## Mecánica computacional - Trabajo Práctico 1

FILARDI, Esteban; VICTORIO, Franco

1) Primero hacemos el desarrollo en serie de Taylor de los puntos que queremos utilizar:

$$u_{i-3} = u_i - 3hu'_i + \frac{9}{2}h^2u''_i - \frac{27}{6}h^3u'''_i + \frac{81}{24}h^4u_i^{(4)} + O(h^5)$$

$$u_{i-2} = u_i - 2hu'_i + \frac{4}{2}h^2u''_i - \frac{8}{6}h^3u'''_i + \frac{16}{24}h^4u_i^{(4)} + O(h^5)$$

$$u_{i-1} = u_i - hu'_i + \frac{1}{2}h^2u''_i - \frac{1}{6}h^3u'''_i + \frac{1}{24}h^4u_i^{(4)} + O(h^5)$$

$$u_{i+1} = u_i + hu'_i + \frac{1}{2}h^2u''_i + \frac{1}{6}h^3u'''_i + \frac{1}{24}h^4u_i^{(4)} + O(h^5)$$

Queremos aproximar la segunda derivada mediante la fórmula dada. Si expandemos ésta obtenemos:

$$au_{i-3} + bu_{i-2} + cu_{i-1} + du_i + eu_{i+1} = (a+b+c+d+e)u_i + h(-3a-2b-c+e)u_i'$$

$$+ \frac{h^2}{2}(9a+4b+c+e)u_i'' + \frac{h^3}{6}(-27a-8b-c+e)u_i'''$$

$$+ \frac{h^4}{24}(81a+16b+c+e)u_i^{(4)} + O(h^5)$$

Si igualamos este resultado a  $\frac{h^2}{2}u_i''+O(h^5)$  obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -3 & -2 & -1 & 0 & 1 \\ 9 & 4 & 1 & 0 & 1 \\ -27 & -8 & -1 & 0 & 1 \\ 81 & 16 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La solución de este sistema es:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{24} \\ \frac{1}{6} \\ \frac{1}{4} \\ -\frac{5}{6} \\ \frac{11}{24} \end{pmatrix}$$

Reemplazando obtenemos:

$$-\frac{1}{24}u_{i-3} + \frac{1}{6}u_{i-2} + \frac{1}{4}u_{i-1} - \frac{5}{6}u_i + \frac{11}{24}u_{i+1} = \frac{h^2}{2}u_i'' + O(h^5)$$

Que puede reescribirse como:

$$\frac{-u_{i-3} + 4u_{i-2} + 6u_{i-1} - 20u_i + 11u_{i+1}}{12h^2} = u_i'' + O(h^3)$$

2) El problema de conducción de calor en 1D se expresa como:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + k\Delta T + c(T - T_{amb}) + Q = 0 \qquad 0 < x < L$$

El término  $\frac{\partial T}{\partial t}$  se anula al tratarse del caso estacionario. Considerando esto y los valores dados para las constantes, el problema puede reescribirse como:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + T = 4\left(x - \frac{1}{2}\right)^2 - 1 \qquad 0 < x < 1$$

Utilizando el método de diferencias finitas y haciendo las siguientes aproximaciones:

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_i \approx \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2h},$$

donde h es el paso de la malla (uniforme) utilizada, se obtienen los siguientes resultados para distintos N (cantidad de segmentos en la malla:  $N = \frac{1}{h}$ ):

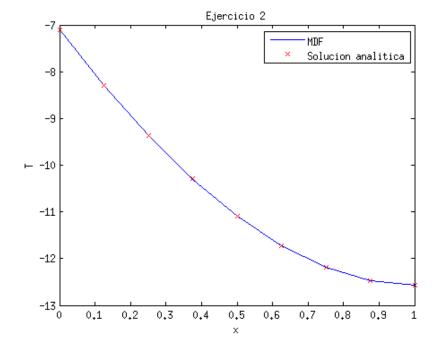
N	Error	Proporción mejora
2	0.0105	
4	0.0022	4.6903
8	5.1638e-04	4.3316
16	1.2390e-04	4.1678
32	3.0328e-05	4.0852
64	7.5012e-06	4.0431
128	1.8652e-06	4.0217
256	4.6503e-07	4.0109
512	1.1610e-07	4.0054
1024	2.9007e-08	4.0025
2048	7.2540e-09	3.9988

El error se obtuvo dividiendo la norma euclídea de la diferencia entre la aproximación y la solución exacta por la norma euclídea de la solución exacta:

$$error = \frac{\left|\left|x_{aprox} - x_{exacta}\right|\right|_{2}}{\left|\left|x_{exacta}\right|\right|_{2}}$$

En la tabla puede apreciarse cómo la solución es aproximadamente cuatro veces mejor cuando se duplica el número de intervalos. (Supongo que el hecho de que esta proporción vaya disminuyendo se debe a que a mayor número de intervalos hay mayor error numérico.)

