluciones de las ecuaciones en diferencias parciales parabólicas e hiperbólicas.

Tema 5. El método de los elementos finitos.
Esquema

5.1.- Formulación variacional y formulación débil.
5.2.- El método de Rayleigh-Ritz
5.3.- Elementos finitos para ecuaciones elípticas
5.4.- Elementos finitos para ecuaciones parabólicas e hiperbólicas

Orientaciones sobre los contenidos del tema

Los métodos por diferencias finitas son difíciles de aplicar cuando el dominio de definición de las ecuaciones diferenciales tiene un contorno irregular. En esta situación es difícil ajustar un mallado regular al contorno y se hace necesario recurrir a complejas interpolaciones para satisfacer las condiciones de contorno del problema. En estos casos es particularmente útil el método de elementos finitos.

El primer paso consiste en expresar el problema en forma integral. Para algunas ecuaciones diferenciales es bien sabido que la función que satisface la ecuación diferencial es también la que minimiza un funcional. Una alternativa es hacer una formulación débil del problema, que exige la anulación de una integral sobre el dominio. Esto se basa en el hecho de que si la integral del producto $v(x,y)[Lu(x,y)-f(x,y)]$ (siendo L un operador diferencial) extendida a todo el dominio es nula cualquiera que sea la función $v(x,y)$, entonces necesariamente $Lu(x,y)=f(x,y)$ en el dominio. Además, una integración por partes permite introducir las condiciones de contorno en la integral de forma natural.

El problema así formulado puede resolverse por el método de Rayleigh-Ritz. Este consiste en restringir el espacio de funciones $u(x,y)$ a un subespacio de funciones más reducido. Este subespacio debe contener funciones derivables hasta un orden similar al de la ecuación diferencial.

A continuación se construye una red de elementos finitos, compuesta de nodos y subdominios. Dentro de cada elemento, la solución es una combinación lineal de funciones base, cuyos coeficientes dependen de los valores de la solución en cada nodo. En el caso bidimensional, los elementos suelen ser triángulos o cuadriláteros. Con elementos triangulares se utilizan como funciones base polinomios lineales en x e y; con cuadriláteros se utilizan polinomios cuadráticos en xy. Las funciones interpolantes en dos elementos contiguos deben empalmarse en su frontera común.
Finalmente se llega a un sistema de ecuaciones algebraicas cuyas incógnitas son los valores de la solución en los nodos y cuyos coeficientes son integrales de las funciones de base sobre el dominio de integración, que a su vez son sumas de integrales sobre cada elemento finito.

El orden de aproximación de la solución depende del tamaño de los elementos y del grado de las funciones de base. Una elección adecuada de la red de elementos reduce el error y también simplifica la forma del sistema algebraico final. Asimismo, se puede mejorar el orden del error utilizando funciones de base de un grado mayor, lo que requiere tomar nodos extra en cada elemento finito.

6.EQUIPO DOCENTE

- JAIME ARTURO DE LA TORRE RODRIGUEZ
- ADOLFO VAZQUEZ QUESADA

7.METODOLOGÍA

El curso se impartirá a través de una plataforma educativa virtual. Dentro del curso virtual se distribuirá material complementario a los alumnos matriculados y se propondrán trabajos para realizar en casa.

Dentro del curso virtual el alumno dispondrá de:

Página de bienvenida, donde se indica el concepto general de la asignatura y se presenta el equipo docente.

Calendario, donde se establece el orden temporal de actividades.

Materiales
a) Guía del curso, donde se establecen los objetivos concretos y los puntos de interes.
b) Programa, donde se especifica la división del contenido por capítulos.
c) Procedimiento, donde se sugieren al alumno las tareas que debe realizar.
d) Recursos, donde se proporciona el material necesario para el estudio.
e) Enlaces a páginas relacionadas con los contenidos de la asignatura
f) Software gratuito.

Herramientas de comunicación
a) Correo, para la consulta personal de dudas de tipo general.
b) Foros de debate, donde se intercambian conocimientos y se resuelven dudas de tipo académico y práctico.
c) Plataforma de entrega de los trabajos obligatorios, exámenes y problemas, y herramientas de calificación.

