Diferencias Finitas

Problemas de calibración: BC Neumman y κ variable

Modelación computacional en las ciencias y las ingenierías como apoyo en el proceso enseñanza-aprendizaje
(PAPIME-PE101019)

Instituto de Geofísica
Universidad Nacional Autónoma de México

Contenido

Contenido

Modelo Matemático

Considere el siguiente problema:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{d^2T(x)}{dx^2} + \omega^2 T(x)\right) &= 0 \quad x \in [0,1] \\ T(0) &= 1 \\ T(1) &= 1 \end{aligned} \tag{1}$$

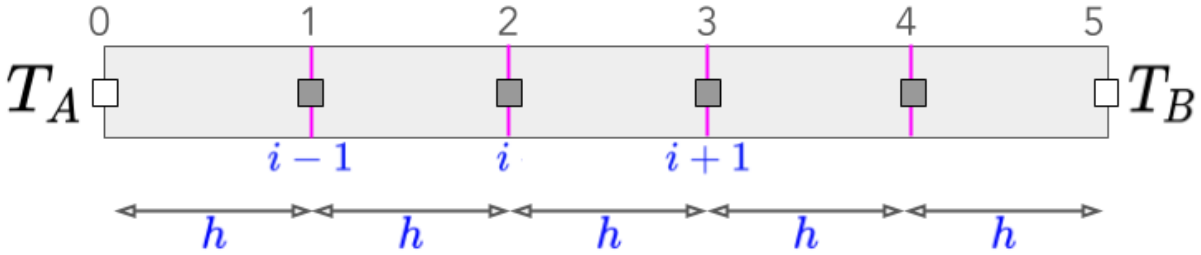
cuya solución analítica es: $T(x) = \dfrac{1-\cos(\omega)}{\sin(\omega)}\sin(\omega x) + \cos(\omega x)$

donde ω = constante.

Modelo Numérico

Recordemos que la segunda derivada se puede aproximar como sigue (véase la figura como referencia):

$$\left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_i = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \tag{2}$$



Usando (2) en (1) obtenemos

$$-\left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2} + \omega^2 T_i\right) = 0$$

que podemos escribir como:

$$-T_{i+1} + (2 - \omega^2/r_i)T_i - T_{i-1} = 0$$

donde $r_i = \dfrac{\kappa_i}{h^2}$ y en este caso $\kappa_i = 1$, $\forall i$.

Modelo Numérico

El sistema lineal para este caso, para cualquier N, es:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 2-\omega^2/r & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2-\omega^2/r & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2-\omega^2/r & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2-\omega^2/r & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2-\omega^2/r \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{\mathbf{A}}}_{N\times N}} \underbrace{\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_{N-1} \\ T_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{T}_N} = \underbrace{\frac{1}{r}\begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ \vdots \\ S_{N-1} \\ S_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} T_A \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ T_B \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}_N}$$

donde $r = \dfrac{\kappa}{h^2}$ y $S_i = 0,\ \forall i$.

Ejercicio 3.

Usando como base el código del Ejercicio 2, resuelva el sistema lineal de este problema de calibración. Para ello utilice el notebook **E03_Calibracion1.ipynb**, del repositorio **Mixbaal**. Note que ya existe la siguiente función:

```
def buildMatrix(N, d):
```

Esta función construye la matriz del sistema y recibe como parámetros el tamaño del sistema N y el contenido de la diagonal principal, **d**, de la matriz, que en este caso debe ser: $2 - \omega^2/r$. Realice lo siguiente:

1. Agregue una celda para definir los parámetros físicos y numéricos del problema (de manera similar al ejercicio 2).
2. Agregue una celda para resolver el sistema lineal. Observe que en este caso la construcción de la matriz deberá realizarse como sigue:

```
A = buildMatrix(N, 2 - w**2/r)
```

