







Universidad Politécnica de Madrid Escuela Técnica Superior de Ingeniería Aeronáutica y del Espacio Máster Universitario en Sistemas Espaciales

Milestone 3

Ampliación de Matemáticas I

23 de octubre de 2022

Autor:

Sergio de Ávila Cabral

Índice

1.	Introducción	1
2.	Descripción de módulos nuevos o modificados	1
	2.1. Milestone_3.py	1
	2.2. Richarson.py	4
	2.3. Jab_Newt.py	6
	2.4. Plots.py	7
3.	Resultados	10
	3.1. Error de los esquemas numéricos	10
	3.2 Ratio de convergencia	19

1. Introducción

La programación del *Milestone 3* se ha realizado siguiendo la metodología adoptada en el anterior *Milestone*, la metodología *Top-Down*. Se han empleado los siguientes módulos existentes:

- Physics.py: Incluye la física del problema a resolver. Se encuentra en *Sources/Problems*.
- Temporal_Schemes.py: Se incluyen los diferentes esquemas numéricos. Se localiza en Sources/ODES.
- Cauchy_Problem.py: En el se encuentra la definición del problema de Cauchy, cuya localización coincide con la de Temporal Schemes.py.
- Jab_Newt.py: En el se encuentra la integración numérica de Newton junto con el Jacobiano. Se localiza en el mismo path que las dos anteriores.
- Plots.py: se encarga de graficar las soluciones de los problemas de Cauchy. Se localiza en Sources/Graf.

Y se ha definido los siguientes nuevos módulos:

- Milestone_3.py: Actúa como main y se encuentra en la misma carpeta Sources. En él se encuentran importados todos los módulos. A su vez, se definen: las condiciones iniciales del problema, las iteraciones, diccionarios y las llamadas a las funciones que determinan el error, la convergencia y el orden de los esquemas empleados.
- Richarson.py: En el se encuentran las dos nuevas funciones, objetivo principal de este *Milestone*: determinación del error mediante *Richarson* y la determinación del orden de los esquemas mediante el ratio de convergencia. Se localiza en *Sources/Error*.

2. Descripción de módulos nuevos o modificados

En este apartado se realizará una descripción de los módulos que han sido programados a raíz de este *Milestone* o hayan sufrido algún tipo de modificación.

2.1. Milestone 3.py

Como se ha descrito en la Sección 1, actual como *main*. En el se pueden apreciar diferentes secciones a lo largo del mismo:

Entre las librerías empleadas se encuentran las nuevas librerías *Richarson*, la cual será descrita más adelante, y *alibre progress*, la cual permite implementar una barra de progreso

para conocer el estado actual de los cálculos y el tiempo que conllevan.

Listing 2.1: Librerías

Tras las librerías empleadas se encuentra la inicialización de las condiciones iniciales. A diferencia de los anteriores Milestone, se define el tiempo T y los Δt deseados, que definirán los N que se emplearán.

```
1 #Initial Conditions
2 r0 = [1,0]
3 v0 = [0,1]
4 U0 = r0 + v0
5 T = 100
6 dt = [0.1, 0.01, 0.001]
```

Listing 2.2: Condiciones iniciales

A continuación, se mantiene el boolean que permite elegir si los plots se guardan o solo se muestran.

```
#Save Plots
Save = False # True Save the plots / False show the plots
```

Listing 2.3: selección guardado

Tras ello se definen las listas que contienen los diferentes esquemas numéricos.

```
#Temporal_Schemes to use
T_S = [Euler, RK4, Crank_Nicolson, Inverse_Euler]
T_S_plot = ["Euler", "RK4", "CN", 'Euler_inver']
```

Listing 2.4: Esquemas temporales

Se inicializan los diccionarios que se emplearán para el almacenamiento de los datos junto con la lista de los N que se emplearán.

```
#Initiation of Dictionaries
Er_dic = { }
t_dic = { }
N = zeros((len(dt)))
```

Listing 2.5: Inicialización de diccionarios

Se calculan las iteraciones necesarias junto con los tiempos que se emplearán en los cálculos. Como se puede observar, se ha realizado un bucle donde se calculan las iteraciones $(N = \frac{T}{\Delta t})$ y se continua con definiendo los tiempos con un equiespaciado.

Puesto que se definen diferentes *linspace* con diferentes dimensiones, se introducen de forma dinámica en el diccionario, creando nuevas *Keys* que serán empleadas posteriormente.

Listing 2.6: definición tiempos e iteraciones

Por último, para la realización de los diferentes cálculos encomendados se encuentra en primer lugar la asignación de la librería *alive_bar* como *bar*, la cual, como ya se ha mencionado, permite conocer el progreso de los cálculos. Para el cálculo del error, interesa dicha función cuando se realiza el error para varios esquemas o para varios tiempos, si se implementa.

