

Progetto nr. 1

Calcolo Scientifico, A.A. 2020-21

Alyssa Pezzutti, Nicole Santero

April 18, 2021

1 Esercizio 1

1.1

In questa prima parte della relazione ci proponiamo di risolvere il problema ai limiti

$$\begin{cases} u''(x) = \sqrt{1 + u'(x)^2} \\ u(-1) = u(1) = 1; \end{cases} \quad (1)$$

Come consigliato, abbiamo usato la funzione Matlab `bvp4c` per calcolare la soluzione "esatta". Abbiamo impostato le tolleranze assoluta e relativa con il comando `bvpset`, seguendo i valori di default usati da Matlab, ovvero `RelTol = 1e-3`, `AbsTol = 1e-6`.

Per quanto riguarda il guess iniziale abbiamo usato la funzione $f(x) = x^2$ che soddisfa le condizioni al bordo.

Poiché la componente `sol.x` della soluzione ottenuta non corrisponde ai nodi della griglia `xmesh = linspace(-1,1,n+2)` da noi data in input (in quanto Matlab usa un metodo di collocazione con nodi non equispaziati) abbiamo usato la funzione `deval` per ottenere i valori della soluzione esatta corrispondenti alla nostra mesh.

1.2

Consideriamo $n + 2$ nodi totali di cui n interni.

Discretizziamo con le differenze finite:

$$\begin{aligned} u'' &\approx \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} \\ u' &\approx \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} \end{aligned}$$

e $\forall j = 1, \dots, n$ otteniamo il sistema:

$$\begin{cases} \frac{u_2 - 2u_1 + u_0}{h^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{u_2 - u_0}{2h}\right)^2} = 0 \\ \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}\right)^2} = 0 \\ \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h}\right)^2} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Tenendo conto del fatto che $u_0 = u_L$ operiamo il cambio di variabile

$$\underline{u} = \underline{z} + u_0, \quad \underline{z} = \underline{u} + u_0$$

dove con questa notazione introduciamo la nuova variabile \underline{z} , vettore $n \times 1$ con componenti $z_j = u_j + u_0 \quad \forall j = 1, \dots, n$.

Tutte le equazioni tranne la prima e l'ultima restano invariate, in quanto sostituendo u_k con $z_k + u_0 (= 1)$ i termini noti si elidono sia per u'' che per u' . Invece la prima e l'ultima equazione diventano rispettivamente:

$$\frac{z_2 - 2z_1}{h^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{z_2}{2h}\right)^2} = 0 \quad (3)$$

e

$$\frac{-2z_n + z_{n-1}}{h^2} - \sqrt{1 + \left(\frac{z_{n-1}}{2h}\right)^2} = 0 \quad (4)$$

In questo modo quando scriviamo il sistema $n \times n$ in forma matriciale riusciamo a scrivere l'approssimazione di u' come Bu anche per la prima e l'ultima equazione, con matrici A e B simmetriche di dimensione $n \times n$, e non ci sono termini noti. Infatti, otteniamo

$$A\underline{z} - \sqrt{1 + (B\underline{z})^2} = 0$$

con

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad B = \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 0 & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Si tratta quindi di un sistema nonlineare di n equazioni nelle n incognite u_1, \dots, u_n .

Chiamiamo f la funzione a valori vettoriali $f(\underline{z}) = A\underline{z} - \sqrt{1 + (B\underline{z})^2}$.

Sia Jf lo Jacobiano di f (di dim. $n \times n$), dove per ciascuna riga le uniche entrate non nulle sono:

$$\frac{\partial f_j}{\partial z_{j-1}} = \frac{1}{h^2} + \frac{h}{2} \frac{\frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{2h}}{\sqrt{1 + (\frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{2h})^2}}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial z_j} = -\frac{2}{h^2}$$

$$\frac{\partial f_j}{\partial z_{j+1}} = \frac{1}{h^2} - \frac{h}{2} \frac{\frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{2h}}{\sqrt{1 + (\frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{2h})^2}}$$

