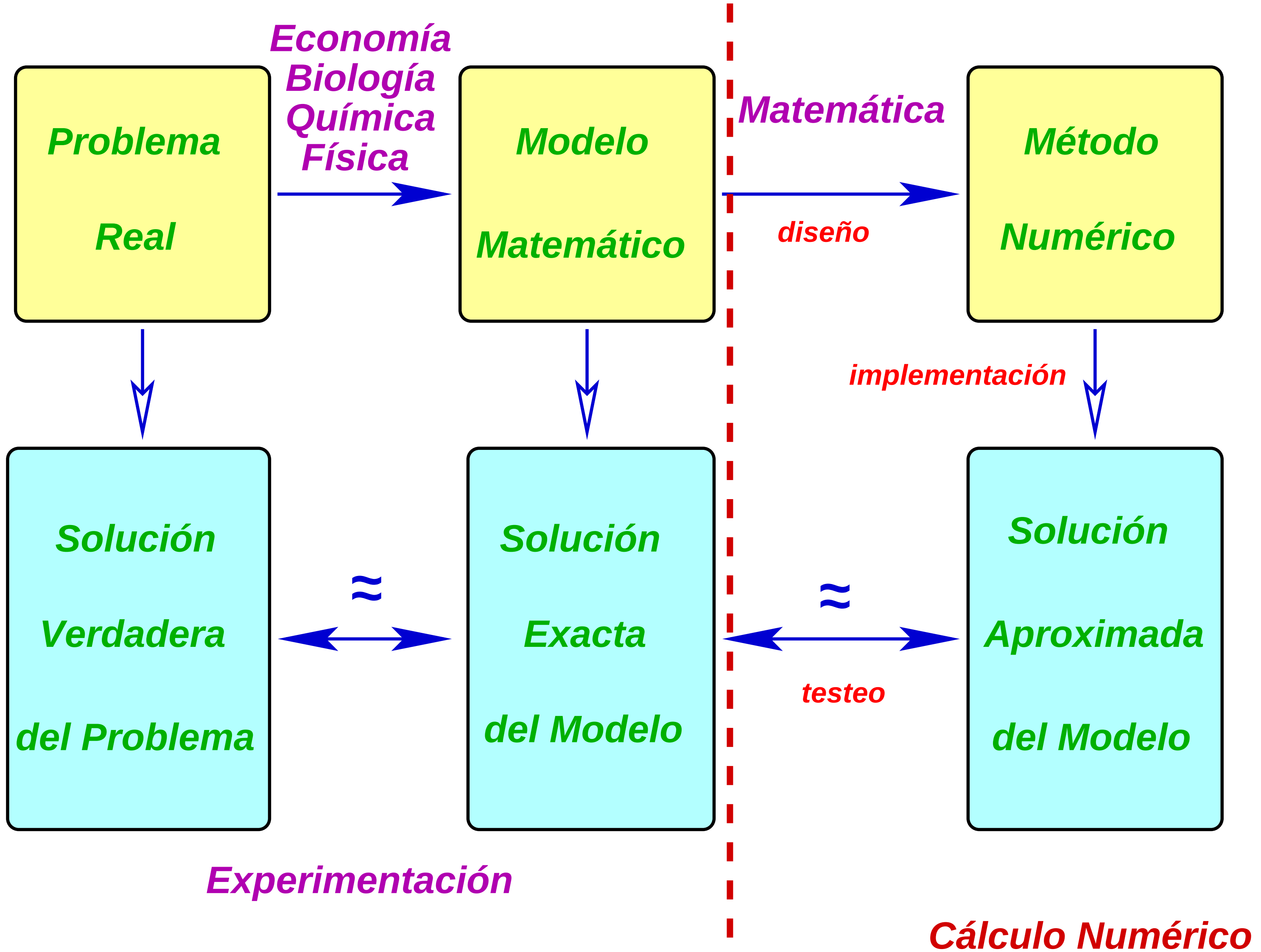
¿Qué es el Cálculo Numérico?

Solución numérica de un modelo matemático

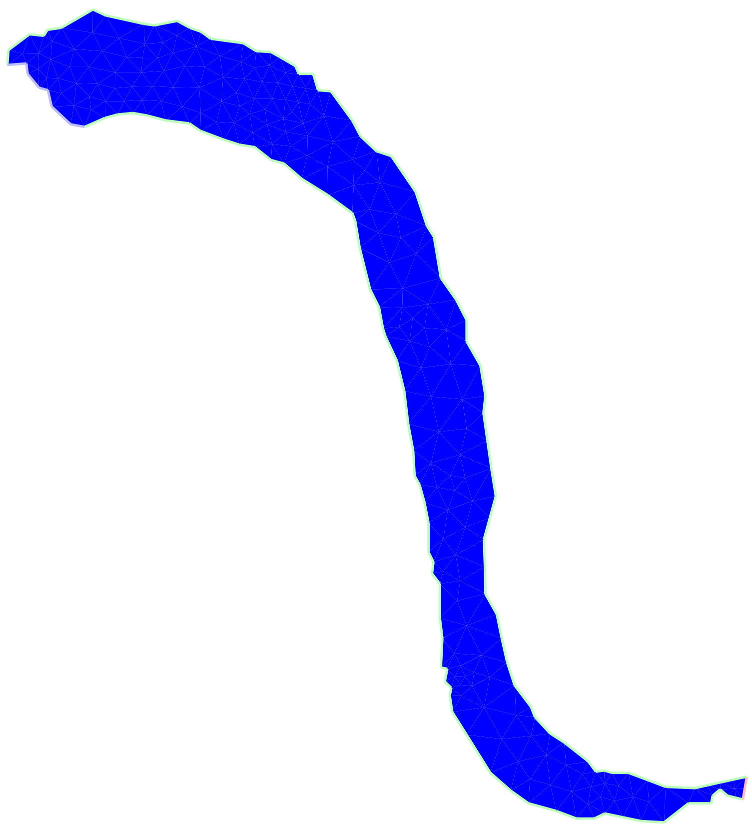


¿En qué consiste el Cálculo Numérico?

A partir del modelo matemático de un problema:

- diseñar un método numérico que permita aproximar la solución del mismo;
- implementar un algoritmo que permita obtener esa solución aproximada mediante el computador;
- testear el error de la solución aproximada obtenida, para asegurar que éste está por debajo de una tolerancia aceptable.

Ejemplo: Modelo de calidad de agua en el tramo inferior del Río Bío Bío



Se trata de determinar el transporte y la degradación de sustancias contaminantes que se emiten al río como parte de efluentes.

Para ello debe tenerse en cuenta que, en su desembocadura, se trata de un río muy ancho, para el que los modelos unidimensionales dan aproximaciones muy groseras.

Esto es parte de un proyecto FONDEF que desarrolla el Departamento de Ingeniería Matemática y el Centro de Ciencias Ambientales EULA, ambos de esta Universidad, con financiación de CONICYT y varias empresas de la zona (Ess Bio, Petrox, CMPC, etc.).

Modelo bidimensional del transporte y degradación de un contaminante en un medio acuático

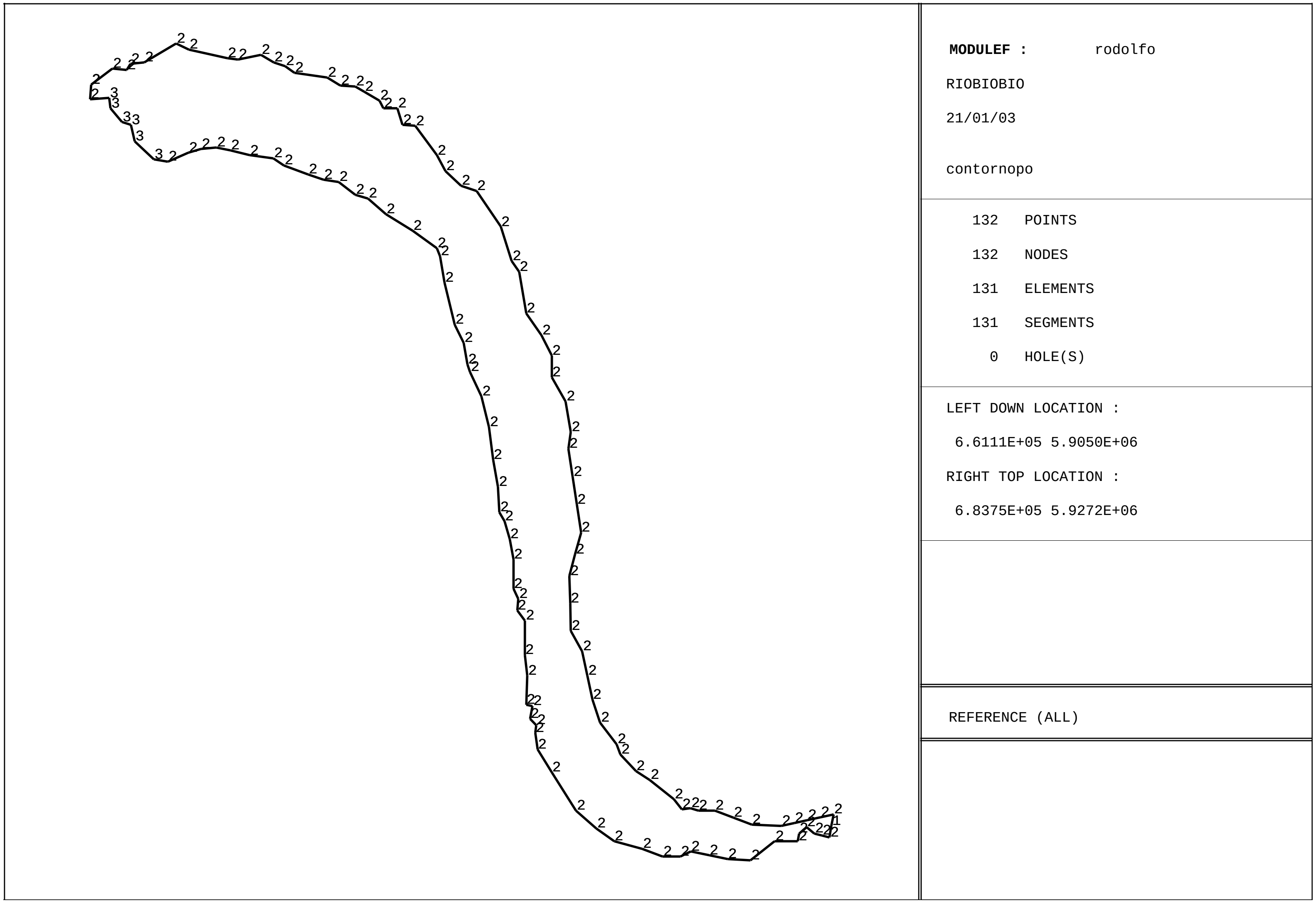
- Fuente de contaminación: $F(x, y)$.
- Concentración del contaminante: $C = C(x, y)$.
- Dispersión no despreciable: E (no necesariamente constante).
- Campo de velocidades hidrodinámicas: $U = (u, v)$.
- Modelo de reacción de primer orden: $R = kC$.
- Régimen permanente: $\dfrac{\partial C}{\partial t} = 0$.