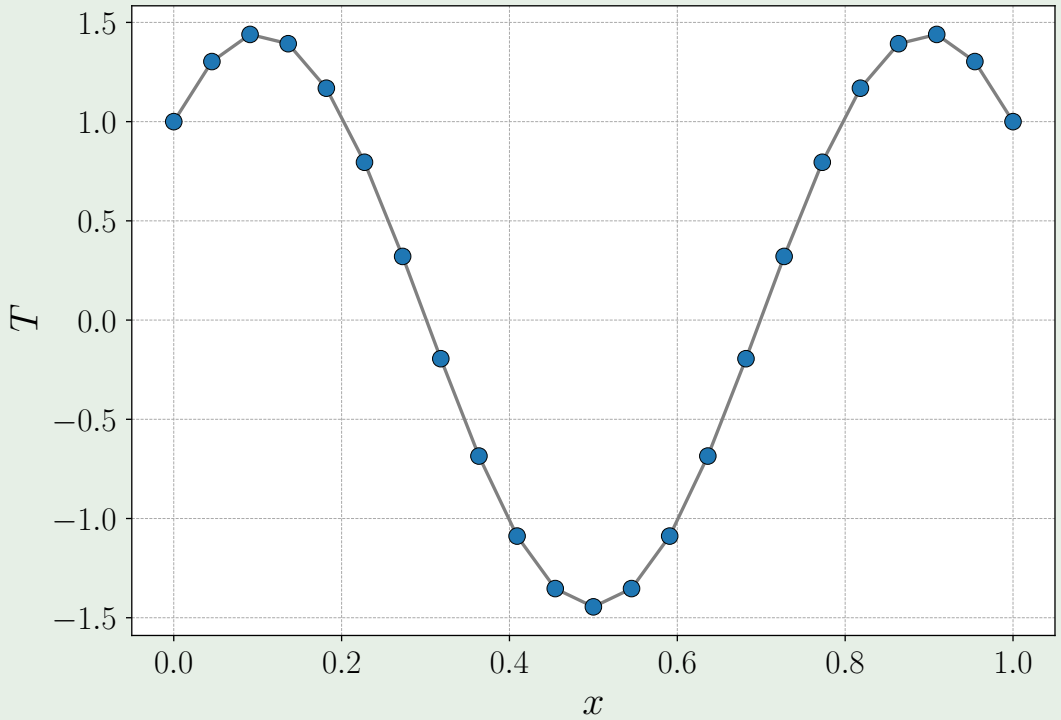
3. Reproduzca la gráfica de la siguiente página en donde se usó $\omega = 2.5\pi$.

```
w = 2.5 * np.pi
```

Ejercicio 3.

Solución:

```
T =  [ 1.          1.30272968  1.43942855  1.39267454  1.16842639  0.79526416
  0.32074678 -0.19464927 -0.68523757 -1.08849344 -1.35302256 -1.44511112
 -1.35302256 -1.08849344 -0.68523757 -0.19464927  0.32074678  0.79526416
  1.16842639  1.39267454  1.43942855  1.30272968  1.        ]
```



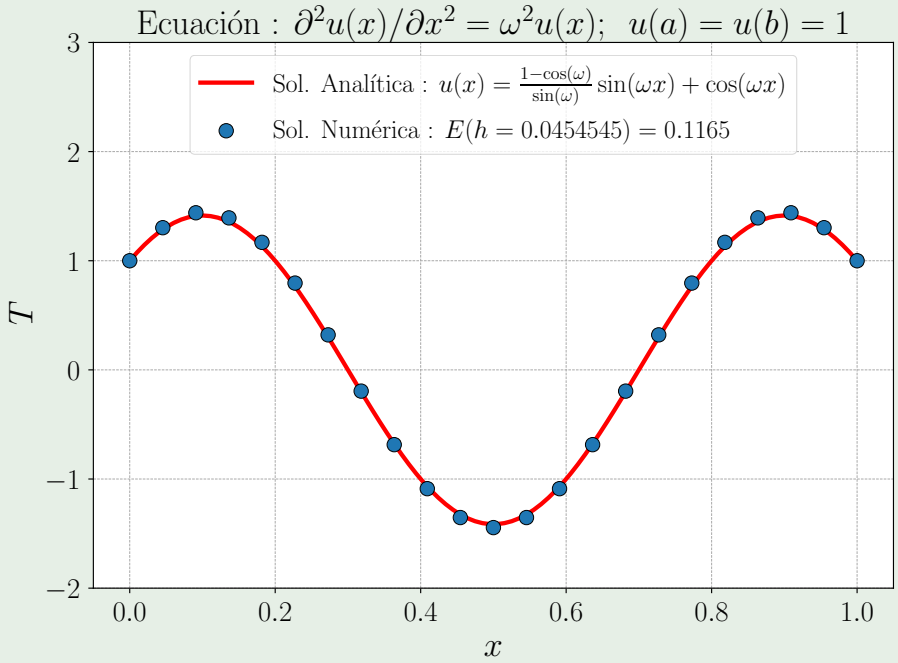
Ejercicio 3.

