Francisco R. Villatoro y Carmen M. García 9 de Enero de 2002

Métodos de Elementos Finitos para Ecuaciones de Difusión (Parabólicas).

Cuestión 1. El límite cuando el tiempo tiende a infinito de una ecuación parabólica es una ecuación elíptica, es decir, el estado estacionario de una ecuación parabólica está modelado por una ecuación elíptica. Por ello, todos los métodos numéricos para ecuaciones parabólicas también son aplicables a ecuaciones elípticas, aunque, como hay que esperar que se alcance el estado estacionario, muchas veces no son los métodos más eficientes para este tipo de problemas.

El resultado matemático más importante sobre ecuaciones elípticas es el principio del máximo, que dice que, para el problema homogéneo, todos los extremos se encuentran en el contorno del dominio. Su razón de ser está en que los operadores elípticos son operadores de promediado. Aplicado a la ecuación de Laplace para un campo eléctrico, $\Delta u = \nabla^2 u = 0$, en un dominio sin cargas, los máximos y mínimos del potencial están en el contorno.

Considere dos cargas eléctricas positivas mantenidas inmóviles en dos puntos en un plano. El potencial eléctrico a lo largo de la recta que pasa por estas dos cargas es mínimo en el centro del segmento que une dichas cargas (de hecho es infinito en los puntos en los que se encuentran las cargas). Dibuje dicho potencial a lo largo de este segmento. ¿Es falsa la ecuación de Laplace para el potencial eléctrico en este caso?

Cuestión 2. Considere la ecuación parabólica

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = \gamma\, u, \qquad x \in \Omega \quad t > 0,$$

que para $\gamma > 0$ modela el problema de la ignición de una bomba atómica, donde u es la densidad de neutrones en el material fisionable cuya forma inicial es Ω, y $\gamma\, u$ representa el incremento en el número de neutrones debido a fisión espontánea (γ tiene dimensiones de frecuencia o inverso de tiempo y se denomina actividad). Si el material fisionable se rodea de un material que absorba neutrones (como plomo) podemos utilizar condiciones de contorno de Dirichlet homogéneas en $\partial\Omega$.

La inestabilidad (mal condicionamiento) de este problema, físicamente obvio dado que modela la explosión de una bomba, se puede ilustrar fácilmente utilizando un método energético para el análisis de la estabilidad. Multiplicando la ecuación por u e integrando por partes obtenemos

$$\frac{d}{dt}\left(\int_\Omega \frac{u^2}{2}\,dx\right) = \int_\Omega \left(\gamma\,\frac{u^2}{2} - |\nabla u|^2\right)\,dx.$$

Para $\gamma \leq 0$, la solución trivial $u \equiv 0$ es única (el alumno debe demostrarlo) y, en general, para $u(x,0)$ pequeña, $u^2/2$ será cada vez más pequeña conforme el tiempo crece. Sin embargo, si $\gamma > 0$, este argumento falla, y puede que la solución no esté acotada (explote) si $u(x,0)$ no es precisamente cero.

Lo más fácil es estudiarlo en una dimensión, $-l \leq x \leq l$. Aplicando separación de variables

$$u(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} T_n(t)\,X_n(x),$$

obtenemos fácilmente (el alumno debe comprobarlo)

$$X_n(x) = \cos(\mu_n x), \qquad \mu_n = \frac{(2n+1)\,\pi}{2\,l}, \qquad n >= 0,$$

$$T_n(t) = C_n\,\exp(-\sigma_n t), \qquad \sigma_n = \mu_n^2 - \gamma,$$

lo que indica que T_n decae sólo cuando σ_n es positiva, en otras palabras, $u(x,t)$ explotará si cualquiera de las σ_n es positiva, la menor es σ_0, por lo que la condición de "masa crítica"es

$$\gamma\,l^2 \geq \left(\frac{\pi}{2}\right)^2.$$

Dado un material, γ es fijo, por lo que una barra suficientemente corta es estable. Para fabricar un bomba necesitamos una barra más grande, pero como no queremos que nos explote mientras la manipulamos, se separan dos barras subcríticas, pero cuya longitud total sea supercrítica, por un material que está conectado a una bomba convencional. Cuando queremos provocar la ignición de la bomba nuclear, hacemos explotar el material que separa las dos barras, que al juntarse alcanzan el valor crítico. ¿Cuál es la condición de "masa crítica"para un cubo de material fisionable de lado l? (el alumno debe calcularlo).

Cuestión 3. Considere el problema parabólico

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = \gamma\,u, \qquad x \in \Omega \equiv [0,l]^2 \subset \mathbb{R}^2, \quad t > 0,$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \Omega, \qquad u(x,t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t > 0,$$

donde $u_0(x) = \exp(-|x|^2)$ y $\gamma > 0$.

Vamos a resolver este problema mediante un método de elementos finitos en el espacio de polinomios a trozos lineales continuos.

3.1. Escribe la formulación variacional continua del problema anteriormente formulado. Como espacio base para la formulación puedes utilizar

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

¿Cuáles son los espacios de búsqueda y de prueba?

3.2. Describe una malla del dominio Ω que tenga N^2 triángulos todos iguales entre sí (en área). Define el espacio de los polinomios a trozos lineales continuos sobre dicha malla. Dibuja una función base del interior, una que esté en una de las esquinas del dominio y otra que esté en uno de sus lados. ¿Qué simetrías puedes aprovechar a la hora de escribir la formula matemática de las funciones base? Detalla dicha expresión matemática para una función base del interior, una que esté en una de las esquinas del dominio y otra que esté en uno de sus lados.

