Tercera práctica voluntaria Métodos Matemáticos y Técn. Comp.
Francisco R. Villatoro y Carmen M. García 18 de Diciembre de 2000
A entregar el lunes 15 de Enero de 2001

Métodos en Elementos Finitos para Ecuaciones de Reacción-Difusión (Parabólicas).

Considere el problema parabólico de reacción-difusión siguiente

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(a(x)\,\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right) + b(x)\,u(x,t) = f(x), \qquad t > 0, \quad x \in (0,1),$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in (0,1), \qquad u(0,t) = \frac{\partial u}{\partial x}(1,t) = 1, \quad t > 0,$$

donde $a(x) = 1 + x$, $b(x) = x^2$, $f(x) = x^3$ y $u_0(x) = x^2 - x + 1$.

Vamos a resolver este problema mediante un método de elementos finitos en el espacio de polinomios a trozos lineales continuos en una malla espacial general, generada de forma aleatoria.

1. Para escribir la formulación variacional continua del problema de reacción difusión arriba indicado hemos de definir los espacios de búsqueda y prueba. Tomaremos como espacio de prueba, donde $\Omega \equiv [0,1]$, $\mathcal{T} \equiv [0,T]$ y $(x,t) \in \Omega \times \mathcal{T}$,

$$V_P\{\Omega\times\mathcal{T}\} = \left\{ v : v(0,t) = 0, v \in L^2(\Omega) \times \mathrm{C}^1(\mathcal{T}), \frac{\partial v}{\partial x} \in L^2(\Omega) \times \mathrm{C}^0(\mathcal{T}) \right\},$$

que es un espacio de Hilbert en espacio y un espacio de funciones diferenciables continuamente en tiempo. Como espacio de búsqueda tomaremos

$$\begin{aligned} V_B\{\Omega \times \mathcal{T}\} &= \left\{ v : v(0,t) = 1, v \in L^2(\Omega) \times \mathrm{C}^1(\mathcal{T}), \frac{\partial v}{\partial x} \in L^2(\Omega) \times \mathrm{C}^0(\mathcal{T}) \right\} \\ &= \{ v : v(0,t) = 1 + u(x,t), u(x,t) \in V_P\{\Omega \times (0,T)\} \}, \end{aligned}$$

que como vemos no es un espacio vectorial en espacio, y por tanto tampoco es Hilbert, pero que difiere de un Hilbert sólo en una función constante, que si Ω es compacto, y lo es, es una función que pertenece a $L^2(\Omega)$. Escriba la formulación variacional continua de nuestro problema utilizando los espacios anteriores. ¿Cómo trata las condiciones de contorno?

2. Considere una malla espacial $0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_M = 1$ general, con función malla $h(x) = x_j - x_{j-1}$, para $x \in (x_{j-1}, x_j)$. Generaremos estos nodos aleatoriamente en Matlab de la forma

   ```
   M=10;  x = [0; sort(rand(M-2,1)); 1];
   global x;
   function res=malla(x0);
   % funcion malla h(x0)
   % calcula el valor de la función malla h(x0)
   global x;
   hx = diff(x); hx=[hx(1);hx];
   if (x0<0)|(x0>1), res = 0,
   else res = interp1(x,hx,x0,'nearest');
   end
   ```

   Explica el funcionamiento de la función malla anterior.

3. Defina el espacio de polinomios a trozos lineales continuos en la malla anterior y escriba una base de dicho espacio.

4. Defina el espacio $V_h(0,T)$ de funciones a trozos lineales continuas cuyas coeficientes $c_j(t)$ son funciones del tiempo con derivada continua.

5. Escriba la formulación variacional discreta (en realidad, semi-discreta) que se obtiene utilizando como base el espacio anterior. ¿Cómo trata las condiciones de contorno? ¿Qué espacio continuo de búsqueda ha tomado? y, ¿qué espacio continuo de prueba? Justifique sus respuestas. Escriba también, y de forma separada, la formulación variacional discreta utilizando bases en sustitución de los espacios de búsqueda y prueba.

6. Habrá obtenido un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma

$$M\,\frac{dc(t)}{dt} + A\,c(t) = b.$$

¿Cuáles son las matrices M, A y el vector b? Escriba varios funciones de Matlab que permitan calcular dichas matrices a partir de los valores de la malla. Deberá calcular las integrales involucradas en estas matrices a mano y luego introducir el resultado exacto en las funciones de Matlab. NOTA: las funciones para las matrices tendrán la forma que aparece para la matriz M a continuación.

```
function matrizM = calcmatrizM(x);
% en el fichero "calcmatrizM.m"
```

7. Escriba un método de Crank-Nicolson (o regla del trapecio o regla implícita del punto medio) para la integración del sistema de ecuaciones diferenciales que ha obtenido en el problema anterior. ¿Cómo estudiarías la estabilidad de este método numérico? Hazlo.

8. Obtenga las soluciones numéricas del problema anterior para varios Δt y varios M (con mallas generadas de forma aleatoria). Presente alguna gráfica de los resultados y comente cómo son las soluciones que ha obtenido.

9. Considere la malla espacial definida anteriormente y defina el espacio de polinomios a trozos cuadráticos continuos en dicha malla y escriba una base de dicho espacio. ¿Cuántos elementos tiene dicha base? Dibuje dos funciones base distintas. Defina también el espacio $V_h(0,T)$ de funciones a trozos cuadráticos continuas cuyas coeficientes $c_j(t)$ son funciones del tiempo con derivada continua.

10. Escriba la formulación variacional discreta (en realidad, semi-discreta) que se obtiene utilizando como base el espacio anterior. ¿Cómo trata las condiciones de contorno? ¿Qué espacio continuo de búsqueda a tomado? y, ¿qué espacio continuo de prueba? Justifique sus respuestas. Escriba también, y de forma separada, la formulación variacional discreta utilizando bases en sustitución de los espacios de búsqueda y prueba.

11. Habrá obtenido un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma

$$M\,\frac{dc(t)}{dt} + A\,c(t) = b.$$

¿Cuáles son las matrices M, A y el vector b? Escriba varias funciones de Matlab que permitan calcular dichas matrices a partir de los valores de la malla. Para la integración de las integrales utilice como algoritmo numérico `quad` de Matlab.

12. Adapte el método de Crank-Nicolson que ha desarrollado previamente para la resolución del nuevo sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que ha obtenido ahora.

13. Obtenga las soluciones numéricas del problema anterior para varios Δt y varios M (con mallas generadas de forma aleatoria). Presente alguna gráfica de los resultados y comente cómo son las soluciones que ha obtenido.

14. Compare entre sí los resultados de los métodos numéricos que ha desarrollado. Compare los métodos en cuanto a precisión para un número coste computacional fijo, en cuanto a costo para obtener un error determinado, en cuanto a complejidad de implementación y en cuanto velocidad de generación de las matrices. ¿Cuál es el más adecuado teniendo en cuenta todos los factores anteriores?