Tras el cálculo del error se encuentra el cálculo del ratio de convergencia. Adelantando a lo que acontecerá en la descripción de la función *Convergence_rate*, se observa que devuelve tres variables: dos logaritmos y regress. Este último es un objeto que contiene toda la información de la regresión lineal (pendiente, interceptación en el eje y, el coeficiente de determinación, etc).

En ambos bucles se puede observar el empleo de funciones Plot, que serán comentadas en la Subsección 2.4. Por último, al igual que en el $Milestone\ 2$, se definen nuevos Keys de forma dinámica. Como se puede apreciar, las Keys de ambos diccionarios están sincronizados, simplificando la programación de los plots.

```
for x in t_dic:
    log_Er, log_N, regress = Convergence_rate(U0, t_dic[x], ...

Kepler, T_S[j], C_P)
print( '\n' +T_S_plot[j] + ' Calculado \n')
plt.Plot_Conv_Rat(log_N, log_Er, T, dt[int(x)], ...
regress, T_S_plot[j], Save)
```

Listing 2.7: cálculo de error y ratio de convergencia

2.2. Richarson.py

Como se ha descrito en la Sección 1, en este nuevo módulo se integran el cálculo del error y el ratio de convergencia, del cual se obtendrá el orden del esquema empleado. Para este cometido se emplean las librerías que se pueden ver a continuación. Entre ellas, se aprecia la ya mencionada librería alivre_progress y el empleo de linregress de Scipy.

```
from numpy import array, linspace, zeros, size, shape, log10
from numpy.linalg import norm
from alive_progress import alive_bar #to see the progress of the computations
from scipy.stats import linregress
```

Listing 2.8: librerías para Richarson.py

Función Richarson

Se sigue de la función Richarson, la cual calcula el error cometido por un método numérico sin conocer la solución exacta. En estas líneas se puede observar una primera definición del tiempo, obtenida del libro "How to learn Applied Mathematics through modern FOR-TRAN". Tras este, se comprobó que, tal como se comentó en clase, es más sencillo duplicar el número de equiespaciados con un linspace donde el tiempo se puede obtener de la última componente de t_1 . Tras ello se calculan U_1 y U_2 , y se procede al cálculo del error.

```
def Richarson(U0, t1, F, T_S, problem, order):
2
      N = size(t1) - 1 #Because of the divisons of the time's linspace (
3
     Python begin at 0)
4
      ## Definition of t2 according to the book
      # for i in range(N): # 0 to N-1
6
            t2[2*i] = t1[i]
            t2[2*i + 1] = (t1[i] + t1[i+1]) / 2
9
      # t2[2*N] = t1[N]
10
      t2 = linspace(0, t1[-1], 2*size(t1))
12
      Er = zeros((len(U0), N+1))
13
```

```
14
15
16
17     U1 = problem(F, t1, U0, T_S)
18     U2 = problem(F, t2, U0, T_S)
19
20     for i in range(N):
21         Er[:, i] = ( U2[:, 2*i] - U1[:,i] ) / ( 1 - 1 / 2**order )
22
23     return Er
```

Listing 2.9: Función Richarson

Convergence rate

Para esta función, en un primer momento se pensó que era necesario la definición de dos variables de iteración, de ahí la creación de la variable Nt2. Esto se debía a la necesidad de refinamiento de la malla, siendo esta realizada en la línea 15 y la necesidad de definir arrays; pero esto no era así. Cabe destacar el empleo de la librería $alive_bar$ para el seguimiento de los m puntos calculados. De igual modo, es de gran importancia las variables de salida, con especial importancia regress. Esta variable es un objeto que contiene toda la información de obtenida de la regresión lineal realizada mediante linregress.

```
def Convergence_rate(U0, t1, F, T_S, problem):
2
      m = 10 #number of points
3
      # N = size(t1) - 1 Not necesarry
4
      Nt2 = size(t1)
      U1= problem(F, t1, U0, T_S)
6
      log_Er = zeros(m); log_N = zeros(m)
      U2 = zeros( shape(U1) )
      with alive_bar(m) as bar:
12
13
          for i in range(m):
               Nt2 = 2*Nt2
14
               t2 = linspace(0, t1[-1], Nt2) #t[-1] return the last value of
     the vector or list
               U2 = problem(F, t2, U0, T_S)
16
               log_Er[i] = log10(norm( U2[:, -1] - U1[:, -1] ) )
17
               log_N[i] = log_10(Nt_2)
18
               t1 = t2
19
               U1 = U2
20
               bar()
21
22
23
      regress = linregress(log_N, log_Er) #Its's a object with all the
     information
24
      return log_Er, log_N, regress
25
```

Listing 2.10: Función Convergence rate

2.3. Jab_Newt.py

A este módulo se le ha agregado tres funciones para realizar la factorización LU y la integración por el método de Newton sin emplear ninguna librería.