E.D.P. del modelo matemático: $\boxed{-\operatorname{div}(E\,\nabla C) + U \cdot \nabla C + kC = F}$

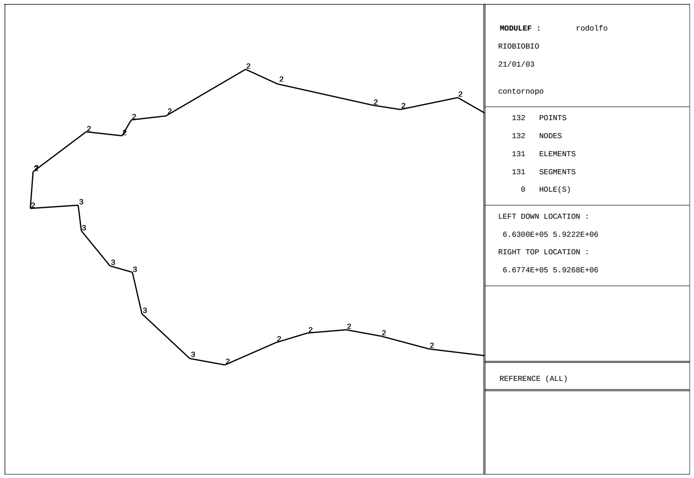
donde

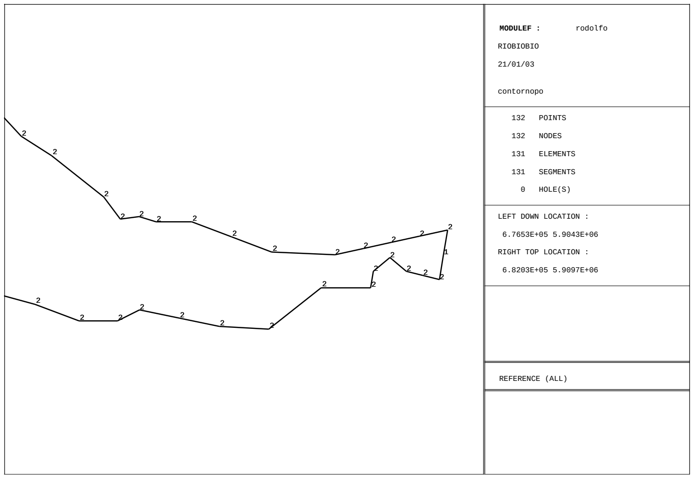
$$\nabla C = \left(\frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial y} \right) \qquad \text{y} \qquad \operatorname{div} W = \frac{\partial W_1}{\partial x} + \frac{\partial W_2}{\partial y}.$$

Dominio de la E.D.P.



Condiciones de contorno de la E.D.P.





- Ω: dominio de la E.D.P. (tramo del río objeto del estudio).
- $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cap \Gamma_3$: contorno del dominio Ω.
- Γ_1: tramo del contorno aguas arriba.
- Γ_2: tramo del contorno costa.
- Γ_3: tramo del contorno aguas abajo.
- n: vector normal unitario exterior al contorno $\partial\Omega$.

Problema de valores de contorno para la E.D.P.

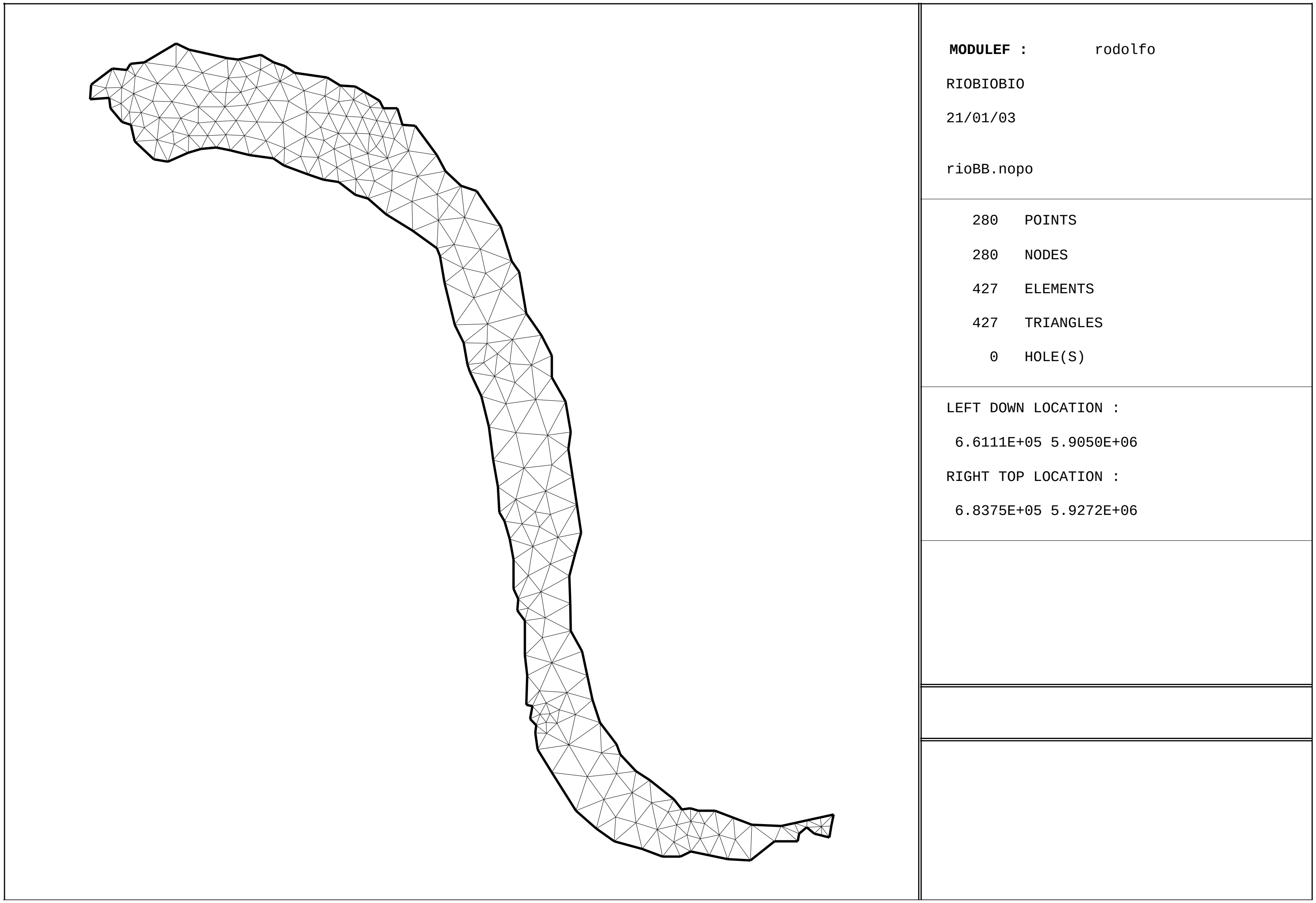
Condiciones de contorno

- En Γ_1 (tramo del contorno aguas arriba): $C|_{\Gamma_1} = C_1$ dato.
- En Γ_2 (tramo del contorno costa) suponemos que la costa es impermeable a la sustancia objeto de estudio: $\dfrac{\partial C}{\partial n} = \nabla C \cdot n = 0$ en Γ_2.
- En Γ_3 (tramo del contorno aguas abajo) suponemos que ya hay mezcla total del contaminante: $\dfrac{\partial C}{\partial n} = 0$.

P.V.C.

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(E\,\nabla C) + U \cdot \nabla C + kC = F, & \text{en } \Omega, \\ C = C_1, & \text{en } \Gamma_1, \\ \dfrac{\partial C}{\partial n} = 0, & \text{en } \Gamma_2 \text{ y } \Gamma_3. \end{cases}$$

Discretización. Mallado del dominio



Método de Elementos Finitos (M.E.F.)

Sean $P_1, \ldots, P_N$ los vértices de la malla donde la concentración no se conoce (vértices interiores y de la frontera en Γ_2 y Γ_3).

Sean $P_{N+1}, \ldots, P_{N+M}$ los vértices de la malla donde la concentración es dato (vértices de la frontera en Γ_1).

Sea C_i la concentración en el punto P_i ($i = 1, \ldots, N+M$).

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} a_{11} & \cdots & a_{1N} & a_{1N+1} & \cdots & a_{1N+M} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} & a_{NN+1} & \cdots & a_{NN+M} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} C_1 \\ \vdots \\ C_N \\ \hline C_{N+1} \\ \vdots \\ C_{N+M} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{array}\right]$$

con...

Método de Elementos Finitos (cont.)

...con

$C_1, ..., C_N$: incógnitas (concentraciones desconocidas)

$C_{N+1}, ..., C_{N+M}$: datos (concentraciones conocidas aguas arriba)

$$a_{ij} = \int_\Omega E\,\nabla\phi_j \cdot \nabla\phi_i + \int_\Omega U \cdot \nabla\phi_j\,\phi_i + \int_\Omega k\phi_j\phi_i, \qquad \begin{array}{l} i = 1, \ldots, N, \\ j = 1, \ldots, N+M, \end{array}$$

$$f_i = \int_\Omega F\phi_i, \qquad i = 1, \ldots, N,$$

donde ϕ_i es la función continua, lineal en cada triángulo de la malla, que vale 1 en el vértice P_i y 0 en el vértice P_j para $j \neq i$ ($i, j = 1, \ldots N + M$).

Método de Elementos Finitos (cont.)

Entonces las concentraciones desconocidas $C_1, \ldots, C_N$ se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$

donde

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a_{1N+1} & \cdots & a_{1N+M} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{NN+1} & \cdots & a_{NN+M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{N+1} \\ \vdots \\ C_{N+M} \end{bmatrix}$$

Cálculo Numérico.

