1 Preliminary Work

Background Theory Concepts

T1 [5%] Define each and point out the differences between the Finite Differences discretization method (Implicit, Crank-Nicholson) and the iterative solver (Jacobi, Gauss-Seidel), and how these collaborate.

El método implícito a diferencia de las Finite Diferences, que es un método explicito, utiliza valores del futuro para resolver un modelo físico mediante la discretización de las derivadas. En contraposición a esto está Crank-Nicholson, el que se trata de una media entre los valores generados mediante el método explícito y el implícito, encontrando así una aproximación más precisa.

En cuanto a Jacobi y Gauss Seidel, ambos son métodos iterativos para la resolución de ecuaciones, mientras que el primero, solo utiliza valores calculados con anterioridad para lograr encontrar el valor de las diferentes variables, el último utiliza valores tanto de la iteración pasada como de la misma iteración, dependiendo de si ya han sido calculados, logrando de esta forma una convergencia considerablemente más rápida.

De esta forma, debido a que tanto el método implícito como Crank-Nicholson generan un sistema de ecuaciones, ya que ambos poseen múltiples incógnitas en sus ecuaciones, al utilizar diferente valores de posición y tiempo, se pueden utilizar métodos de resolución de sistemas tales como Jacobi y Gauss Seidel, siendo este último el más conveniente con Crank-Nicholson debido a su rápida convergencia de resolución y mayor precisión con el método, además ambos utilizan valores del pasado y del presente.

T2 [5%]] List the Implicit and Crank-Nicolson's finite differences expressions for the second spatial derivative and the explicit finite difference expression for the first temporal derivative.

Implicit spacial derivate:

$$\frac{\partial^2 u_j^m}{\partial\ x^2} = \frac{u_{j-1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j+1}^{m+1}}{\Delta x^2}$$

Crank_nickolson's spacial derivate:

$$\frac{\partial^2 u_j^m}{\partial\ x^2} = \frac{u_{j-1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j+1}^{m+1}}{2*\Delta x^2} + \frac{u_{j-1}^{m} - 2u_j^{m} + u_{j+1}^{m}}{2*\Delta x^2}$$

Explicit temporal derivate:

$$\frac{\partial\ u_j^m}{\partial\ t} = \frac{u_j^{m+1} - u_j^m}{\Delta t}$$

T3[2 · 5%] Substitute the temporal (explicit) and the spatial (implicit and Crank-Nicolson, in separate equations) expressions found in T2 into the PDE under study, and rearrange the obtained equation as a system of linear equations.

Tip 1: Move to the left hand side (LHS) all terms that depend on the next time step (unknown variables) and to the RHS all terms that depend on the next previous steps (known value).

Tip 2: Once substituted, the linear equation is obtained by taking values of j.

Tip 3: Condense all constants in a single compound constant μ.

$$\frac{\partial\ u}{\partial\ t} = D\frac{\partial^2\ u}{\partial\ x^2} - Ku$$

Implicit spacial derivate:

$$\frac{u_j^{m+1} - u_j^m}{\Delta t} = D\frac{u_{j-1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j+1}^{m+1}}{\Delta x^2} - Ku_j^m$$

$$-\mu u_{j+1}^{m+1} + (1 + 2\mu + \rho)u_j^{m+1} - \mu u_{j-1}^{m+1} = u_j^m$$

$$\mu = D\frac{\Delta\ t}{\Delta x^2},\ \rho = K * \Delta t$$

Crank_nickolson's spacial derivate:

$$\frac{u_j^{m+1} - u_j^{m}}{\Delta t} = D * \left(\frac{u_{j-1}^{m+1} - 2u_j^{m+1} + u_{j+1}^{m+1}}{2*\Delta x^2} + \frac{u_{j-1}^{m} - 2u_j^{m} + u_{j+1}^{m}}{2*\Delta x^2} \right) -$$

$$-\mu u_{j+1}^{m+1} + (1 + 2\mu + \rho)u_j^{m+1} - \mu u_{j-1}^{m+1} = (1 - 2\mu)u_j^{m} + \mu u_{j-1}^{m} + \mu u_{j+}$$

$$\mu = D\frac{\Delta\ t}{2\Delta x^2},\ \rho = K * \Delta t$$

T4[5%] Iterative solvers are used to solve implicit PDE by iteratively approximating the next step in several intermediate steps until a convergence criterion is met. In this session, the Jacobi and Gauss-Seidel solvers will be employed. Write their general formulations.