Osserviamo che in Jf i coefficienti dei primi addendi sono gli stessi della matrice A , mentre nei secondi termini compare l'approssimazione di u' . Perciò possiamo riscrivere Jf come $A + DB$, dove $D = (d_{ij})$ è una matrice diagonale $n \times n$, i cui gli unici elementi non nulli sono

$$d_{jj} = \frac{h}{2} \frac{(Bz)_j}{\sqrt{1 + ((Bz)_j)^2}}$$

Linearizziamo il sistema $f(\underline{z}) = 0$ con il metodo di Newton

$$z_{k+1} = z_k - (Jf)^{-1} f$$

ovvero

$$(Jf)(z_{k+1} - z_k) = -f$$

che possiamo risolvere in Matlab con il comando `Jf\ -f`. Sia $\mathbf{diff} = z_{k+1} - z_k$. A ciascuna iterazione il vettore soluzione è dato da $z_{k+1} = \mathbf{diff} + z_k$. Si esce dal ciclo quando $(z_{k+1} - z_k) < \mathbf{tol1}$. Applicando il cambio di variabile inverso $u = z + u_0$ e orlando il vettore u con le condizioni al bordo otteniamo la soluzione approssimata del problema.

1.3

Abbiamo calcolato la soluzione su 20, 40, 80, 160 nodi, cioè per $h = \frac{2}{n+1}$ al variare di n . Fissata la tolleranza del metodo di Newton pari a 10^{-4} , e facendo variare n , l'errore totale dato da $|u - \mathbf{sol.y}(1, :)|$ vale al massimo $3.3627 \cdot 10^{-4}$.

Anche con soli 20 nodi abbiamo quindi un'ottima approssimazione della soluzione esatta, come si evince anche da questa immagine:

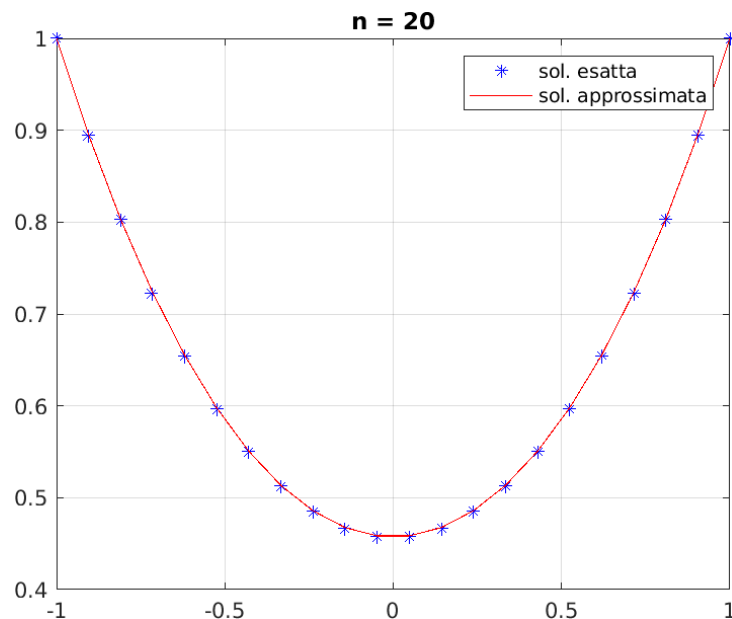


Figure 1: soluzione esatta e approssimata per $n = 20$

Sia $nn = [20 \ 40 \ 80 \ 160]$, ed $err(i)$ l'errore totale su $nn(i)$ nodi. Si ha che il metodo converge con ordine 2: in generale l'ordine di convergenza p è dato da

$$p = \frac{\log(\frac{err(i)}{err(i+1)})}{\log(\frac{nn(i+1)}{nn(i)})}$$

e, nell'ordine, per $i = 1, 2, 3$, otteniamo $p = [2.0057 \ 1.8535 \ 1.9639]$.
L'andamento dell'errore è visibile nel seguente grafico:

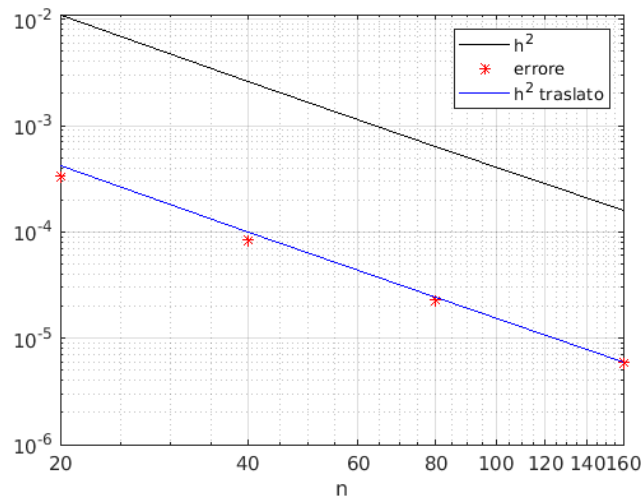


Figure 2: andamento dell'errore totale

L'errore totale ha lo stesso andamento di h^2 , a meno di una costante, infatti è possibile sovrapporlo quasi esattamente alla retta h^2 con una traslazione (il tutto in spazio logaritmico).