- Generación de la malla a partir de las coordenadas de los puntos que describen la geometría del dominio: *Geometría Computacional*.
- Método de Elementos Finitos para la resolución aproximada del modelo matemático: *Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales*.
- Cálculo de las integrales que definen cada entrada de las matrices y los vectores que aparecen: *Integración Numérica*.
- Resolución del sistema de ecuaciones lineales resultante (de dimensión muy grande!): *Solución de Sistemas de Ecuaciones Lineales*.
- Visualización de la solución obtenida: *Interpolación*.

La solución obtenida es una *aproximación* de la solución verdadera del problema pues está afectada por distintos errores.

Fuentes del error

- **Errores de modelización.** El P.V.C. con el que se modela el problema se obtiene haciendo hipótesis simplificadoras que sólo se cumplen parcialmente.

  El análisis de este tipo de errores está fuera del alcance de este curso.

- **Errores en los datos.** El problema depende de datos que se obtienen mediante:

  - **mediciones:** concentración aguas arriba $C_{N+1}, \ldots, C_{N+M}$,
  - **experimentos de laboratorio:** constante de reacción k,
  - **ajuste de parámetros:** coeficiente de dispersión E,
  - **otros programas computacionales:** campo de velocidades $U = (u, v)$.

  Todos estos datos se encuentran sujetos a errores.

  En este curso estudiaremos métodos **estables**, en el sentido que no propaguen los errores en los datos de manera tal que destruyan la calidad de la solución aproximada que se obtenga.

Fuentes del error (cont.)

- **Errores del método numérico.**
  - **Errores de discretización:** El método de elementos finitos da una solución numérica del P.V.C., que aproxima más y más a la solución exacta de éste cuando la malla se hace más y más fina (y por lo tanto el número N de incógnitas C_i se hace más y más grande).
  - **Errores computacionales:** Los sistemas de ecuaciones resultantes son de gran tamaño y deben resolverse en el computador. Éste trabaja con un número de dígitos fijo que hace que cada operación adolezca de un pequeñísimo error de redondeo.

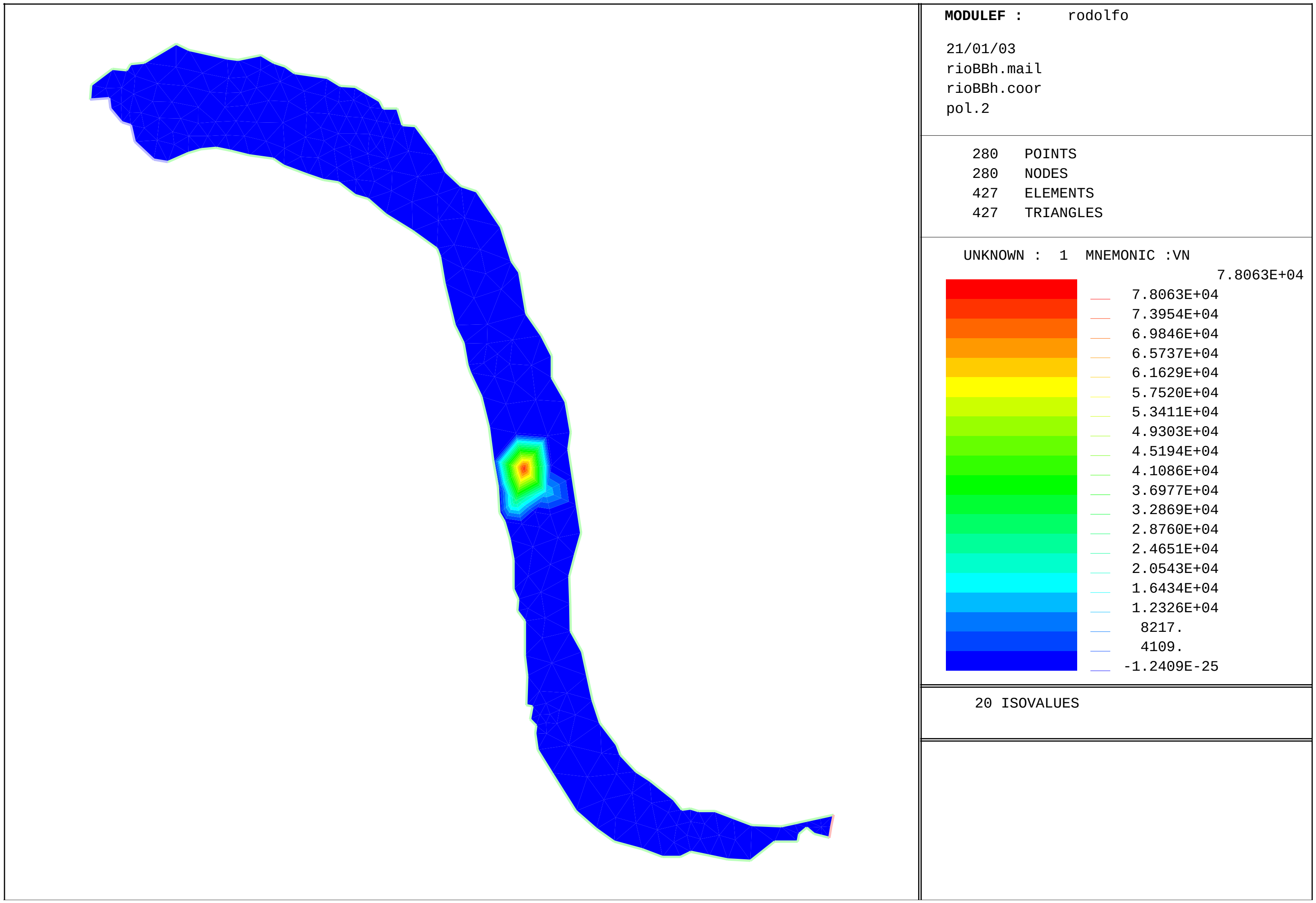
En este curso estudiaremos como controlar los errores del método numérico y como testear que éstos estén por debajo de una tolerancia aceptable.

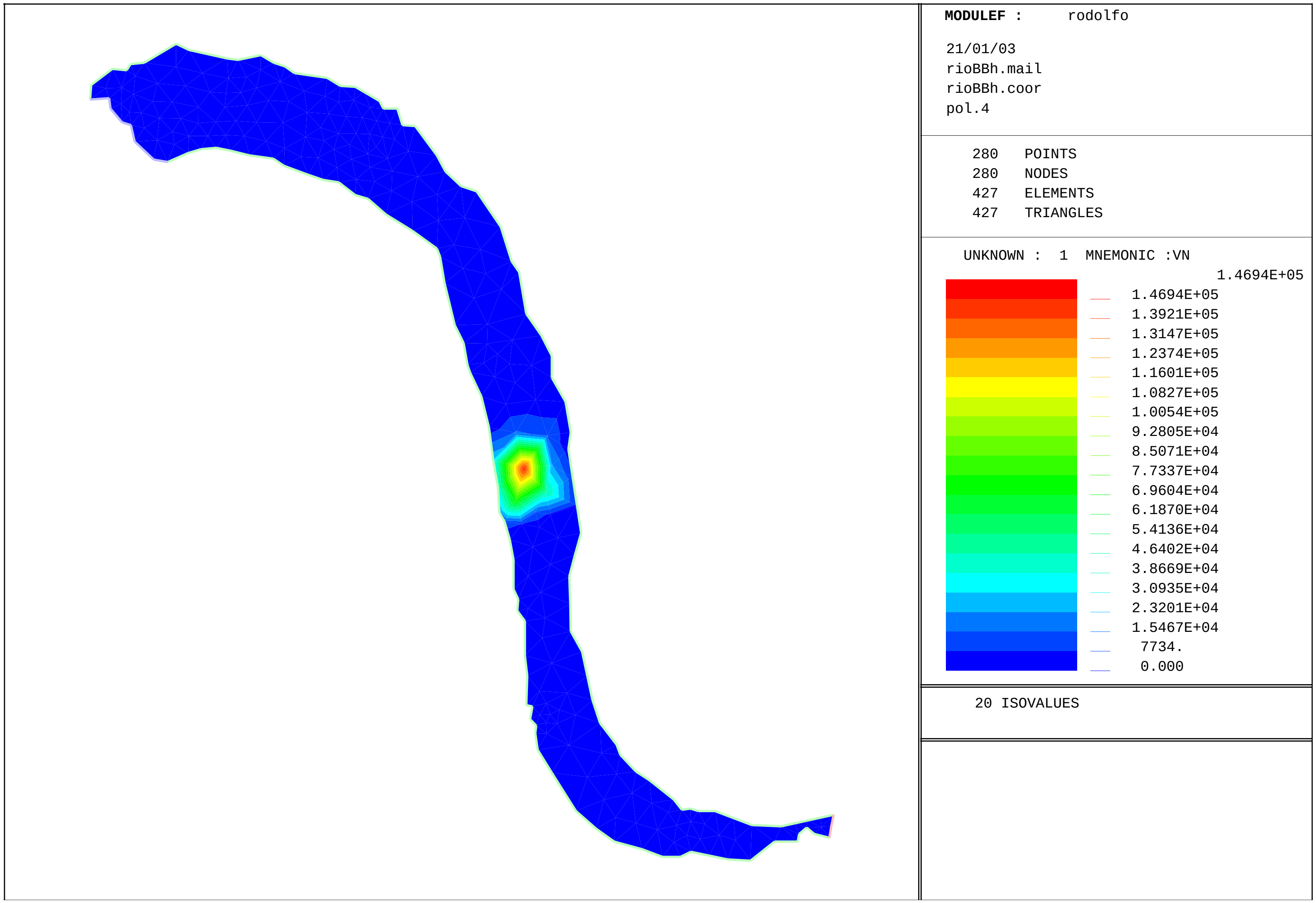
Ejemplo.

