Pauta Certamen N^{o}3 ILI-286

SCT - Sá.16.12.17

1. El Algoritmo 1 muestra la función MOMENTO que calcula el momento n-ésimo utilizando la regla del trapecio, donde se realizarán evaluaciones en puntos equiespaciados, denotados por x_j. Para obtener los valores de $f(x_j)$ se deberá realizar una búsqueda de ceros sobre la función $G(s) = x_j + 1/2 - s\exp(s)$, donde $\hat{s}$ es la raíz tal que $G(\hat{s}) = 0$ y por lo tanto $\hat{s} = f(x_j)$, esto debe realizarse para cada j. Luego, la función INTEGRALMOMENTOS se asegura que el error absoluto entregado sea menor o igual a un parámetro ε.

Algoritmo 1 Cálculo de M_n

function MOMENTO(n, m, f)
    $G(s) = \beta + 1/2 - s\ \exp(s)$
    $M_n = 0$
    $x_0 = 0$
    $f(x_0) =$ OBTENERCERO$(G(f(x_0)))$
    for $j = 1, \ldots, m$ **do**
        $x_j = j/m$
        $f(x_j) =$ OBTENERCERO$(G(f(x_j)))$
        $M_n = M_n + h(f(x_{j-1})x_{j-1}^n + f(x_j)x_j^n)/2$
    end for
    return M_n
end function
function INTEGRALMOMENTOS(n, ε, f)
    $m = 1$
    $I_{m+1} =$ MOMENTO(n, m, f)
    $e = \infty$
    while $e \geq \varepsilon$ **do**
        $I_m = I_{m+1}$
        $m = m + 1$
        $I_{m+1} =$ MOMENTO(n, m, f)
        $e = |I_{m+1} - I_m|$
    end while
    return I_{m+1}
end function

Puntajes

14 puntos por proponer un algoritmo para el problema en particular para calcular la integral, indicar los valores de x_j que son necesarios según la regla propuesta y que función debe evalaurse.
6 puntos por explicar cómo se obtendrán las evaluaciones de $f(x_j)$.
10 puntos por asegurar que la integral tendrá un error menor a ε.

2. **(a)** Considerar N y L parámetros del algoritmo, los cuales definen $h = L/N$. Además, se tienen conocen los individuos en la frontera del dominio según la definición de $\alpha_{i,j}$. De acuerdo al enunciado, las condiciones de frontera para los individuos en los bordes del cuadrado corresponden a las ecuaciones:

$$p_{i,0} = 0 \text{ para } i \in 0, \ldots, N \tag{1}$$
$$p_{i,N} = 0 \text{ para } i \in 0, \ldots, N \tag{2}$$
$$p_{0,j} = l(j) \text{ para } j \in 0, \ldots, N \tag{3}$$
$$p_{N,j} = r(j) \text{ para } j \in 0, \ldots, N \tag{4}$$

Estas ecuaciones suponen que $r(0) = r(N) = l(0) = l(N) = 0$. Para los individuos que están dentro del cuadrado se cumple la ecuación:

$$p_{i+1,j} + p_{i-1,j} - p_{i,j} + p_{i,j+1} + p_{i,j-1} = 0 \text{ para } i \in \{1, \ldots, N-1\} \text{ y } j \in \{1, \ldots N-1\} \tag{5}$$

De esta forma es posible construir un sistema de ecuaciones de $(N+1)^2$ ecuaciones para obtener $(N+1)^2$ valores de $p_{i,j}$. Al realizar un conteo de los valores de $p_{i,j}$, sin considerar los valores que entregan un voto nulo, se puede determinar si la moción es aprobada o rechazada dependiendo de si la mayoría de los valores son positivos o negativos, respectivamente.

Puntajes

10 puntos por establecer ecuaciones para todos los valores de $p_{i,j}$ del cuadrado.
5 puntos por indicar como determinar los valores de $p_{i,j}$.
5 puntos por explicar cómo se determinará si la moción es aceptada o rechazada.