Poiché entrambi i metodi usati per il calcolo della soluzione esatta (Differenze finite, Newton) hanno ordine di convergenza $O(h^2)$ i risultati ottenuti sono ragionevoli.

2 Esercizio 2

2.1

In questa seconda parte ci occupiamo della risoluzione del problema di diffusione - trasporto - reazione

$$-D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + u \frac{\partial c}{\partial x} + Kc = M \quad (*)$$

sull'intervallo $(-L, L)$, dove $c = c(x)$ rappresenta la concentrazione di un inquinante, misurata in $\frac{kg}{m^3}$. Imponendo che tutti gli addendi abbiamo le stesse dimensione, si ottiene:

$$[D] = \frac{m^2}{s}, \quad [u] = \frac{m}{s}, \quad [K] = \frac{1}{s}, \quad [M] = \frac{kg}{m^3 s} \quad (5)$$

È possibile calcolare la soluzione esatta di $(*)$ cercando soluzioni della forma $e^{\lambda x}$. Sostituendo nell'equazione omogenea si ottiene

$$\begin{aligned} -D\lambda^2 e^{\lambda x} + u\lambda e^{\lambda x} + K e^{\lambda x} &= 0 \\ e^{\lambda x}(-D\lambda^2 + u\lambda + K) &= 0 \end{aligned}$$

le cui soluzioni sono

$$\lambda_+ = \frac{u + \sqrt{u^2 + 4DK}}{2D}, \quad \lambda_- = \frac{u - \sqrt{u^2 + 4DK}}{2D}$$

e dunque

$$c_1(x) = e^{\lambda_+ x}, \quad c_2(x) = e^{\lambda_- x} \quad (6)$$

risolvono $(*)$.

Al variare dei parametri, nel punto $x = 0$ le due soluzioni si raccordano in modo continuo ma non derivabile. Dunque è necessario definire la soluzione c a tratti, come unione di $c_1(x) = e^{\lambda_+ x}$ su $(-L, 0)$ e $c_2(x) = e^{\lambda_- x}$ su $(0, L)$.

Poiché per $D \rightarrow 0$, $x \rightarrow 0_-$ $c_1(x)$ cresce molto rapidamente, ci aspettiamo di trovare uno strato limite durante la risoluzione numerica. Discretizziamo quindi l'equazione con delle differenze finite upwind anzichè centrate, e otteniamo:

$$-D \frac{z_{j+1} - 2z_j + z_{j-1}}{h^2} + u \frac{z_j - z_{j-1}}{2h} + Kz_j = M \quad (7)$$

Ricordando

$$\frac{z_j - z_{j-1}}{2h} = \frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{2h} - \frac{h}{2} \frac{z_{j+1} - 2z_j + z_{j-1}}{h^2} \quad (8)$$

Sostituiamo e raccogliamo:

$$-(D + \frac{uh}{2}) \frac{z_{j+1} - 2z_j + z_{j-1}}{h^2} + u \frac{z_{j+1} - z_{j-1}}{2h} + Kz_j = M \quad (9)$$

Quest'ultima equazione rappresenta la discretizzazione alle DF centrate del problema

$$-D_h \frac{\partial c^2}{\partial x^2} + u \frac{\partial c}{\partial x} + Kc = M \quad (10)$$

con $D_h := D + \frac{uh}{2}$.