Se han definido la función factorización LU, la cual se han empleado dos formas. La primera de ellas resultó ser no funcional en Python. Esta función ha sido extraída del libro "How to learn Applied Mathematics through modern FORTRAN". Tras ello, se decidió comparar con otras metodologías visualizadas por internet, como separar el cálculo de las matrices L y U, y juntar dichas matrices. Dada la no optimización de estas funciones, los resultados poseen un gran error, como se puede apreciar en la Figura 3.8.

```
def LU(A):
      N = size(A,1)
2
      A[1:N,O] = A[1:N,1] / A[O,O]
3
      for k in range (1,N):
          for j in range(k,N):
6
               A[k,j] = A[k,j] - dot(A[k, 1:k-1], A[1:k-1, j])
      for i in range(k+1,N):
9
           A[i,k] = (A[i,k] - dot(A[0:k,k], A[i,0:k])) / (A[k,k])
      return A
12
13
14
```

Listing 2.11: Factorización LU no funcional

```
def LU(A):
2
    N = size(A,1)
    U = zeros([N,N])
3
    L = zeros([N,N])
    U[0,:] = A[0,:]
6
    for k in range(0,N):
      L[k,k] = 1
    L[1:N,O] = A[1:N,O]/U[O,O]
10
11
12
13
    for k in range(1,N):
14
      for j in range(k,N):
        U[k,j] = A[k,j] - dot(L[k,0:k], U[0:k,j])
16
17
      for i in range(k+1,N):
18
        L[i,k] = (A[i,k] - dot(U[0:k,k], L[i,0:k])) / (U[k,k])
19
```

```
20
    return L@U
21
22
  def GAUSS(A,b):
23
24
      x = zeros(size(b))
25
      y = zeros(size(b))
27
      A = LU(A)
28
      y[0] = b[0]
29
30
      for i in range(size(b)):
31
           y[i] = b[i] - dot(A[i,0:i], y[0:i])
32
      x[size(b)-1] = y[size(b)-1] / A[size(b)-1,size(b)-1]
34
35
      for i in range(size(b)-2, -1, -1):
36
           x[i] = ((y[i] - dot(A[i, i+1:size(b)+1], x[i+1:size(b)+1])) / A[i]
37
      ,i])
38
      return x
39
40
      Inversa(A):
41
42
      B = zeros([size(A,1), size(A,1)])
43
44
      for i in range(size(A,1)):
45
46
           a = zeros(size(A,1))
47
           a[i] = 1
48
49
           B[:,i] = GAUSS(A, a)
50
51
       return B
52
53
```

Listing 2.12: Factorización e inversa

2.4. Plots.py

El módulo Plots.py ha sufrido dos variaciones importantes: la creación de una función $Save_plot$ y la creación de tres funciones nuevas: dos para graficar, separados y juntos, los errores de los esquemas numéricos y otro para el ratio de convergencia y la regresión lineal.

Save_plot

Se ha procedido a desarrollar esta función para cumplir con la metodología explicada en clase, siendo llamada esta función por todas las funciones *Plot*, en vez de ser parte de su propio código. No incorpora ninguna novedad en su código.

```
def Save_plot(Save, file):
2
      if not Save:
3
          plt.show()
4
      else:
6
          ##Save Plots
          path = os.path.join(os.getcwd(), 'Plots')
9
          if not os.path.exists(path):
               os.makedirs(path)
13
          plt.savefig(os.path.join(path,file))
14
```

Listing 2.13: función Save plot

En las siguientes funciones se podrá observar como se llama a esta función para proceder, o no, al guardado de las figuras.

Plot_Er y Plot_Er_compare

Sin gran novedad, se desarrolla la función $Plot_Er$, programada de igual modo que las descritas en el Milestone~2, a excepción de la imposición de colores para las funciones graficadas.