3.3. Escribe la formulación variacional discreta (en el espacio del problema anterior) y la formulación variacional discreta con bases del problema descrito en esta cuestión. Calcula los valores de los elementos de las matrices del sistema lineal que resulta de dicha formulación.

3.4. Implementa un programa de ordenador en Matlab con el método numérico de elementos finitos que acabas de desarrollar. Como has desarrollado un método de líneas (semi-discretización), ¿cómo resuelves numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales que has obtenido? Desarrolla una implementación que use la función de Matlab `ode23s` y otra que utilice el método de la regla del trapecio (método à la Crank-Nicolson). ¿Cómo estudiarías la estabilidad de los dos métodos numéricos que has desarrollado? Estudia la estabilidad, por el método de von Neumann, de los métodos que has desarrollado. Ayuda: tienes que estudiar, por un lado, la estabilidad de un sistema de ecuaciones diferenciales y, por otro, la de un método en diferencias finitas.

3.5. Calcula la solución analítica exacta de este problema. ¿Cómo evaluarías numéricamente dicha solución? Ayuda: tienes que sumar una serie de convergencia lenta, por lo que deberías usar una técnica de aceleración (por ejemplo la δ^2 de Aitken). ¿En qué puntos del dominio la convergencia es más lenta? Para $\gamma = 1$ compara la solución analítica con la numérica en $t = 0{,}1$ y en $t = 1$. ¿Cómo se comportan los errores? Prueba con varios pasos de tiempo (Δt). ¿Converge el método? ¿Es estable el método numérico? Razona tus respuestas.

3.6. ¿Cómo calcularías numéricamente/experimentalmente la masa crítica? Calcula la masa crítica para los valores de $\gamma = 1$, 2, 5 y 10. ¿Cómo cambia la masa crítica conforme γ crece? ¿Cómo cambia la masa crítica conforme l crece?

Cuestión 4. Considere el problema parabólico en coordenadas polares

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = \gamma\, u, \qquad (r,\theta) \in \Omega \equiv [0,l] \times [0,2\pi) \subset \mathbb{R}^2, \quad t > 0,$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad x \in \Omega, \qquad u(x,t) = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad t > 0,$$

donde $u_0(x) = \exp(-|x|^2)$ y $\gamma > 0$.

Vamos a resolver este problema mediante un método de elementos finitos en el espacio de polinomios a trozos lineales continuos.

4.1. Escribe la formulación variacional continua del problema anteriormente formulado. ¿Cuáles son los espacios de búsqueda y de prueba? ¿Cómo tratas la ecuación para $r = 0$?

4.2. Describe una malla del dominio Ω que tenga N^2 triángulos. Ayuda: lo más fácil es considerar un hexágono que contiene 6 triángulos iguales y "teselar"todo el dominio con estos hexágonos. En tu malla, ¿son todos los triángulos iguales entre sí? ¿En qué zona son más pequeños? Define el espacio de los polinomios a trozos lineales continuos sobre dicha malla. Dibuja una función base del interior y otra que se encuentre en el centro del dominio. ¿Qué simetrías puedes aprovechar a la hora de escribir la formula matemática de las funciones base? Detalla dicha expresión matemática para una función base del interior y otra que se encuentre en el centro del dominio.

4.3. Escribe la formulación variacional discreta (en el espacio del problema anterior) y la formulación variacional discreta con bases del problema descrito en esta cuestión. Calcula los valores de los elementos de las matrices del sistema lineal que resulta de dicha formulación.

4.4. Implementa un programa de ordenador en Matlab con el método numérico de elementos finitos que acabas de desarrollar. Como has desarrollado un método de líneas (semi-discretización), ¿cómo resuelves numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales que has obtenido? Desarrolla una implementación que use la función de Matlab `ode23s` y otra que utilice el método de la regla del trapecio (método à la Crank-Nicolson). ¿Cómo estudiarías la estabilidad de los dos métodos numéricos que has desarrollado? Estudia la estabilidad, por el método de von Neumann, de los métodos que has desarrollado. Ayuda: tienes que estudiar, por un lado, la estabilidad de un sistema de ecuaciones diferenciales y, por otro, la de un método en diferencias finitas.

4.5. Calcula la solución analítica exacta de este problema. ¿Cómo evaluarías numéricamente dicha solución? Ayuda: tienes que sumar una serie de convergencia lenta, por lo que deberías usar una técnica de aceleración (por ejemplo la δ^2 de Aitken). ¿En qué puntos del dominio la convergencia es más lenta? Para $\gamma = 1$ compara la solución analítica con la numérica en $t = 0{,}1$ y en $t = 1$. ¿Cómo se comportan los errores? ¿Converge el método? ¿Es estable el método numérico? Razona tus respuestas.

4.6. ¿Cómo calcularías numéricamente/experimentalmente la masa crítica? Calcula la masa crítica para los valores de $\gamma = 1$, 2, 5 y 10. ¿Cómo cambia la masa crítica conforme γ crece? ¿Cómo cambia la masa crítica conforme l crece? Compara la masa crítica que has obtenido con la de la cuestión 3, ¿qué características observas? Infieres alguna ley general al respecto.