Scriviamo il dominio come $(-L, 0) \cup (0, L)$, e risolviamo l'equazione sui due intervalli separatamente. Poiche' immettiamo l'inquinante solo nel punto $x = 0$, tutte le equazioni avranno termine noto nullo. Di fatto trattiamo il termine M come

$$M = M(x) = \begin{cases} 1 & x = 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (11)$$

Su entrambi gli intervalli le equazioni hanno la stessa forma. Riordinando la (2) si ha:

$$\left(-\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right)z_{j+1} + \left(\frac{2D_h}{h^2} + K\right)z_j - \left(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right)z_{j-1} = 0 \quad (12)$$

Definiamo la matrice

$$A = \begin{bmatrix} \frac{2D_h}{h^2} + K & -\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h} & 0 & \dots & 0 \\ -\left(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right) & \frac{2D_h}{h^2} + K & -\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h} & & \\ : & \ddots & \ddots & \ddots & \\ : & \ddots & \ddots & \ddots & \\ : & & & & -\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h} \\ 0 & \dots & 0 & -\left(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right) & \frac{2D_h}{h^2} + K \end{bmatrix}$$

Il vettore dei termini noti vale

$$\underline{v}_1^T = \left[\left(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right)z_0, 0, \dots, 0, \left(-\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right)z_{n+1}\right]$$

ma su $(-L, 0)$ le condizioni al bordo valgono

$$z_0 = 0, \quad z_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{u^2 + 4DK}}$$

mentre su $(0, L)$

$$z_0 = \frac{1}{\sqrt{u^2 + 4DK}}, \quad z_{n+1} = 0$$

Così su ciascun intervallo risolvere l'equazione è equivalente a trovare un vettore \underline{z} tale che

$$A\underline{z} = 0$$

In Matlab quindi, risolviamo separatamente le equazioni per $c_1(x)$ e $c_2(x)$. Per $c_1(x)$ ci poniamo sul dominio $(-L, 0)$, mentre per $c_2(x)$ su $(0, L)$. Procediamo in questo modo perché come detto, la discretizzazione di $c_1(x)$ può presentare uno strato limite al variare dei parametri e dobbiamo gestire questo caso a parte.

Siano z_1 e z_2 le approssimazioni di $c_1(x)$ e $c_2(x)$. In entrambi i casi la discretizzazione e la matrice sono le stesse, ma cambiano le condizioni al bordo. Risolviamo numericamente le equazioni sui domini $(-L, 0), (0, L)$ con $L = 100, K = 1, M = 1$ e u, D variabili.

Moltiplichiamo la (11) per $\frac{h^2}{D_h}$:

$$\left(-1 + \frac{uh}{2D_h}\right)z_{j+1} + \left(2 + K\frac{h^2}{D_h}\right)z_j - \left(1 + \frac{uh}{2D_h}\right)z_{j-1} = 0 \quad (13)$$

Osserviamo che tutte le quantità presenti sono adimensionali, dunque definendo il numero di Péclet

$$\mathbb{P}e^* := \frac{uh}{2D_h}$$

possiamo riscrivere l'equazione come

$$(\mathbb{P}e^* - 1)z_{j+1} + \left(2 + K\frac{h^2}{D_h}\right)z_j - (\mathbb{P}e^* + 1)z_{j-1} = 0 \quad (14)$$

La soluzione dipende fortemente dal rapporto $\frac{u}{D}$, in particolare si osserva che:

- per $\frac{u}{D} \rightarrow 0$ (diffusione dominante) la soluzione è stabile e simmetrica rispetto all'asse y .

- per $\frac{u}{D} \rightarrow +\infty$ (convezione dominante) la soluzione presenta uno strato limite (ma è comunque stabile grazie alla scelta di DF upwind) e in $x = 0$ tende a una delta di Dirac, che è ragionevole se pensiamo l'immissione di inquinante come un impulso.

Di conseguenza, si può approssimare M con una funzione gaussiana, come

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2\sigma^2}x^2}, \quad \text{con} \quad \sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

con varianza scelta in modo che $f(0) = M = 1$ e, mentre l'approssimazione a sinistra e' accettabile per $D \rightarrow 0$, cioe' quando l'andamento di $c(x)$ tende a una delta di Dirac in $x = 0$, l'approssimazione sull'intervallo di destra e' molto lontana dalla soluzione esatta. Nei programmi Matlab e nel seguito di questa relazione percio', considereremo sempre $M = 1$ in $x = 0$, $M = 0$ in tutti gli altri punti.