(b) Considerar las siguientes expansiones de Taylor:

$$p(x \pm h, y) = p(x,y) \pm h\, p_x(x,y) + \frac{h^2}{2} p_{xx}(x,y) \pm \frac{h^3}{6} p_{xxx}(x,y) + \frac{h^4}{24} p_{xxxx}(c_1^{\pm}) \tag{6}$$

$$p(x, y \pm h) = p(x,y) \pm h\, p_y(x,y) + \frac{h^2}{2} p_{yy}(x,y) \pm \frac{h^3}{6} p_{yyy}(x,y) + \frac{h^4}{24} p_{yyyy}(c_2^{\pm}) \tag{7}$$

Reemplazando en la expresión del enunciado:

$$\begin{aligned}
\frac{p(x,y)}{h^2} &= \frac{p(x+h,y) + p(x-h,y) + p(x,y+h) + p(x,y-h)}{4\,h^2} \\
\frac{p(x,y)}{h^2} &= \frac{4\,p(x,y) + h^2\, p_{xx}(x,y) + h^2\, p_{yy}(x,y) + \mathcal{O}(h^4)}{4\,h^2}
\end{aligned}$$

Dividiendo por h^2 y reduciendo términos semejantes:

$$0 = p_{xx}(x,y) + p_{yy}(x,y) + \mathcal{O}(h^2)$$

En el límite cuando h tiende a 0 el término $\mathcal{O}(h^2)$ tiende a cero, por lo que el fenómeno queda descrito por la Ecuación de Laplace.

Un desarrollo alternativo consiste en reordenar términos en la expresión y utilizar las fórmulas de diferencias finitas, que también provienen desde expansiones de Taylor:

$$\begin{aligned}
\frac{p(x,y)}{h^2} &= \frac{p(x+h,y) + p(x-h,y) + p(x,y+h) + p(x,y-h)}{4\,h^2} \\
\frac{4\,p(x,y)}{h^2} &= \frac{p(x+h,y) + p(x-h,y) + p(x,y+h) + p(x,y-h)}{h^2} \\
0 &= \frac{p(x+h,y) + p(x-h,y) - 4\,p(x,y) + p(x,y+h) + p(x,y-h)}{h^2} \\
0 &= \frac{p(x+h,y) - 2\,p(x,y) + p(x-h,y) + p(x,y+h) - 2\,p(x,y) + p(x,y-h)}{h^2} \\
0 &= \frac{p(x+h,y) - 2\,p(x,y) + p(x-h,y)}{h^2} + \frac{p(x,y+h) - 2\,p(x,y) + p(x,y-h)}{h^2} \\
0 &= p_{xx}(x,y) + \mathcal{O}(h^2) + p_{yy}(x,y) + \mathcal{O}(h^2) \\
0 &= p_{xx}(x,y) + p_{yy}(x,y) + \mathcal{O}(h^2)
\end{aligned}$$

En el límite cuando h tiende a 0 el término $\mathcal{O}(h^2)$ tiende a cero, por lo que el fenómeno queda descrito por la Ecuación de Laplace.

Puntajes

4 puntos por utilizar expansiones de Taylor apropiadas.
2 puntos por reducir/reordenar términos.
4 puntos por concluir que en el límite cuando h tiende a 0, el fenómeno queda descrito por la Ecuación de Laplace.

3. Considere la discretización de Ω como $x_i = i\Delta x$ y $y_j = j\Delta y$ con $i, j \in \{0, \dots, m+1\}$ donde m es un parámetro. La estimación de u_{tt} en Ω puede obtenerse mediante diferencias finitas dado que se conoce $u_t(\Omega, t_k)$ y $u_t(\Omega, t_{k+1})$ como:

$$u_{tt}(\Omega, t_k) \approx \frac{u_t(\Omega, t_{k+1}) - u_t(\Omega, t_k)}{\Delta t} = f_{i,j}$$