Para la función $Plot_Er_compare$ se puede observar, como novedad, la creación de dos gráficas en el mismo plot. De este modo se puede comparar los errores cometidos para diferentes Δt . Se observa una lista colors, la cual está concebida para definir los mismos colores en ambas gráficas para un mismo Δt . Destacar que, dado que en el bucle se recorre un string, se hace necesario convertirlo a un número entero. Esto es posible dados los nombre impuestos a las Keys de los diccionarios, los cuales son números pero en formato string.

```
def Plot_Er(Er,t, T, dt, T_S, Save):
      fig, ax = plt.subplots(figsize = (10, 10))
      ax.plot(t, Er[0,:], color = 'b', label = 'Er_x')
3
      ax.plot(t, Er[1,:], color = 'r', label = 'Er_y')
4
      ax.set_xlabel('t')
5
      ax.set_ylabel('Er')
6
      ax.set_title(T_S + 'dt = ' + str(dt) + 'T = ' + str(T))
      ax.legend()
9
      file = T_S + "_dt_" + str(dt) + '_T_' + str(T) + ".png"
10
      Save_plot(Save, file)
11
12
  def Plot_Er_compare(Er,t, T, dt, T_S, Save):
13
      fig, (ax, ay, az) = plt.subplots(3,1,figsize=(15, 15))
14
      colors = ['r','b','g']
      for i in t:
16
          Er_n = sqrt(Er[i][0,:]**2 + Er[i][1,:]**2)
```

```
ax.plot(t[i],Er[i][0,:], color = colors[int(i)], label= T_S + "
18
     dt " + str(dt[int(i)]))
          ay.plot(t[i],Er[i][1,:], color = colors[int(i)], label= T_S + "
     dt " + str(dt[int(i)]))
          az.plot(t[i],Er_n, color = colors[int(i)], label = 'Norm' + " dt
20
     " + str(dt[int(i)]))
      ax.set_xlabel('t')
      ax.set_ylabel('Er_x')
22
      ay.set_xlabel('t')
23
      ay.set_ylabel('Er_y')
24
      az.set_xlabel('t')
25
      az.set_ylabel('Er_norm')
26
      ax.set_title(T_S + 'Er' + 'T = '+str(T))
27
      ax.legend()
      ay.legend()
29
      az.legend()
30
31
      file = T_S + '_comprare_T' + str(T) + ".png"
32
      Save_plot(Save, file)
33
34
```

Listing 2.14: funciones Plot Er y Plot Er compare

Plot Conv Rat

Sin gran variedad con lo descrito hasta ahora, se define esta función para poder graficar el ratio de convergencia y la regresión lineal. Como se comentó anteriormente, la variable regress es un objeto que contiene toda la información de la regresión lineal. De este modo, con una sola variable se puede importar la función de regresión lineal ($regress.intercept + regress.slope\dot{x}$), el orden (textitabs(regress.slope)) y el coeficiente de determinación, R^2 (regress.rvalue).

```
def Plot_Conv_Rat(x, y, T, dt, regress, T_S, Save):
      fig, ax = plt.subplots(figsize = (10, 10))
      ax.plot(x,y, color = 'b', label = 'Numerical results')
3
      ax.plot(x, regress.intercept + regress.slope*x, '--', color = 'r',
     label = 'linear regression')
      ax.set_xlabel('Log_N')
      ax.set_ylabel('Log_Er')
6
      ax.set_title(T_S + ': T = ' + str(T) + ', dt = ' + str(dt) + '. R^2 =
7
     ' + str(round(regress.rvalue**2,3)) + ' & Order = ' + str(round(abs(
     regress.slope),3)))
      ax.legend()
      file = T_S +'_dt_'+ str(dt) +'_conver' + ".png"
10
      Save_plot(Save, file)
```

Listing 2.15: función Plot Conv Rat

3. Resultados

En esta sección se expondrán los resultados obtenidos mediante el código ya expuesto en los anteriores *Milestones* y el detallado en este informe.

3.1. Error de los esquemas numéricos

Euler

Como ya se ha podido ver en anteriores informes, el método de Euler conlleva un gran error acumulativo (Figura 3.1d). En el caso de $\Delta t=0,1$ se aprecia un sincronismo del error hasta T=60, donde se rompe, ocasionando la divergencia de la solución. Para el resto de casos, se aprecia el mismo sincronismo pero sin la rotura del mismo. Para el caso de la Figura 3.1c, se observa una reducción del error a partir T=80. Esto es un ciclo, donde disminuye el error para luego alcanzar un mayor máximo y siendo estos ciclos menores en tiempo, como se puede apreciar en la 3.1e.

Runge-Kutta orden 4

Como bien se conoce, el esquema de Runge-Kutta de orden 4 obtiene resultados con un bajo error en el proceso de computación. Como se puede observar en las Figuras 3.4, donde el error varía de forma lineal con Δt , estando entre $Er \approx 0.04 - 0.004$, como se puede observar en la Figura 3.4.

Crank-Nicolson

Crank-Nicolson obtiene resultados con una precisión muy similar al de Runge-Kutta de orden 4, con una divergencia del error similar a la mostrada en las Figuras 3.3. Comparando las Figuras 3.4 y 3.6 se observa que C-N obtiene, para un mismo tiempo, un error menor.