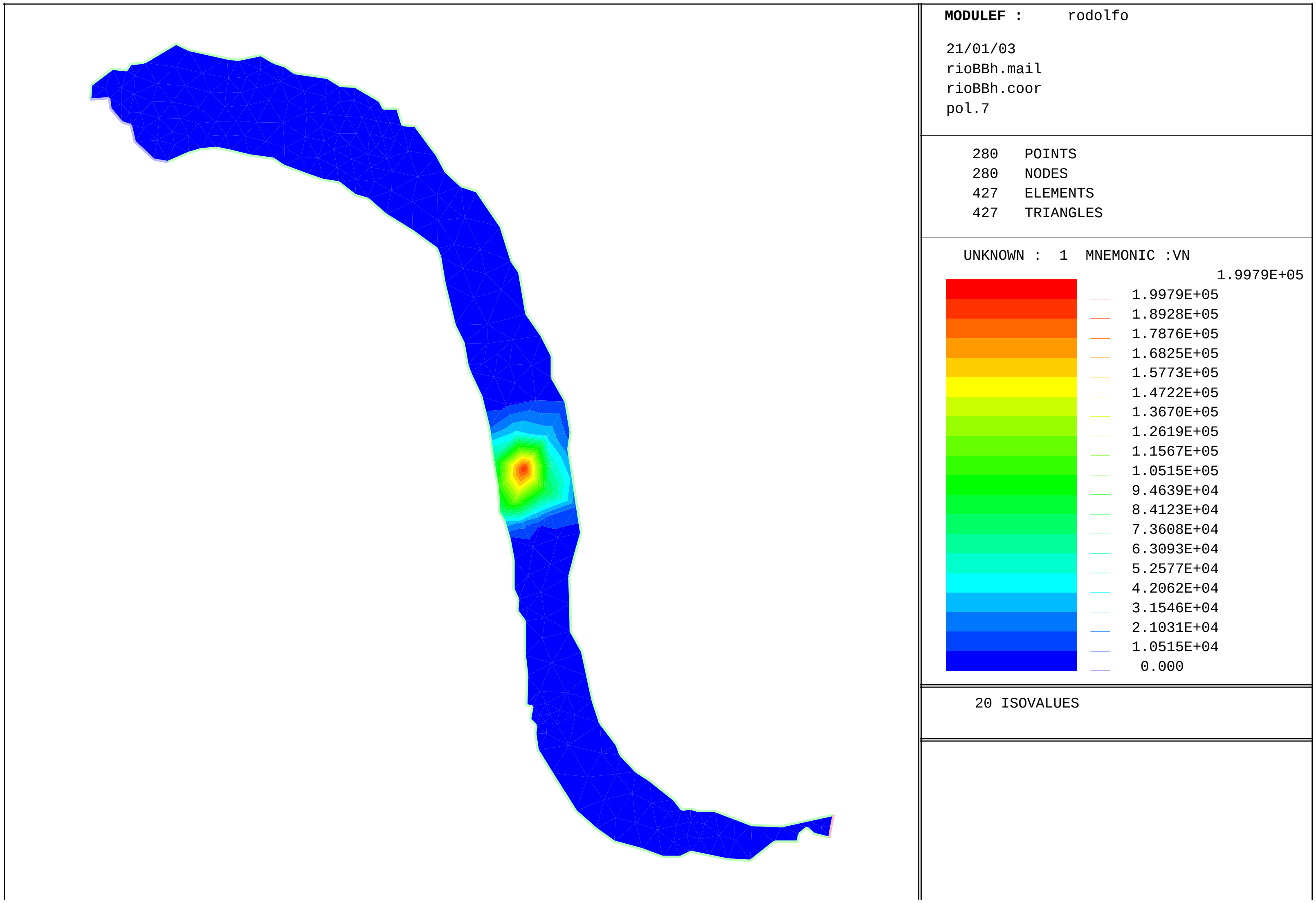
Se presentan resultados correspondientes a la evolución de la concentración de una sustancia contaminante que se emitie en un punto del río.

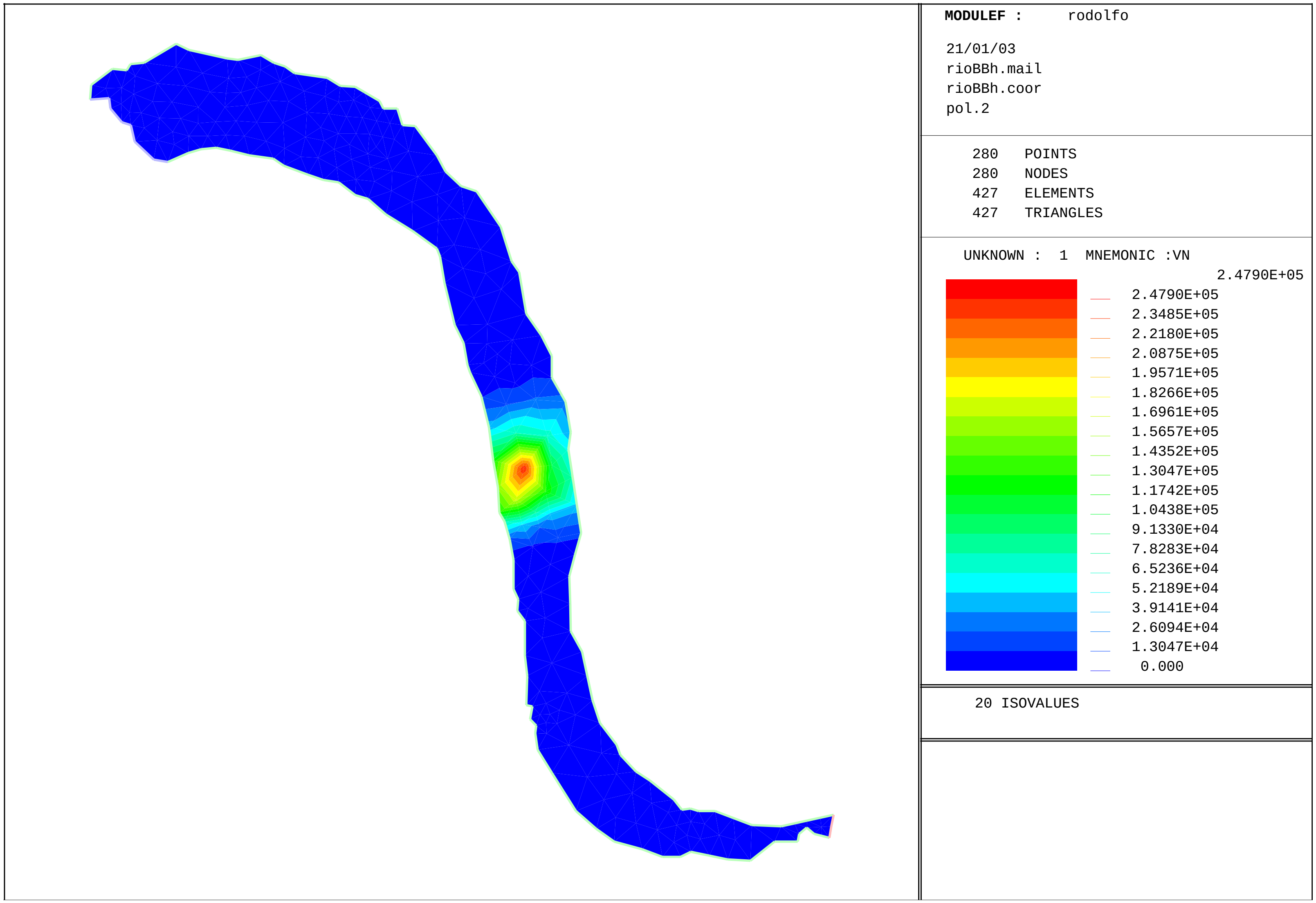
Los resultados no corresponden a un problema en régimen permanente, sino al problema evolutivo que surge desde el momento en que empieza la emisión.

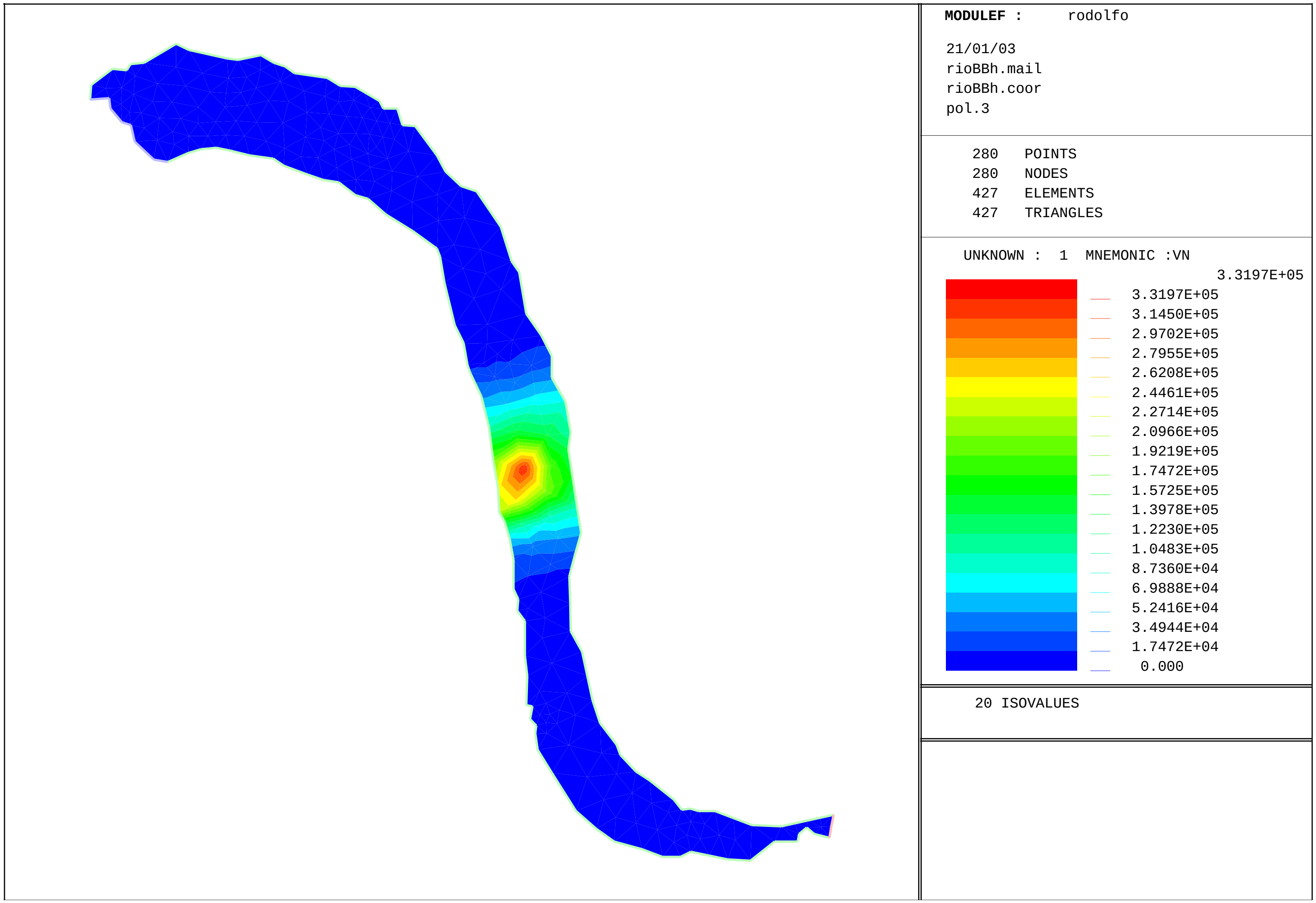
La solución de este problema es un poco más compleja que la del que se presentó (régimen permanente). En cada paso de tiempo debe resolverse un problema que es muy similar al descrito.