Para el caso N=8, la gráfica del resultado es:

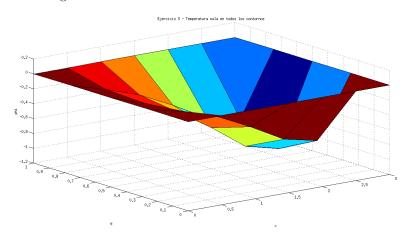


3) a) Utilizando diferencias finitas y las aproximaciones:

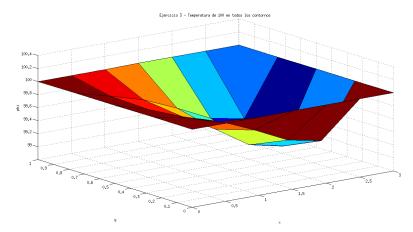
$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{l,m} \approx \frac{\phi_{l-1,m} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l+1,m}}{dx^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_{l,m} \approx \frac{\phi_{l,m-1} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l,m+1}}{dx^2}$$

se obtiene la siguiente solución:

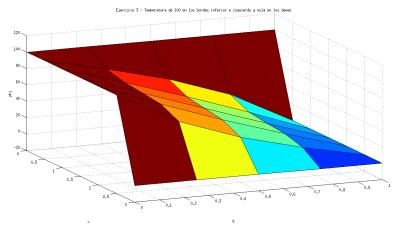


b) El inciso anterior correspondía al caso en que se impone una temperatura nula en todos los bordes. Si en cambio se impone una temperatura  $\bar{T}=100$  se obtiene:

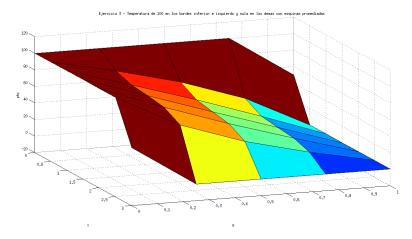


Puede apreciarse que la solución tiene la misma forma que en el inciso anterior, excepto porque toda la superficie está aumentada en 100 en el eje  $\phi$ .

Se pueden combinar los problemas imponiendo, por ejemplo, una temperatura de 100 en el borde inferior y en el izquierdo y una temperatura nula en el borde superior y en el derecho:



En este caso puede apreciarse claramente que en las esquinas una de las condiciones tiene prioridad. Si esto es un problema, una posible solución es promediar ambas condiciones (si son del mismo tipo). Haciendo esto el resultado obtenido es:



c) Para tratar con las condiciones de flujo se utilizaron las siguientes aproximaciones:

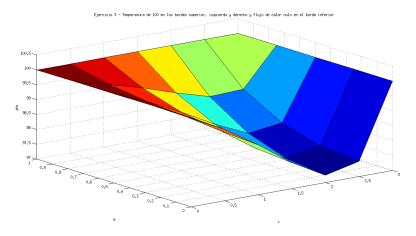
$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{l,m} \approx \frac{3\phi_{l,m} - 4\phi_{l-1,m} + \phi_{l-2,m}}{2dx}$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{l,m} \approx \frac{-3\phi_{l,m} + 4\phi_{l+1,m} - \phi_{l+2,m}}{2dx}$$

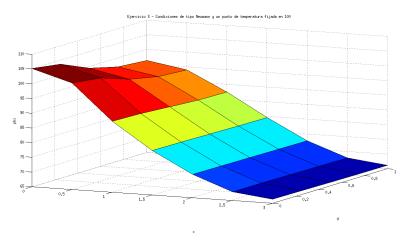
(Aproximaciones análogas se usan para  $\frac{\partial \phi}{\partial y}$ ).

El uso de una u otra aproximación depende de si se necesita usar puntos que están "adelante" o "atrás" del punto donde se está evaluando la derivada.