Euler inverso

Por último, se encuentra el esquema implícito Euler inverso. En este caso, para $\Delta t = 0.1$ el error diverge para tiempos muy cercanos al inicio, no obteniéndose ningún resultado adecuado debido a ese alto error.

Para $\Delta t = 0.01 - 0.001$ se obtienen resultados dada la no brusca divergencia del error. Para el caso $\Delta t = 0.01$, se observa que para valores del tiempo entorno a 40 el error se anula. Esto se debe porque para una valor de $\Delta t = 0.01$ se produce una espiral hasta el valor 0, como se puede observar en la Figura 3.7d, lugar donde la solución converge, anulando de dicho modo el error.

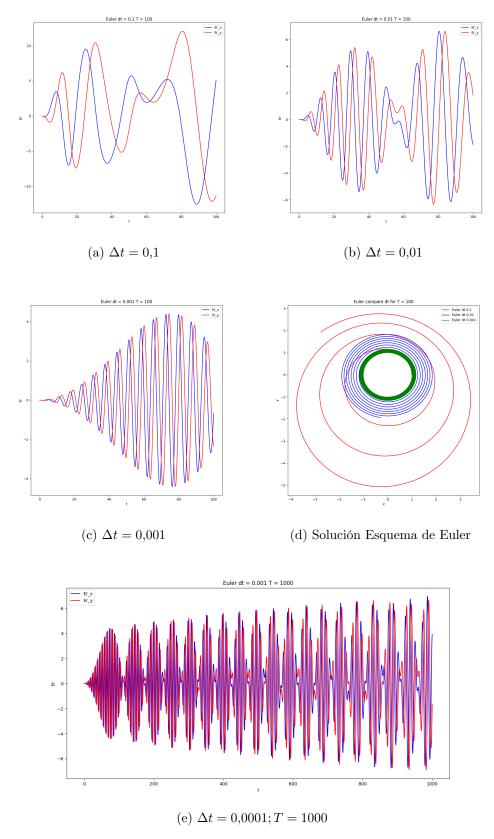


Figura 3.1: Error y solución esquema de Euler

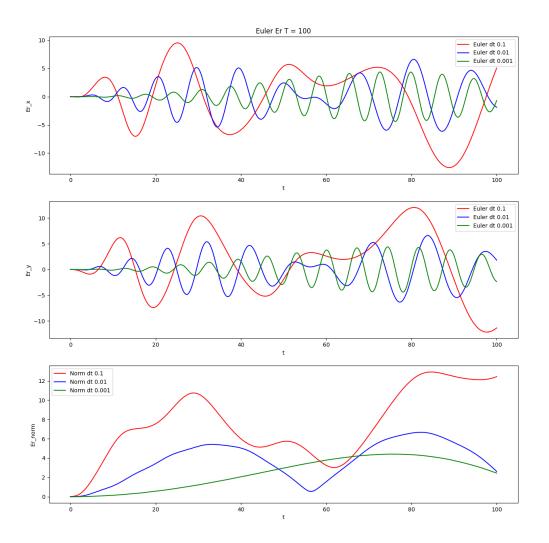


Figura 3.2: Comparación errores Euler para los diferentes Δt

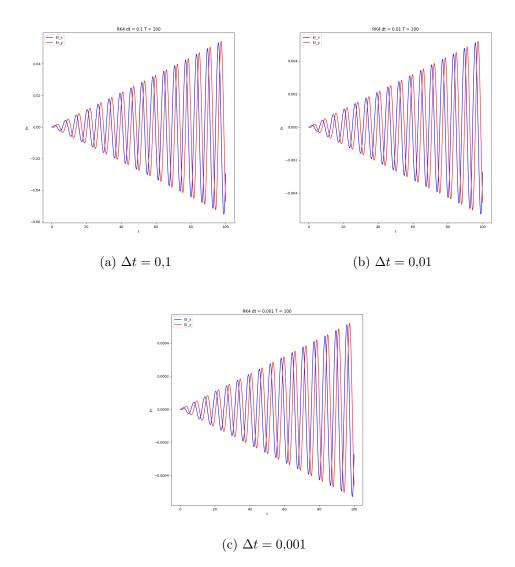


Figura 3.3: Error y solución esquema $\rm RK4$

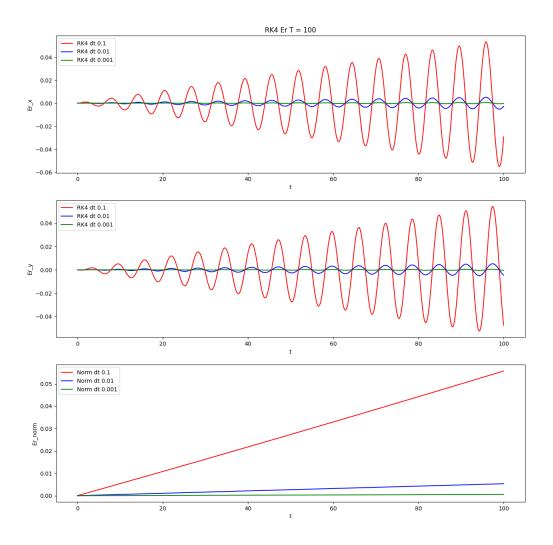


Figura 3.4: Comparación errores RK4 para los diferentes Δt

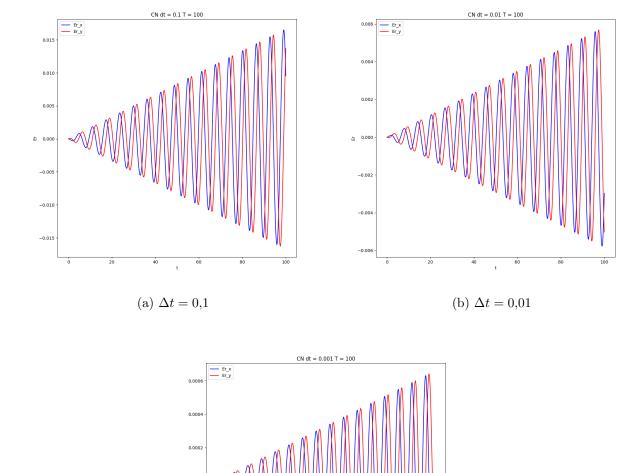


Figura 3.5: Error y soluciones esquema C-N

(c) $\Delta t = 0.001$

-0.0004

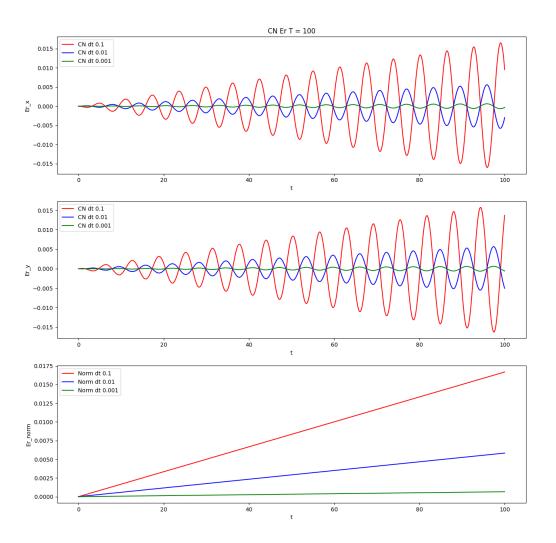


Figura 3.6: Comparación errores C-N para los diferentes Δt