Reemplazando con la discretización espacial en la ecuación de onda bidimensional se obtiene:

$$f_{i,j} = \frac{u(x_{i+1}, y_j, t_k) - 2\,u(x_i, y_j, t_k) + u(x_{i-1}, y_j, t_k)}{\Delta x^2} + \frac{u(x_i, y_{j+1}, t_k) - 2\,u(x_i, y_j, t_k) + u(x_i, y_{j-1}, t_k)}{\Delta y^2}$$

con $i, j \in \{1, \dots, m\}$Note que esto es, dado que se conoce u_{tt}, una ecuación de Laplace. Agrupando términos para establecer coeficientes para cada incógnita se obtiene:

$$f_{i,j} = \frac{1}{\Delta x^2} u_{i+1,j,k} + \frac{1}{\Delta x^2} u_{i-1,j,k} + \frac{1}{\Delta y^2} u_{i,j+1,k} + \frac{1}{\Delta x^2} u_{i,j-1,k} + \left(\frac{-2}{\Delta x^2} + \frac{-2}{\Delta y^2} \right) u_{i,j,k}$$

Reemplazando la condición de borde de Dirichlet, válida para todo tiempo, obtenemos las ecuaciones:

$$\begin{aligned} u_{0,j} = u_{1,j} = 0, &\quad \forall j \in \{0, \dots, m+1\} \\ u_{i,0} = u_{i,1} = 0, &\quad \forall i \in \{0, \dots, m+1\} \end{aligned}$$

Dado el paso previo de discretizar u_{tt} y el paso de discretizar la PDE, el algoritmo finaliza con resolver el sistema lineal asociado que tendrá la forma $A\mathbf{w} = \mathbf{b}$, donde $\mathbf{w}$ es el vector de incógnitas $u_{i,j}$, A es la matriz de coeficientes resultantes de la discretización y $\mathbf{b}$ es el vector de valores conocidos. El algoritmo retorna $\mathbf{w}$, como solución del sistema lineal y corresponde, luego de reestructurar el resultado a la estimación de $u(\Omega, t_k)$.

Puntajes

3 puntos por discretizar el dominio euclidiano.
6 puntos por aproximar mediante diferencias finitas $u_{tt}(t_k)$ con los datos dados y mostrar que se obtienen coeficientes que dependen de i y j.
6 puntos por aplicar el método de diferencias finitas a la ecuación de onda.
3 puntos por reordenar los coeficientes para obtener una expresión previa a la representación matricial.
3 puntos por discretizar condiciones de borde.
5 puntos por enunciar que el resultado de estas ecuaciones es un sistema lineal a resolver.
4 puntos por retornar y mostrar que el vector resultante es lo pedido.

4. **(a)** Las condiciones de borde se enuncian constantes, por lo que en primera instancia se escriben como:

$$\begin{aligned} \phi(0,t) &= \alpha \\ \phi(1,t) &= \beta \end{aligned}$$

Para ser consistentes con la distribución inicial de concentración de material además debe cumplirse que $\phi(0,0) = \sin(2\pi \cdot 0) = 0$ y $\phi(1,0) = \sin(2\pi \cdot 1) = 0$, luego $\alpha = \beta = 0$.

Puntajes

3 puntos por escribir ecuaciones de condiciones de borde.
2 punto por aplicar consistencia en los bordes ($\alpha = \beta = 0$)

(b) Ya que $D(x,t) > 0$ siempre, entonces se espera que la ecuación actúe en forma difusiva, por lo que $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ luego de un largo tiempo tenderá a 0, vale decir, se llegará a un estado estacionario. En este caso tendremos que la ley de Fick se escribirá de la forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \left(D(x,t) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = 0.$$

Puntajes

3 puntos por mencionar o escribir matemáticamente que $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ tiende a cero.
2 puntos por escribir la ley de Fick en el estado estacionario.

(c) La ecuación con $D(x,t) = \exp(-t)$ resulta así:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \exp(-t) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

Por ejemplo el método de forward difference para resolver el problema nos permite encontrar la ecuación relacionada en un punto. Discretizamos espacio y tiempo como $x_i = i\Delta x, i \in \{0, \dots, m+1\}$ y $t_j = j\Delta t, j \in \{0, \dots, n+1\}$, luego el método es aplicado:

$$\begin{aligned} w_{i,j+1} - w_{i,j} &= \sigma(t_j) \left(w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j} \right) \\ w_{i,j+1} &= \sigma(t_j) w_{i+1,j} + (1 - 2\sigma(t_j)) w_{i,j} + \sigma(t_j) w_{i-1,j} \end{aligned}$$

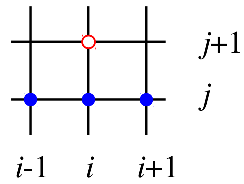

Figura 1: Stencil asociado al método de forward difference.

donde $\sigma(t) = \dfrac{\exp(-t)\Delta t}{\Delta x^2}$. El estencil asociado es según la figura a continuación: Las ventajas y desventajas dependen del método. En el caso de forward difference, se obtiene una representación explícita sobre la cual se puede iterar hasta un tiempo $T_{\text{máx}}$. El contra más importante es que la estabilidad del método (vale decir que se cumpla el comportamiento disipativo) depende de la elección de Δt y Δh.