Jacobi general formulation:

$$u_j^{(m+1),(n+1)} = \frac{bi - \Sigma_{j\neq i} a_{ij} u_j^{(m+1),(n)}}{a_{ii}}$$

Gauss-Seidel general formulation:

$$u_j^{(m+1),(n+1)} = \frac{bi - \Sigma_{j<i} a_{ij} u_j^{(m+1),(n)} - \Sigma_{j>i} a_{ij} u_j^{(m+1),(n)}}{a_{ii}}$$

T5 [4 · 2,5%] Given the above expressions:

(a) Identify the expressions for the different terms (aij , bi , etc.) for the Jacobi and GaussSeidel solvers. For each solver, find the expressions for the Implicit and Crank-Nicolson discretizations separately.

Implicit spacial derivate:

$$a_{ii} = (1 + 2\mu + \rho)\quad a_{ij} = -\mu \quad b_i = u_j^{m}$$

Crank_nickolson:

$$a_{ii} = (1 + 2\mu + \rho) \quad a_{ij} = -\mu$$

$$b_i = (1 - 2\mu)u_j^m + \mu u_{j-1}^m + \mu u_{j+1}^m$$

(b) Substitute these terms into the Jacobi and Gauss-Seidel expressions, obtaining the four update equations (Implicit+Jacobi, Implicit+Gauss-Seidel, Crank-Nicolson+Jacobi, CrankNicolson+Gauss-Seidel).

Implicit + Jacobi:

$$u_j^{(m+1),(n+1)} = \frac{u_j^m + \mu(u_{j+1}^{(m+1),(n)} + u_{j-1}^{(m+1),(n)})}{1+2\mu+\rho}$$

Implicit + Gauss-Seidel:

$$u_j^{(m+1),(n+1)} = \frac{u_j^m + \mu(u_{j+1}^{(m+1),(n)} + u_{j-1}^{(m+1),(n+1)})}{1+2\mu+\rho}$$

Crank_nickolsonuuuuuu + Jacobi:

$$u_j^{(m+1),(n+1)} = \frac{(1-2\mu)u_j^m + \mu u_{j-1}^m + \mu u_{j+1}^m + \mu(u_{j+1}^{(m+1),(n)} + u_{j-1}^{(m+1),(n)})}{1+2\mu+\rho}$$

Crank_nickolson + Gauss-Seidel:

$$u_j^{(m+1),(n+1)} = \frac{(1-2\mu)u_j^m + \mu u_{j-1}^m + \mu u_{j+1}^m + \mu(u_{j+1}^{(m+1),(n)} + u_{j-1}^{(m+1),(n+1)})}{1+2\mu+\rho}$$

T6[5%] The algorithm converges when the error between two consecutive iterations is small enough. However, a maximum number of iterations can be also set to stop the iterative solver. Write the stopping criteria expression, using the L2-norm as the || · || operator.

La norma L2 se utiliza para obtener la longitud de un vector en el espacio Eucldiano, y se computa con la siguiente expresión:

$$||x|| = \sqrt{\Sigma^n_{k=1}|x_k|^2}$$

En este modelo, la diferencia entre la norma L2 de dos iteraciones consecutivas debe ser inferior a un valor fijado previamente como error máximo permitido, expresado de la siguiente forma:

$$||u_j^{m+1} - u_j^{m}|| \; < \; X,$$

donde X es el valor atribuído al error máximo que permitiremos, es decir, a la diferencia máxima que permitiremos entre dos iteraciones consecutivas u_j^{m+1}y u_j^{m}.

Como hemos comprobado con el código, cambiar X, o el error máximo permitido, también llamado tolerancia en el programa, supondría una diferencia notable en el número de iteraciones. En el caso predeterminado podemos observar que al ejecutar el programa éste empieza a imprimir el número de iteraciones entre 18 y 16 aproximadamente, mientras que si cambiamos el error a 10^-5 observamos que imprime unas 11-7 iteraciones, lo cual implica que al aumentar la tolerancia se reduce el número de iteraciones, esto es debido a que cuanto menor sea el valor de la tolerancia más iteraciones serán necesarias para llegar a dicho error. En cambio, si anulamos la tolerancia, atribuyéndole -1, observamos que no se imprime ninguna iteración, ya que nunca se llega al stopping criteria.