Como se puede apreciar en la Figura3.7d,

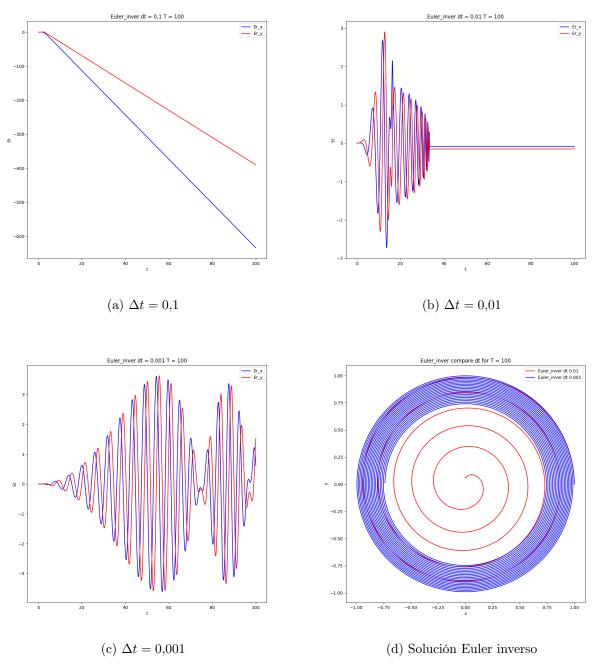


Figura 3.7: Error y soluciones esquema Euler inverso

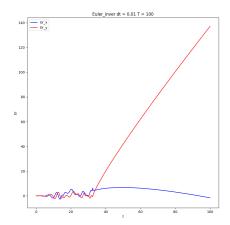


Figura 3.8: Error de Euler inverso integrado mediante la integración de Newton

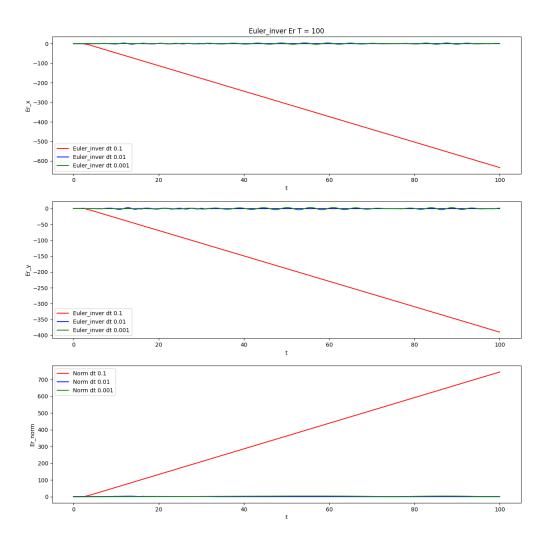


Figura 3.9: Comparación errores Euler inverso para los diferentes Δt

3.2. Ratio de convergencia

Por último, se detallan los resultados de los ratios de convergencia y la estimación del orden de los diferentes esquemas numéricos empleados. Dicha estimación se ha realizado mediante una regresión linea. También se podría haber realizado con la función scipy optimize curve fit.

Las siguientes convergencias han sido calculadas para T=10 segundos y $\Delta t=0,1-0,001$, a excepción de Runge-Kutta de orden 4. Del mismo modo, recordar que el valor del número de iteraciones (N) es inversamente proporcional a Δt , pues:

$$N = \frac{T}{\Delta t}$$

Cabe destacar el gran tiempo de procesamiento de los datos mostrados a continuación, pues se debe refinar la malla las veces necesarios hasta la convergencia del esquema numérico.

Euler