Puntajes

2 puntos por reemplazar y escribir ecuación para un punto.
1 punto por dibujar estencil.
2 puntos por señalar ventajas y desventajas correctamente.

(d) Al haber dependencia de x para el coeficiente de difusión, la ley de Fick resulta así:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = C(x)\frac{\partial \phi}{\partial x} + D(x)\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \tag{8}$$

donde $C(x) = \dfrac{\mathrm{d}D(x)}{\mathrm{d}x}$. Llegamos a una ecuación de convección difusión. Nuevamente mediante forward difference y utilizando la misma definición de discretización del dominio aplicamos el método:

$$\begin{aligned} w_{i,j+1} - w_{i,j} &= \gamma(x_i)\left(w_{i+1,j} - w_{i,j}\right) + \sigma(x_i)\left(w_{i+1,j} - 2w_{i,j} + w_{i-1,j}\right) \\ w_{i,j+1} &= (\gamma(x_i) + \sigma(x_i))w_{i+1,j} + (1 - \gamma(x_i) - 2\sigma(x_i))w_{i,j} + \sigma(x_i)w_{i-1,j} \end{aligned}$$

donde $\gamma(x) = C(x)\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$ y $\sigma(x) = D(x)\dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$. El estencil es el mismo que en la pregunta anterior utilizando esta discretización. La ventaja de este método es nuevamente la representación explícita, no se necesita resolver un sistema de ecuaciones en cada paso. El contra de este enfoque es tanto la estabilidad del método así también como la elección de una estimación de derivada de primer orden, cuyo error es mayor que la diferencia centrada usada para la segunda derivada, por lo que el error global del método es $\mathcal{O}(\Delta t + \Delta x)$.

Puntajes

2 puntos por reemplazar y escribir ecuación para un punto.
1 punto por dibujar estencil.
2 puntos por señalar ventajas y desventajas correctamente.

(e) Se aplicará el método de forward difference. Reutilizando la discretización en respuestas anteriores, la ley de Fick queda como en la ecuación (8) con dependencia explícita del tiempo:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = C(x,t)\frac{\partial \phi}{\partial x} + D(x,t)\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \tag{9}$$

En la discretización aparecerán nuevamente coeficientes σ y γ que dependerán de x y t, discretizados como $\sigma_{i,j}$ y $\gamma_{i,j}$, tomando la idea de la discretización en **(d)** se obtiene:

$$w_{i,j+1} = (\gamma_{i,j} + \sigma_{i,j})w_{i+1,j} + (1 + \gamma_{i,j} + 2\sigma_{i,j})w_{i,j} + \sigma_{i,j}w_{i-1,j}$$

Por lo que el sistema matricial queda representado como:

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{m-1} \\ w_m \end{bmatrix}_{j+1} = \begin{bmatrix} 1+\gamma_1+2\sigma_1 & \gamma_1+\sigma_1 & & & \\ \sigma_2 & 1+\gamma_2+2\sigma_2 & \gamma_2+\sigma_2 & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & \sigma_{m-1} & 1+\gamma_{m-1}+2\sigma_{m-1} & \gamma_{m-1}+\sigma_{m-1} \\ & & \sigma_m & 1+\gamma_m+2\sigma_m \end{bmatrix}_j \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{m-1} \\ w_m \end{bmatrix}_j + \begin{bmatrix} \sigma_0 w_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sigma_{m+1}w_{m+1} \end{bmatrix}_j$$

Puntajes

1 punto por definir discretización.
2 puntos por escribir la ecuación desarrollando regla del producto.
2 punto por escribir ecuación general de forward difference.
5 puntos por escribir la forma matricial del sistema.