Si ahora se impone una temperatura de 100 en los bordes superior, izquierdo y derecho y un flujo de calor nulo en el contorno inferior, el resultado es:



Para este problema, utilizar sólo condiciones de tipo Neumann causa una indeterminación que, en el método, se traduce en una matriz singular (no invertible). Si se usan sólo condiciones de flujo nulo pero se fija la temperatura para un punto que no esté en una esquina, entonces se puede obtener un resultado. Fijando la temperatura del punto (0.5;0.25) en 100 el resultado es:



(Si se fija la temperatura de un punto que esté en una esquina, se sigue obteniendo una matriz singular, no sé por qué.)

4) Como se trata de una malla no uniforme, necesitamos aproximar las derivadas

de otra manera. Si se quiere obtener la derivada primera para el punto  $x_i$ , cuyos puntos vecinos a izquierda y derecha están a una distancia de  $h_-$  y  $h_+$ , respectivamente, se plantea primero el desarrollo en serie de Taylor de los puntos vecinos:

$$\phi_{i+1} = \phi_i + h_+ \phi_i' + O(h_+^2)$$

$$\phi_{i-1} = \phi_i - h_- \phi_i' + O(h_-^2)$$

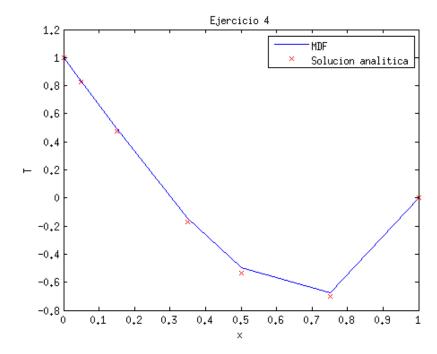
Y despejando la derivada:

$$\phi_i' \approx \frac{\phi_{i-1} + \phi_{i+1}}{h_- + h_+}$$

Haciendo algo análogo para la segunda derivada se obtiene:

$$\phi_i'' \approx \frac{2}{h_+(h_+ + h_-)} \phi_{i+1} - \frac{2}{h_-h_+} \phi_i + \frac{2}{h_-(h_+ + h_-)} \phi_{i-1}$$

El resultado de aplicar estas aproximaciones puede apreciarse en la siguiente gráfica:



Utilizando mallas con menores separaciones, pero manteniendo la relación de distancias (interpolación lineal), se obtienen los siguientes resultados:

N	Error	Proporción mejora
7	0.0365	
13	0.0094	3.8766
25	0.0024	3.9098
49	6.1014e-04	3.9484
97	1.5358e-04	3.9726
193	3.8532e-05	3.9859
385	9.6502e-06	3.9929
769	2.4147e-06	3.9964
1537	6.0395e-07	3.9982
3073	1.5100e-07	3.9995

Nuevamente, al (casi) duplicarse el número de nodos, el error disminuye casi cuatro veces. Sin embargo, a diferencia del ejercicio 2, la proporción de mejora aumenta al aumentar el número de nodos.

5) En los videos adjuntos explicito.avi, implicito.avi y cn.avi se pueden ver los resultados de resolver este problema con los métodos de forward Euler, backward Euler y Crank-Nicholson, respectivamente. Se obtuvo el primer segundo y se usó  $\Delta t = 0.01$ .

Los resultados son casi indistinguibles, pero al hacerlos se apreciaron algunas diferencias importantes entre los métodos.

El método de forward Euler no converge para cualquier paso de tiempo (ya con  $\Delta t = 0.05$  hay divergencia). El de backward Euler llega al mismo resultado independientemente del paso del tiempo. El método de Crank-Nicholson, si bien llega al resultado para pasos de tiempo con los que el de forward Euler no lo hace, no parece admitir pasos de tiempo arbitrariamente grandes. Para, por ejemplo, un paso de  $\Delta t = 1$ , y simulando los primeros cincuenta segundos, el resultado alterna entre la solución correcta y una muy distinta.

En cuanto al tiempo, el primero demora 0.99 segundos, el segundo 3.48 y el tercero 3.54 (y, aunque no es necesario, se implementó el método de forward Euler con una inversión de matriz al igual que los otros, así que es de esperar que sea significativamente mayor la diferencia de tiempos entre éste y los otros dos métodos si se lo implementa sin usar una matriz).