2.2

Consideriamo adesso il problema di diffusione - trasporto

$$-D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + u \frac{\partial c}{\partial x} = M \quad (15)$$

sull'intervallo $(-1, 1)$, con condizioni al bordo

$$c(-1) = 0, \quad c(1) = 1$$

Innanzitutto calcoliamo la soluzione esatta. Riscriviamo l'equazione come sistema del primo ordine introducendo la variabile ausiliaria y :

$$\begin{cases} c' = y \\ y' = \frac{u}{D}y - \frac{1}{D} \end{cases} \quad (16)$$

che ha soluzione

$$c(x) = k_1 \frac{D}{u} e^{\frac{u}{D}x} + k_2 \frac{1}{u} x \quad (17)$$

Imponendo le condizioni al bordo otteniamo la soluzione esatta

$$c(x) = \frac{1}{e^{\frac{2u}{D}} + 1} (e^{\frac{u}{D}(1+x)} + x) \quad (18)$$

Come nel punto precedente, discretizziamo usando differenze finite di tipo upwind:

$$-D \frac{z_{j+1} - 2z_j + z_{j-1}}{h^2} + u \frac{z_j - z_{j-1}}{2h} = M \quad (19)$$

riordiniamo i termini fino ad ottenere

$$\left(-\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right)z_{j+1} + \left(\frac{2D_h}{h^2}\right)z_j - \left(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}\right)z_{j-1} = M \quad (20)$$

sempre con $D_h := D + \frac{uh}{2}$. Come sopra, definiamo la matrice

$$A = \begin{bmatrix} \frac{2D_h}{h^2} & -\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h} & 0 & \cdots & 0 \\ -(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}) & \frac{2D_h}{h^2} & -\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h} & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & & & -\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h} \\ 0 & \cdots & 0 & -(\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h}) & \frac{2D_h}{h^2} \end{bmatrix}$$

e il vettore

$$\underline{v}^T = [M + (\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h})z_0, M, \dots, M, M - (\frac{D_h}{h^2} + \frac{u}{2h})z_{n+1}]$$

e risolviamo il sistema

$$A\underline{z} = \underline{v}$$

in Matlab. Anche in questo caso, la soluzione presenta uno strato limite all'estremo destro del dominio, come si vede nell'immagine:

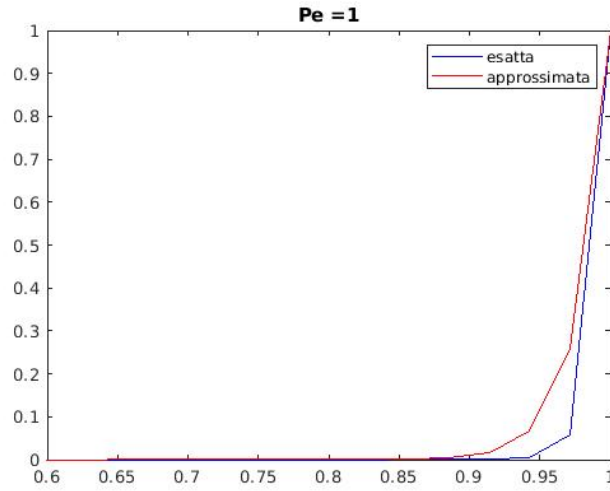


Figure 3: soluzioni esatta e approssimata

Nonostante ciò, l'aver usato DF upwind per la soluzione approssimata ci

permette di ottenere soluzioni stabili —anche se in prossimità dello strato limite l'errore aumenta. Questo fenomeno si presenta per $D \rightarrow 0$, dove gli errori sono dell'ordine di

$$\begin{aligned} err &\approx 5.355\text{e-}02 \text{ per } D = 1 \\ err &\approx 4.704\text{e-}02 \text{ per } D = \frac{1}{10} \\ err &\approx 2.018\text{e-}01 \text{ per } D = \frac{1}{100}. \end{aligned}$$

2.3

In generale, i risultati ottenuti sono compatibili con la nostra comprensione del fenomeno fisico. La soluzione rappresenta infatti la concentrazione di un inquinante immesso in una corrente da una sorgente M. Usando l'equazione (13) — che è adimensionale in quanto tutte le quantità presenti lo sono — siamo in grado di osservare come la variazione di tutti i parametri impatti l'andamento della soluzione, e di rappresentarla in un unico grafico. Questo ci permette di fare alcune osservazioni, al variare dei parametri u , D :

- Se la velocità della corrente è molto alta ($u \gg 1$), l'inquinante non fa in tempo a diffondersi a sinistra di $x = 0$, perché viene trasportato subito nella direzione opposta, e la concentrazione si mantiene bassa quasi ovunque, infatti $\max c(x) \approx 0.1$