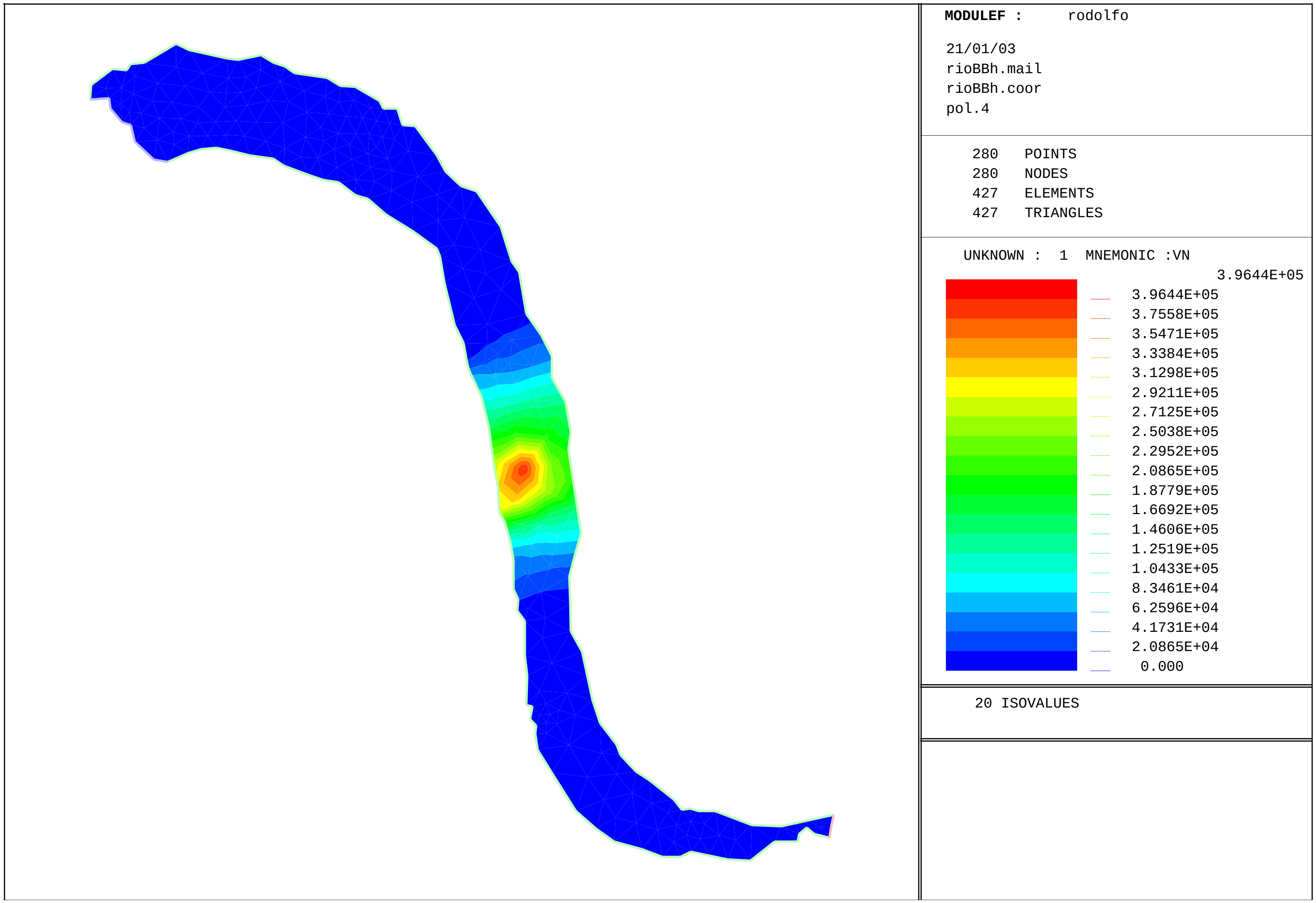

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.2
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
7.8063E+04
7.8063E+04
7.3954E+04
6.9846E+04
6.5737E+04
6.1629E+04
5.7520E+04
5.3411E+04
4.9303E+04
4.5194E+04
4.1086E+04
3.6977E+04
3.2869E+04
2.8760E+04
2.4651E+04
2.0543E+04
1.6434E+04
1.2326E+04
8217.
4109.
-1.2409E-25
20 ISOVALUES

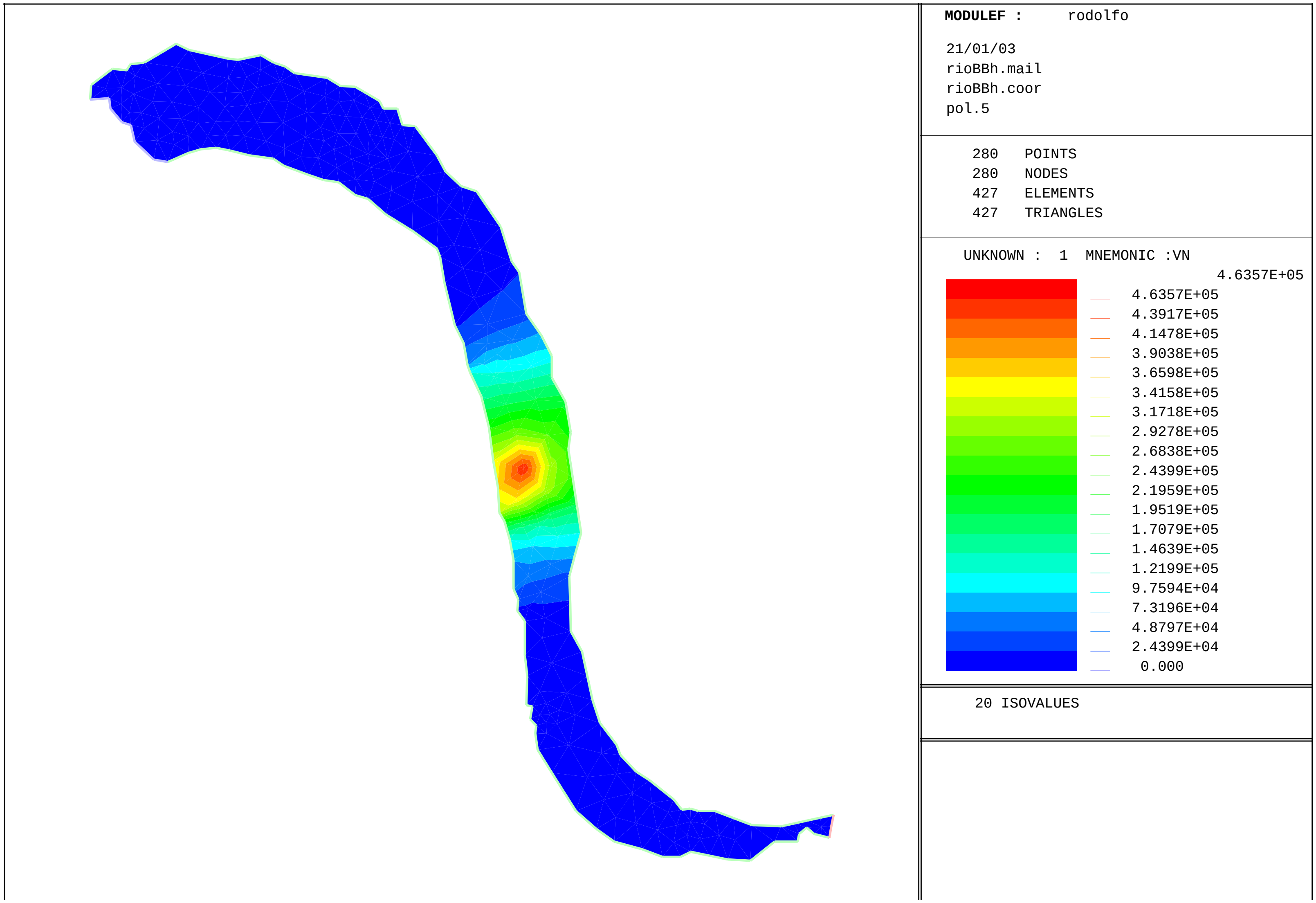

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.4
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
1.4694E+05
1.4694E+05
1.3921E+05
1.3147E+05
1.2374E+05
1.1601E+05
1.0827E+05
1.0054E+05
9.2805E+04
8.5071E+04
7.7337E+04
6.9604E+04
6.1870E+04
5.4136E+04
4.6402E+04
3.8669E+04
3.0935E+04
2.3201E+04
1.5467E+04
7734.
0.000
20 ISOVALUES