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9780198596509
Título: NUMERICAL SOLUTION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS : FINITE DIFFERENCE METHODS (3rd ed.)
Autor/es: Smith, David G. ;
Editorial: CLARENDON PRESS

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788497322805
Título: MÉTODOS NUMÉRICOS (2004)
Autor/es: Faires, J. Douglas ; Burden, Richard L. ;
Editorial: Thompson

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9789684443938
Título: ANÁLISIS NUMÉRICO CON APLICACIONES (6ª)
Autor/es: Gerald, Curtis F. ; Wheatley, Patrick O. ;
Editorial: PEARSON ADDISON-WESLEY

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9789687529462
Título: ANALISIS NUMÉRICO (6ª ed.)
Autor/es: Burden R.L. ; Faires J.L ;
Editorial: INTERNATIONAL THOMSON

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

Comentarios y anexos:

Comentarios y anexos:

Los principales libros de estudio son:

Smith, G. D., *Numerical solution of partial differential equations: Finite difference methods*, (3ª edición) Ed. Oxfor d, Clarendon Press, 1992.

J. Douglas Faires y Richard Burden: *Métodos Numéricos* (3ª edición), Thomson Editores, España, 2004. (Alternativamente puede utilizarse el texto *Análisis Numérico*, de los mismos autores, editado por Thomson Internacional en México. Las diferencias con el anterior son mínimas).

Curtis F. Gerald y Patrick O. Wheatley: *Análisis Numérico con Aplicaciones* (Sexta edición), Prentice Hall, Pearson Education, México, 2000

9.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

ISBN(13): 9780471276418
Título: THE FINITE DIFFERENCE METHOD IN PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS
Autor/es: Griffiths, D. F. ; Mitchell, Andrew Ronald ;
Editorial: JOHN WILEY AND SONS

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

10.RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

La UNED posee la licencia del programa ScientificNotebook, un procesador de textos científicos que incluye una versión reducida del programa Maple de cálculo simbólico.

También la UNED oferta a los alumnos una versión gratuita de Maple. Maple es un programa matemático de propósito general capaz de realizar cálculos simbólicos, algebraicos y de álgebra computacional.

Por otra parte, existen algunos lenguajes de programación de acceso libre (gwbasic, maxima, octave,...) que también son útiles para la resolución de problemas de cálculo numérico.

Finalmente, el programa Easy Java Simulations, también de libre acceso, ofrece posibilidades de representación gráfica de funciones y de integración numérica.

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

Como ya se ha indicado en el apartado Metodología, el Curso Virtual es el instrumento fundamental para la tutorización y seguimiento del aprendizaje. No obstante, el estudiante también tendrá acceso a realizar consultas al equipo docente a través del correo, teléfono y presencialmente en los horarios establecidos para estas actividades. Los datos personales del equipo docente son:

Dr. D. Jaime Arturo de la Torre
e-mail: jatorre@fisfun.uned.es
Tel.: 91 3987136
Despacho: 226 de la Facultad de Ciencias de la UNED
Guardia: los martes, de 12:00 a 14:00 y de 16:00 a 18:00

Dra. Dña Mar Serrano Maestro
e-mail: mserrano@fisfun.uned.es

Tel.: 91 3987126
Despacho: 208 de la Facultad de Ciencias de la UNED
Guardia: los miércoles, de 12:00 a 14:00h y de 15:00 a 17:00h

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

La evaluación de la asignatura consistirá en la realización de trabajos, espaciados en un periodo aproximado de un mes, a realizar por los estudiantes hasta final del cuatrimestre.

Por cada uno de los cinco bloques básicos que constituyen el contenido de la asignatura se propondrán uno o varios trabajos para que el alumno realice en casa y entregue a través de la plataforma del curso virtual. Se requerirá una calificación mínima en cada trabajo. Si todos los trabajos superan esta calificación mínima, la calificación final será la media de las calificaciones de los cinco bloques. Los temas de los trabajos y los plazos de entrega se anunciarán en el Curso Virtual.

Los estudiantes que por alguna circunstancia sobrevenida no puedan seguir el calendario podrán entrar en la convocatoria de septiembre. Estos estudiantes deberán entregar una parte de los trabajos antes del 1 de mayo y el resto antes del 1 de septiembre. El número concreto de trabajos a entregar en cada fecha y los plazos exactos de entrega se anunciarán en el Curso Virtual.

Se valorará también en la evaluación de los trabajos la participación de los alumnos en los Foros del Curso Virtual.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.