4. Agregue una celda con la implementación de la solución exacta:

```
def solExact(x, w):
    return ((1.0 - np.cos(w))/np.sin(w)) * np.sin(w * x) + np.cos(w * x)
```

5. Calcule la solución exacta, compare con la solución numérica calculando la norma L-2 del error absoluto y reproduzca la gráfica de abajo:

```
Error = np.linalg.norm(solExact(x,w) - T, 2) # Norma L-2 del error absoluto
```



Contenido

Modelo Matemático

Considere el siguiente problema:

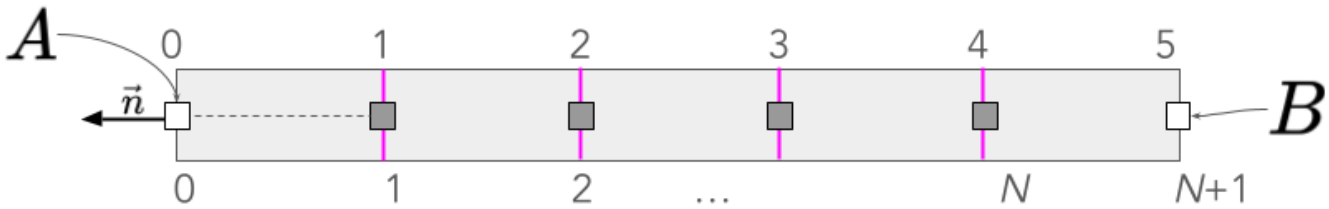
$$\begin{aligned} -\frac{d^2u(x)}{dx^2} &= -e^x \quad x \in [0,1] \\ \frac{du}{dn}(0) &= 0 \\ u(1) &= 3 \end{aligned} \tag{3}$$

cuya solución analítica es: $u(x) = e^x - x - e + 4$

Obsérvese que en este caso se proporciona una condición de tipo Neumman en la frontera izquierda del dominio ($x = 0$).

A continuación mostramos tres aproximaciones que se pueden usar para incorporar las condiciones de tipo Neumman en el sistema lineal.

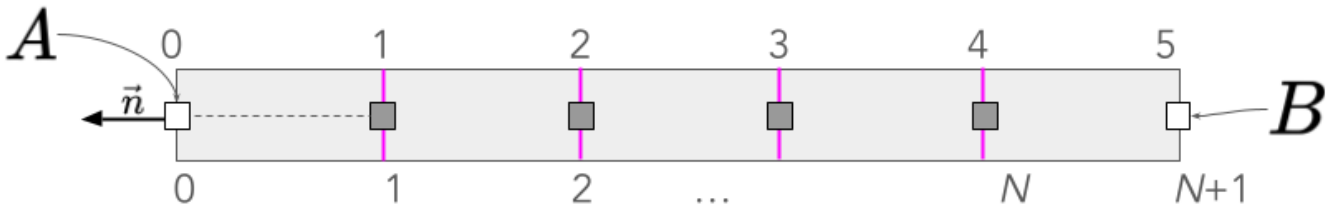
Modelo Numérico: aproximación de primer orden



- La condición de frontera en $x = 0$ indica que no se conoce la u, pero se da la condición: $\left.\frac{du}{dn}\right|_0 = A$, con $A = 0$ (condición tipo Neumman).
- Se observa en la figura que se considera la normal a la frontera $\vec{n}$ hacia afuera del dominio, por lo tanto: $\left.\frac{du}{dn}\right|_0 = -\left.\frac{du}{dx}\right|_0$.
- Se puede entonces aproximar la derivada con DF hacia adelante:
  $-\left.\frac{du}{dx}\right|_0 \approx -\frac{u_1 - u_0}{h} = A \Longrightarrow \boxed{u_0 - u_1 = hA}$
  esta ecuación se debe incorporar al sistema lineal.