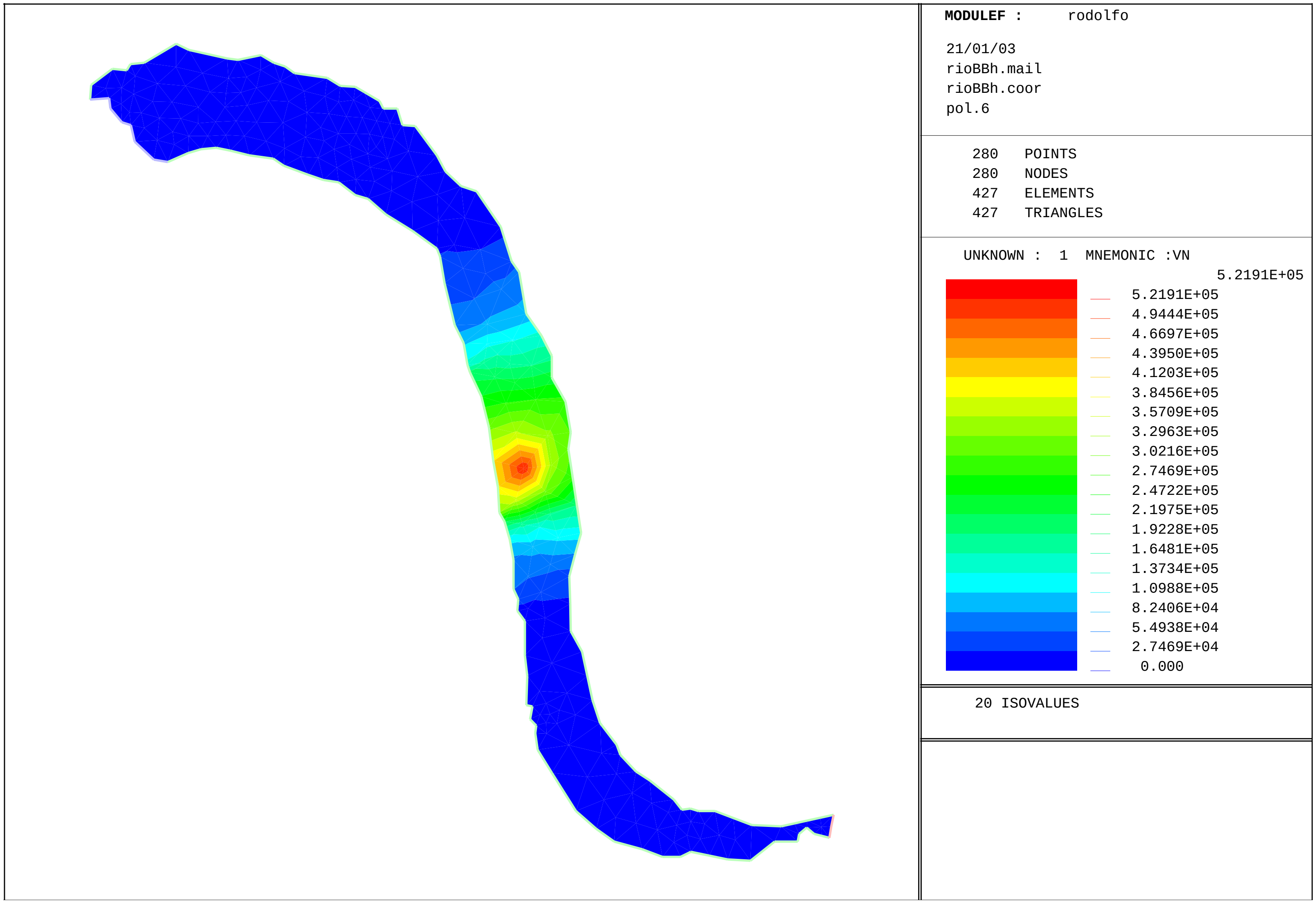

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.7
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
1.9979E+05
1.9979E+05
1.8928E+05
1.7876E+05
1.6825E+05
1.5773E+05
1.4722E+05
1.3670E+05
1.2619E+05
1.1567E+05
1.0515E+05
9.4639E+04
8.4123E+04
7.3608E+04
6.3093E+04
5.2577E+04
4.2062E+04
3.1546E+04
2.1031E+04
1.0515E+04
0.000
20 ISOVALUES

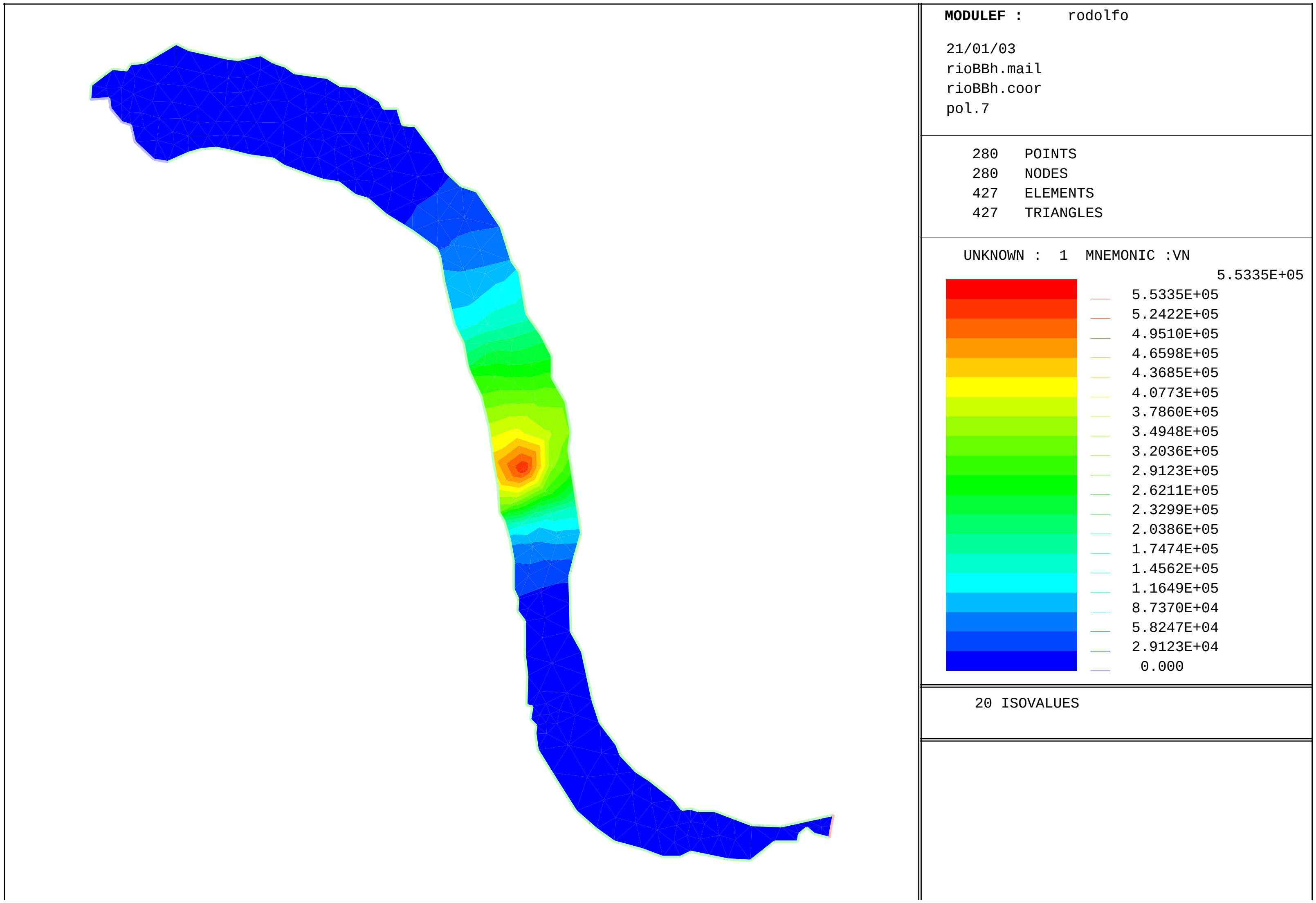

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.2
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
2.4790E+05
2.4790E+05
2.3485E+05
2.2180E+05
2.0875E+05
1.9571E+05
1.8266E+05
1.6961E+05
1.5657E+05
1.4352E+05
1.3047E+05
1.1742E+05
1.0438E+05
9.1330E+04
7.8283E+04
6.5236E+04
5.2189E+04
3.9141E+04
2.6094E+04
1.3047E+04
0.000
20 ISOVALUES

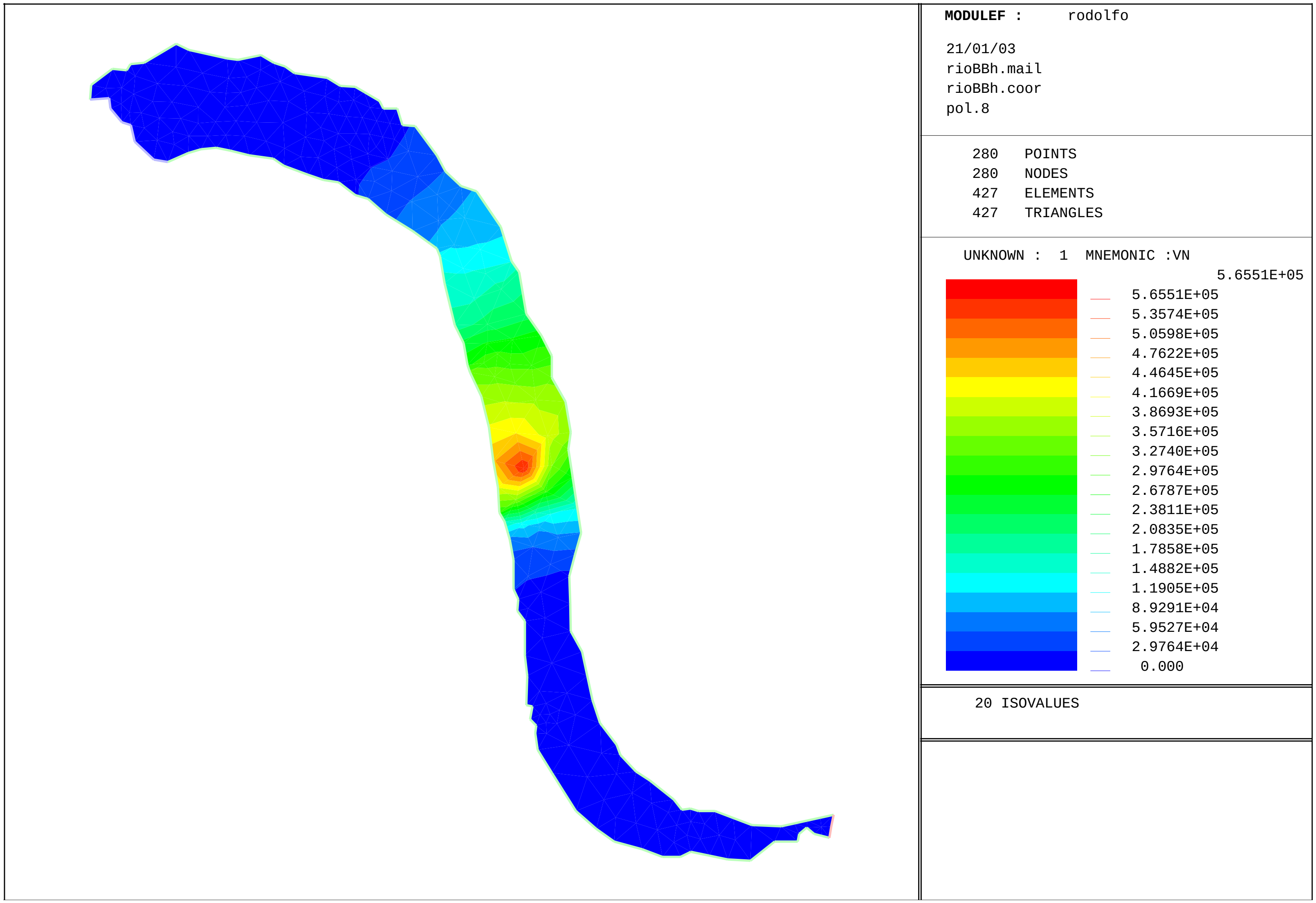

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.3
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
3.3197E+05
3.3197E+05
3.1450E+05
2.9702E+05
2.7955E+05
2.6208E+05
2.4461E+05
2.2714E+05
2.0966E+05
1.9219E+05
1.7472E+05
1.5725E+05
1.3978E+05
1.2230E+05
1.0483E+05
8.7360E+04
6.9888E+04
5.2416E+04
3.4944E+04
1.7472E+04
0.000
20 ISOVALUES