Comenzando con el esquema de Euler, se observa que para un $\Delta t = 0.001$ ya se obtiene una buena convergencia, con un orden aproximado a 1. Como se puede apreciar en las Figura 3.11, el número de iteraciones es muy elevado para este esquema numérico.

Runge-Kutta de orden 4

En el caso de la convergencia para Runge-Kutta, se observa que para el valor preestablecido de $\Delta t=0.1$ ya se ha realizado la convergencia, lo por cual, se necesita un número menor de iteraciones, tal y como se puede apreciar en las Figuras 3.11a y 3.11b. Para los casos mostrados en las Figuras 3.11c y 3.11d,se observan error de precisión de máquina, pues son menores de 10^{-12} . Con este esquema y el esquema de Crank-Nicolson se obtienen los resultados con menor error.

Crank-Nicolson

En el caso de este esquema numérico, los resultados convergen para $\Delta t = 0.01$ ya se obtiene una buena convergencia. En comparación con Runge-Kutta de orden 4, para una precisión similar, tiene una convergencia más lenta, como se puede apreciar en la Figura 3.12.

Euler inverso

Por último, en el esquema de Euler inverso, se puede apreciar, del mismo que en el Esquema de Euler, una convergencia a partir de valores de $\Delta t = 0,001$, lo que implica un mayor número de iteraciones necesarias, como se puede observar en la Figura 3.13.