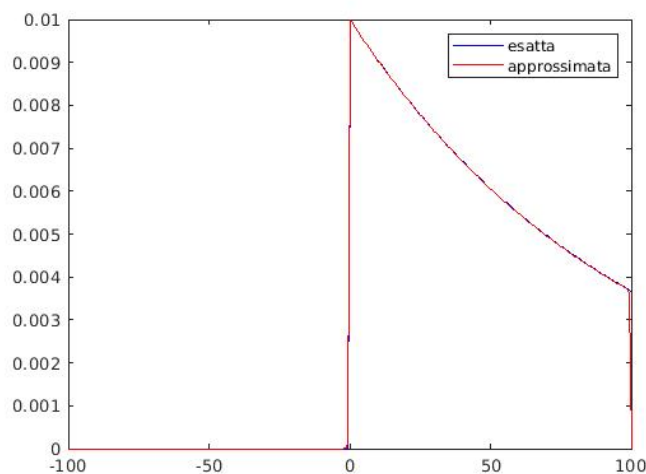


Figure 4: $u = 100$, $D = 1$

- Se la velocità di trasporto $u \rightarrow 0$, $\forall D > 0$ si ha una concentrazione quasi simmetrica rispetto a $x = 0$, perché l'inquinante riesce a diffondersi in modo omogeneo e non viene trasportato via.

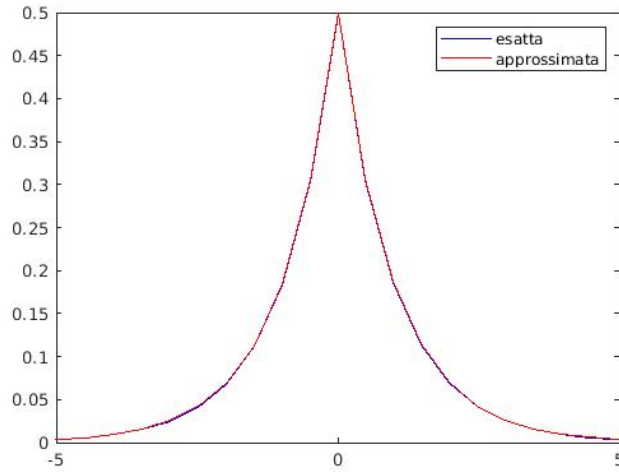


Figure 5: $u = 0.001$, $D = 1$

- Se al contrario $D \rightarrow 0$, ovvero l'inquinante non si diffonde nel fluido, assistiamo al fenomeno dello strato limite perché l'intera la quantità di inquinante viene immessa e trasportata "in blocco" dalla corrente, facendo aumentare molto rapidamente la concentrazione in $x = 0$ (al tempo $t = 0$). In questo caso quindi è più chiaro il perché possiamo pensare M come un impulso, rappresentato da una δ di Dirac nel caso ideale, e approssimabile con una gaussiana.

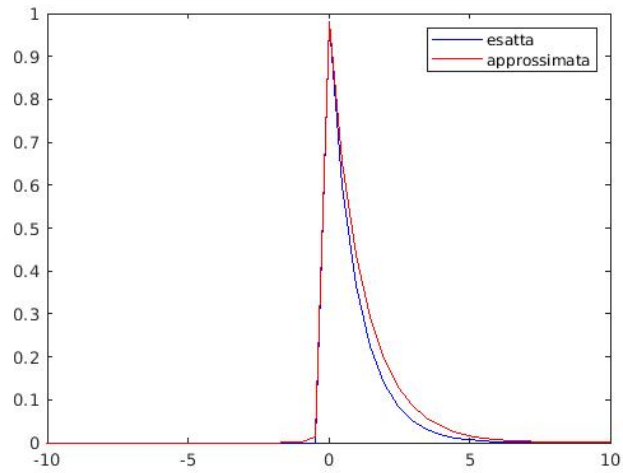


Figure 6: $u = 1$, $D = 0.01$

3

In questa relazione ci siamo occupate della risoluzione numerica di due equazioni differenziali usando tecniche di discretizzazione alle differenze finite centrate e upwind. In entrambi i casi abbiamo ottenuto risultati compatibili con la soluzione esatta (e le nostre aspettative), con errori sufficientemente bassi. Questo progetto è frutto di una collaborazione tra Alyssa Pezzutti e Nicole Santero.