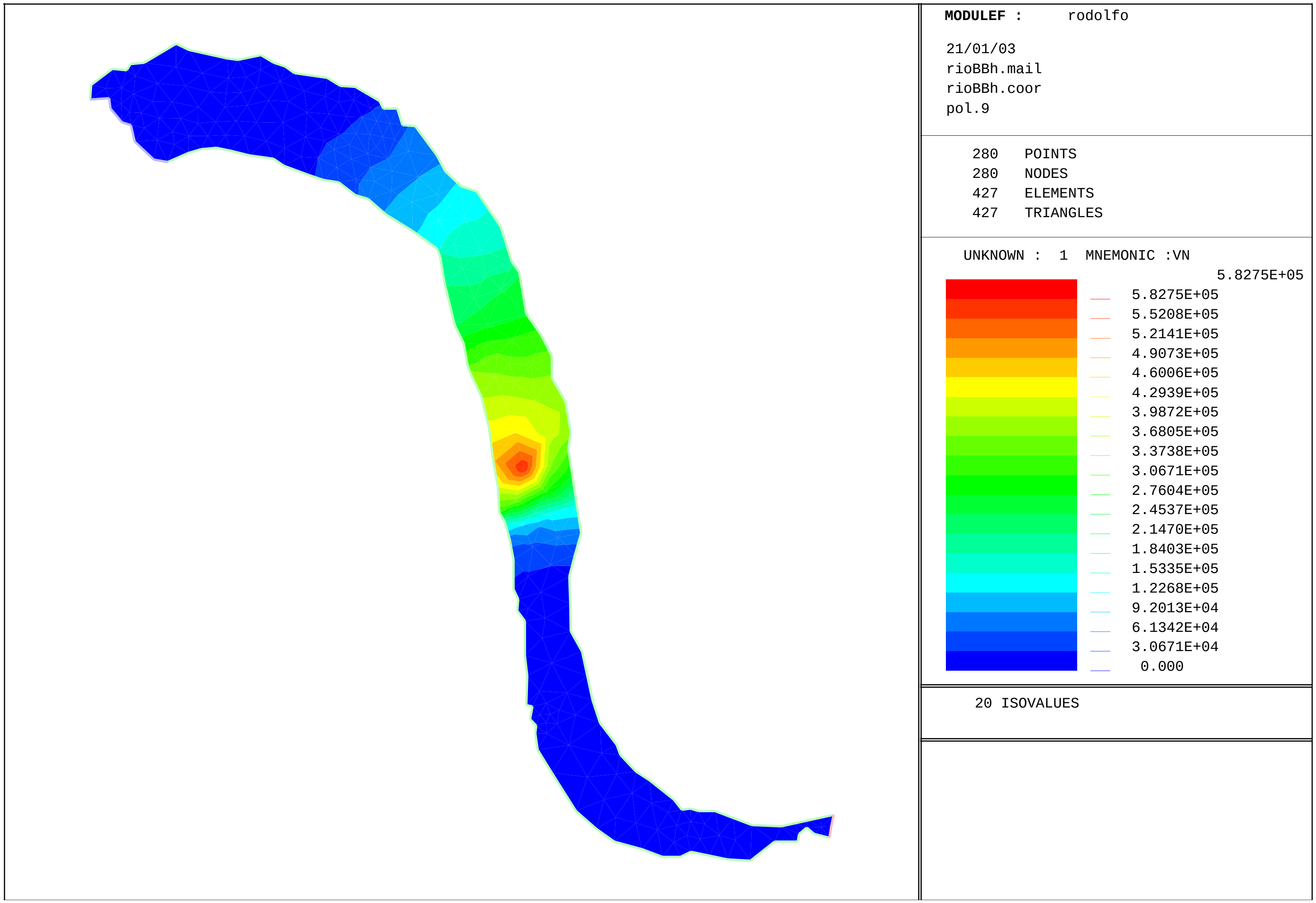

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.4
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
3.9644E+05
3.9644E+05
3.7558E+05
3.5471E+05
3.3384E+05
3.1298E+05
2.9211E+05
2.7125E+05
2.5038E+05
2.2952E+05
2.0865E+05
1.8779E+05
1.6692E+05
1.4606E+05
1.2519E+05
1.0433E+05
8.3461E+04
6.2596E+04
4.1731E+04
2.0865E+04
0.000
20 ISOVALUES

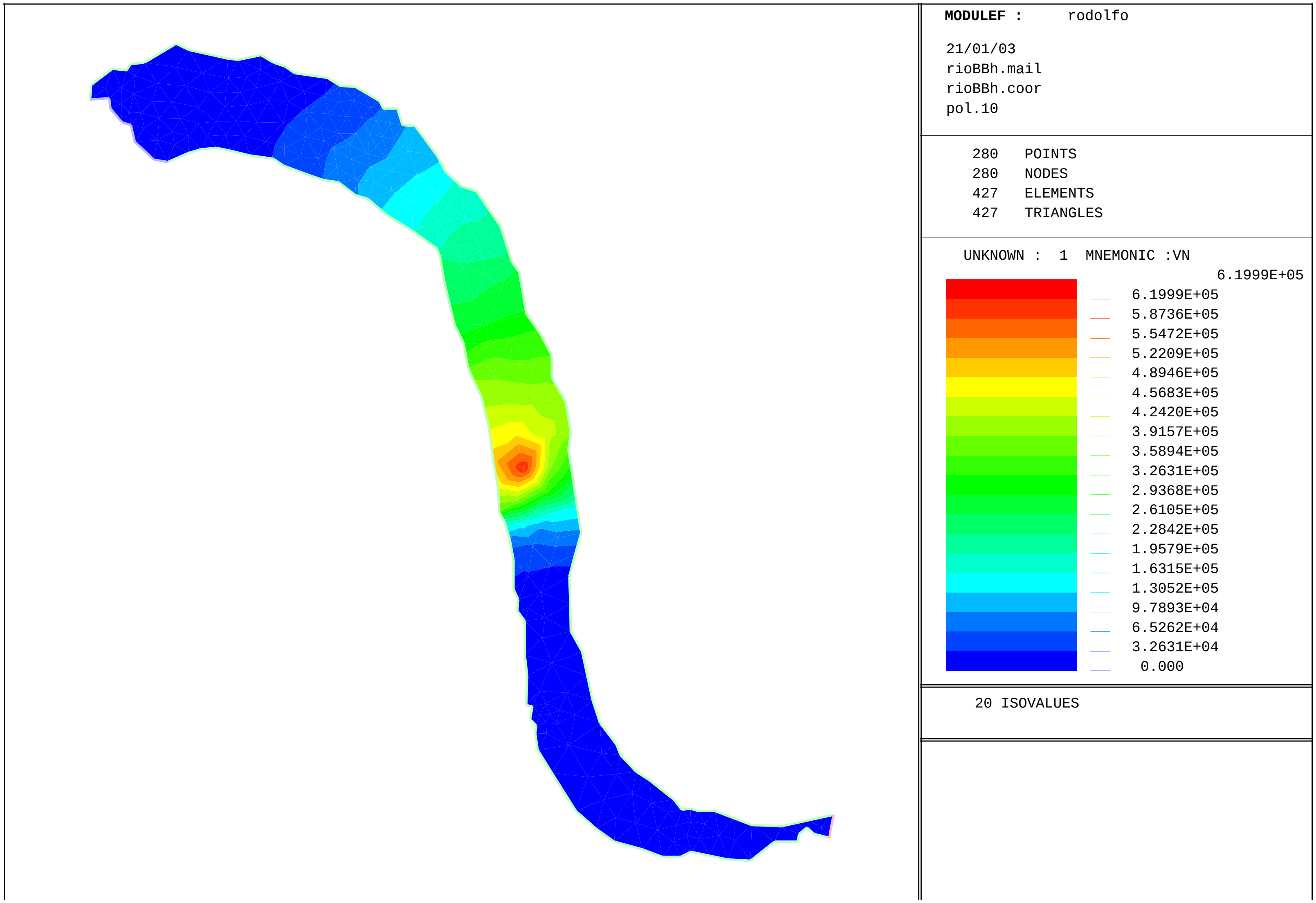

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.5
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
4.6357E+05
4.6357E+05
4.3917E+05
4.1478E+05
3.9038E+05
3.6598E+05
3.4158E+05
3.1718E+05
2.9278E+05
2.6838E+05
2.4399E+05
2.1959E+05
1.9519E+05
1.7079E+05
1.4639E+05
1.2199E+05
9.7594E+04
7.3196E+04
4.8797E+04
2.4399E+04
0.000
20 ISOVALUES