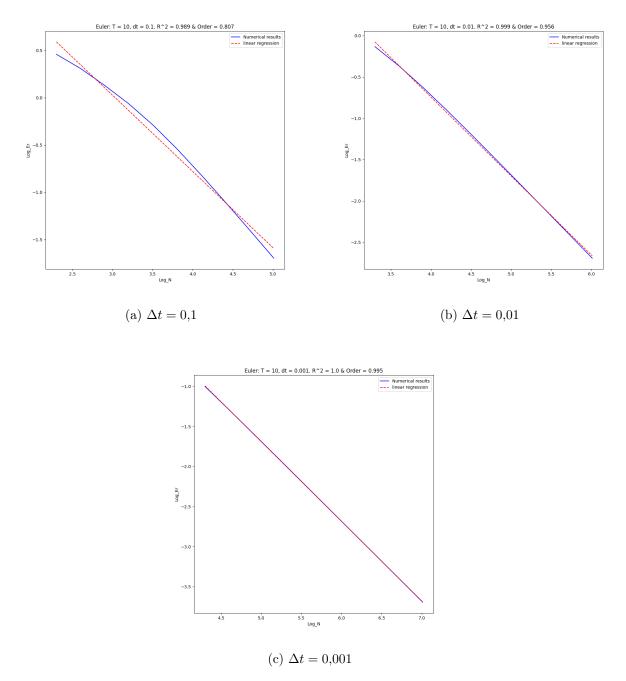


Figura 3.10: Ratio de convergencia de Euler para diferentes mallas

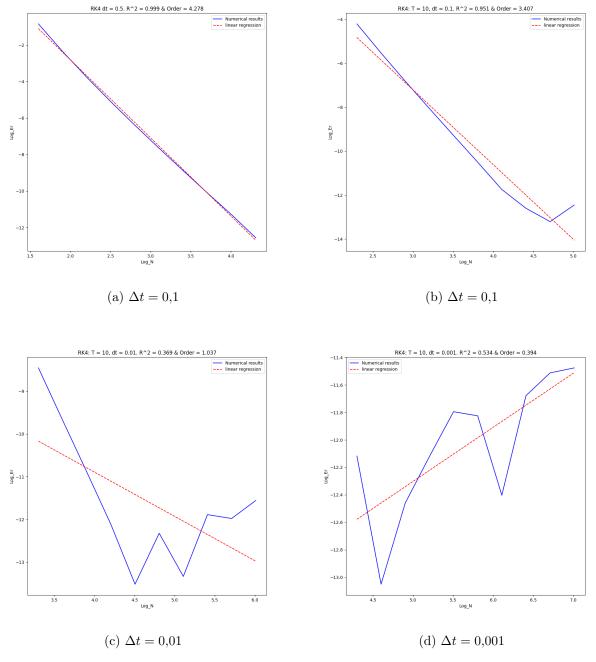


Figura 3.11: Ratio de convergencia de RK4 para diferentes mallas

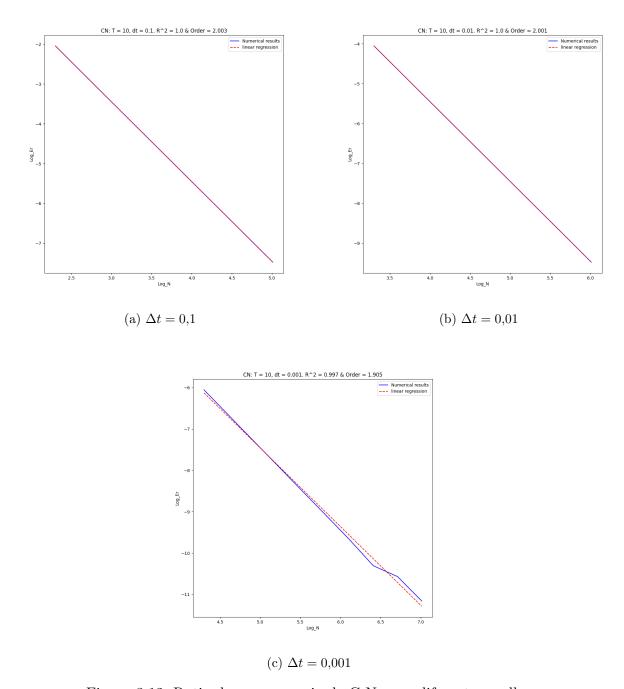


Figura 3.12: Ratio de convergencia de C-N para diferentes mallas

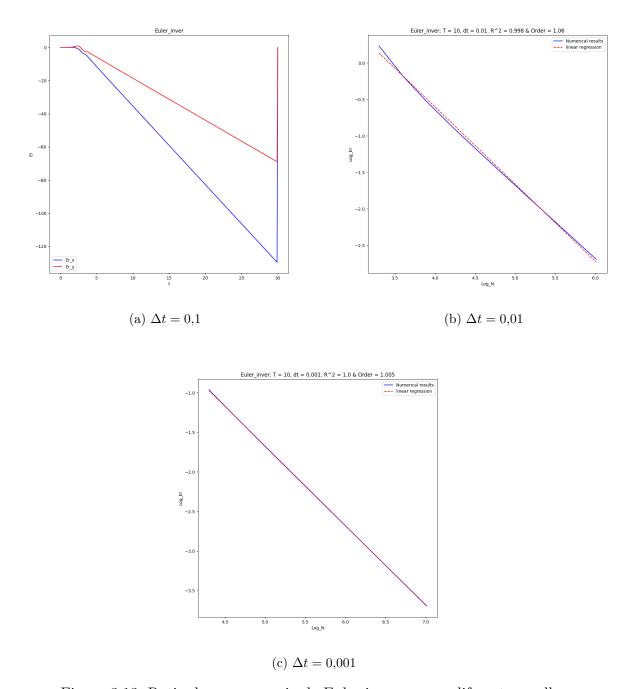


Figura 3.13: Ratio de convergencia de Euler inverso para diferentes mallas