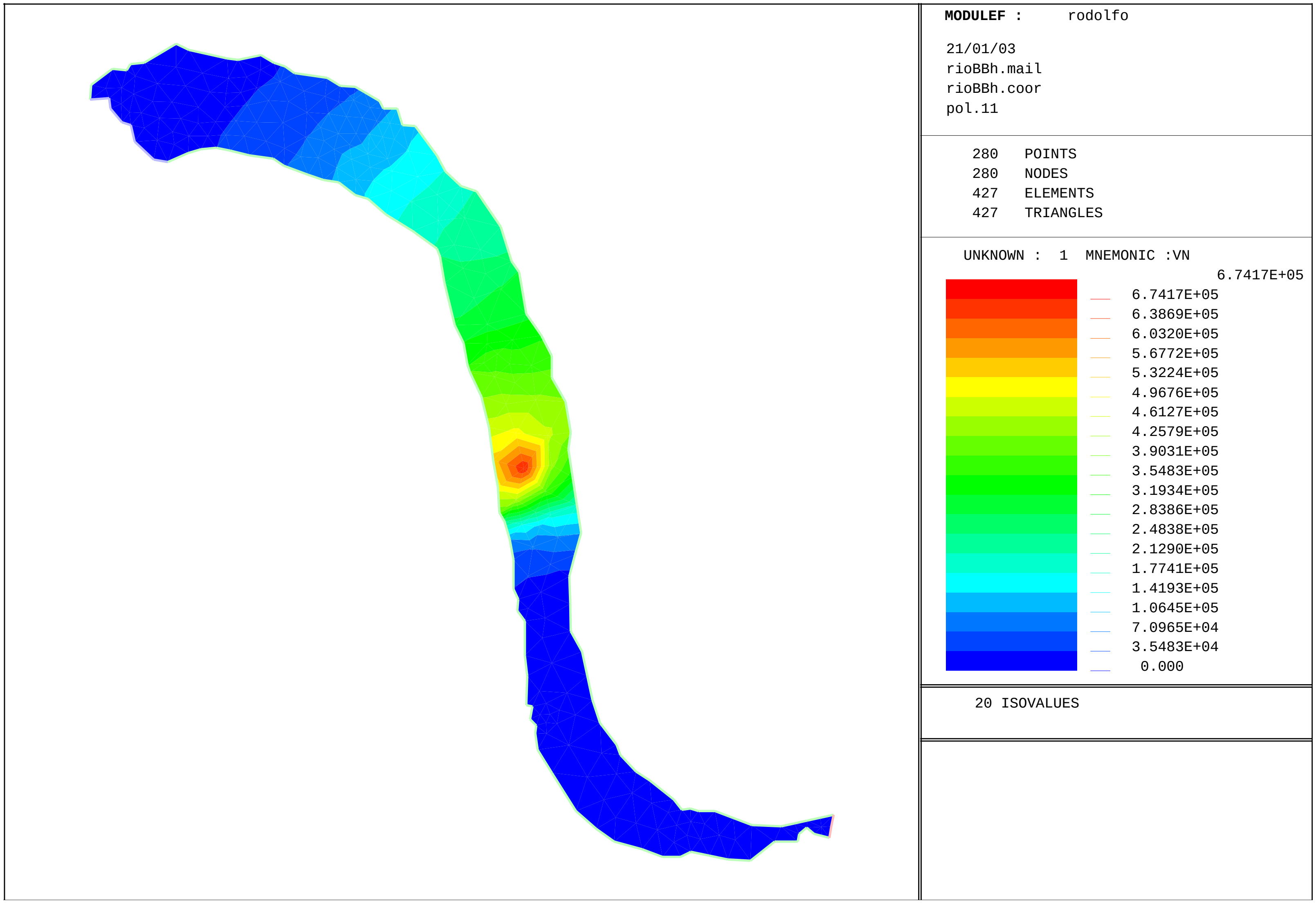

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.6
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
5.2191E+05
5.2191E+05
4.9444E+05
4.6697E+05
4.3950E+05
4.1203E+05
3.8456E+05
3.5709E+05
3.2963E+05
3.0216E+05
2.7469E+05
2.4722E+05
2.1975E+05
1.9228E+05
1.6481E+05
1.3734E+05
1.0988E+05
8.2406E+04
5.4938E+04
2.7469E+04
0.000
20 ISOVALUES

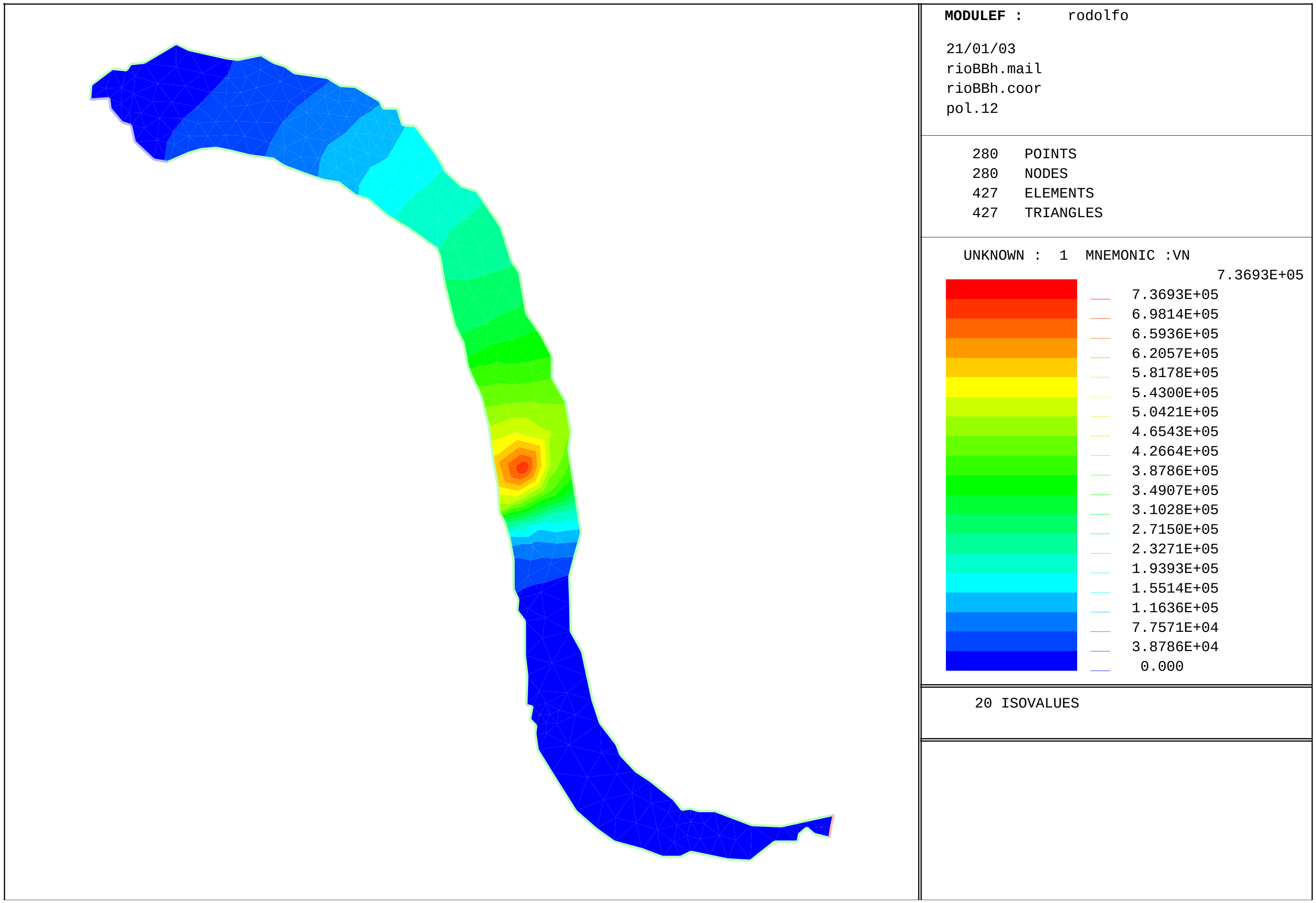

MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.7
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
5.5335E+05
5.5335E+05
5.2422E+05
4.9510E+05
4.6598E+05
4.3685E+05
4.0773E+05
3.7860E+05
3.4948E+05
3.2036E+05
2.9123E+05
2.6211E+05
2.3299E+05
2.0386E+05
1.7474E+05
1.4562E+05
1.1649E+05
8.7370E+04
5.8247E+04
2.9123E+04
0.000
20 ISOVALUES


MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.8
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
5.6551E+05
5.6551E+05
5.3574E+05
5.0598E+05
4.7622E+05
4.4645E+05
4.1669E+05
3.8693E+05
3.5716E+05
3.2740E+05
2.9764E+05
2.6787E+05
2.3811E+05
2.0835E+05
1.7858E+05
1.4882E+05
1.1905E+05
8.9291E+04
5.9527E+04
2.9764E+04
0.000
20 ISOVALUES


MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.9
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
5.8275E+05
5.8275E+05
5.5208E+05
5.2141E+05
4.9073E+05
4.6006E+05
4.2939E+05
3.9872E+05
3.6805E+05
3.3738E+05
3.0671E+05
2.7604E+05
2.4537E+05
2.1470E+05
1.8403E+05
1.5335E+05
1.2268E+05
9.2013E+04
6.1342E+04
3.0671E+04
0.000
20 ISOVALUES


MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.10
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
6.1999E+05
6.1999E+05
5.8736E+05
5.5472E+05
5.2209E+05
4.8946E+05
4.5683E+05
4.2420E+05
3.9157E+05
3.5894E+05
3.2631E+05
2.9368E+05
2.6105E+05
2.2842E+05
1.9579E+05
1.6315E+05
1.3052E+05
9.7893E+04
6.5262E+04
3.2631E+04
0.000
20 ISOVALUES


MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.11
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
6.7417E+05
6.7417E+05
6.3869E+05
6.0320E+05
5.6772E+05
5.3224E+05
4.9676E+05
4.6127E+05
4.2579E+05
3.9031E+05
3.5483E+05
3.1934E+05
2.8386E+05
2.4838E+05
2.1290E+05
1.7741E+05
1.4193E+05
1.0645E+05
7.0965E+04
3.5483E+04
0.000
20 ISOVALUES


MODULEF : rodolfo
21/01/03
rioBBh.mail
rioBBh.coor
pol.12
280 POINTS
280 NODES
427 ELEMENTS
427 TRIANGLES
UNKNOWN : 1 MNEMONIC :VN
7.3693E+05
7.3693E+05
6.9814E+05
6.5936E+05
6.2057E+05
5.8178E+05
5.4300E+05
5.0421E+05
4.6543E+05
4.2664E+05
3.8786E+05
3.4907E+05
3.1028E+05
2.7150E+05
2.3271E+05
1.9393E+05
1.5514E+05
1.1636E+05
7.7571E+04
3.8786E+04
0.000
20 ISOVALUES