- La condición de frontera en $x = 1$ es $u_{N+1} = B$, con $B = 3$ (condición tipo Dirichlet) por lo tanto, para el nodo N se tiene la siguiente ecuación:
  $-u_{N-1} + 2u_N - u_{N+1} = r^{-1} f_N \Longrightarrow \boxed{-u_{N-1} + 2u_N = r^{-1} f_N + B}$

Modelo Numérico: aproximación de primer orden



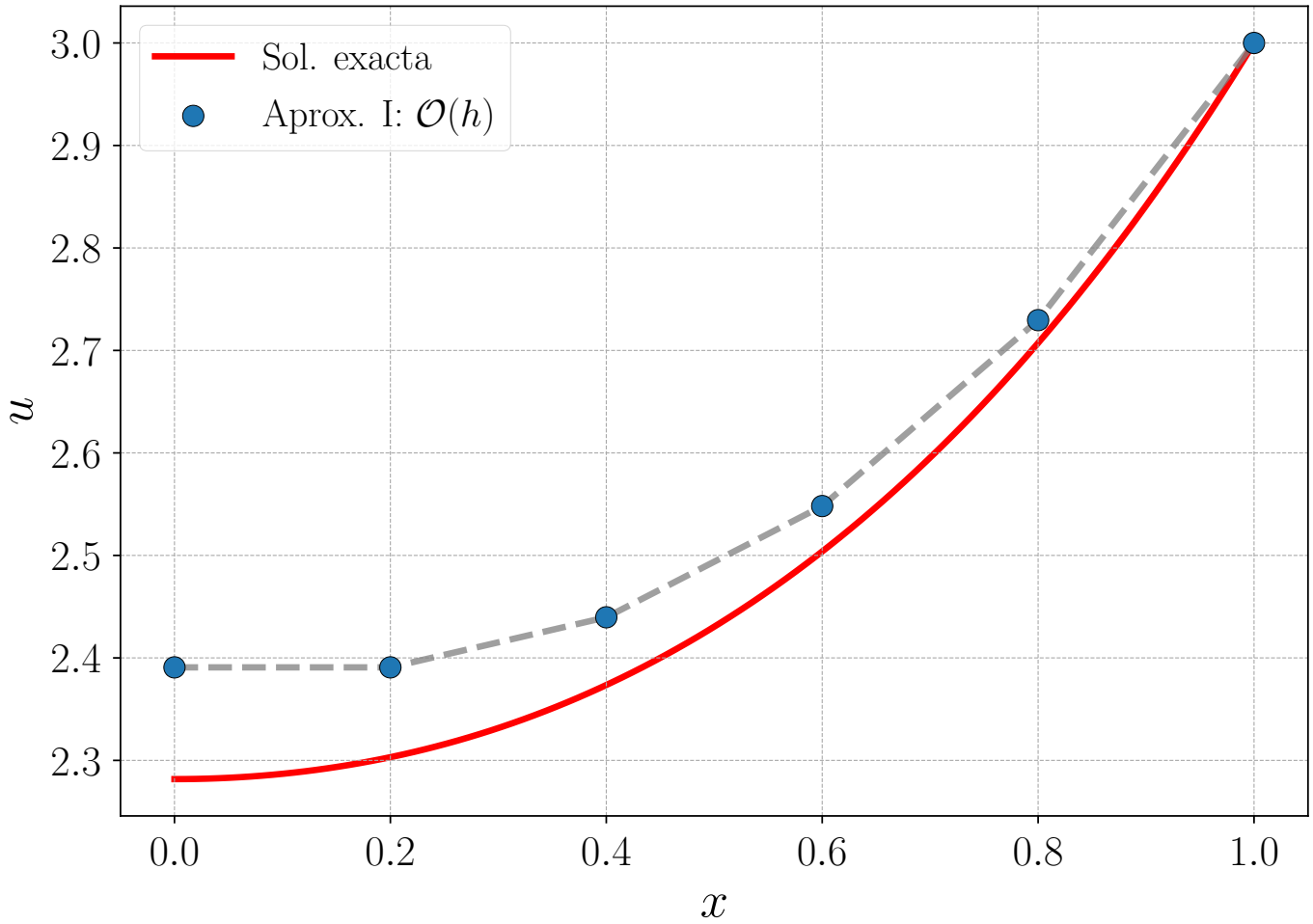
- Para los puntos 1 a N, la forma discreta de la ecuación (3) usando DF centradas es $\boxed{-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1} = r^{-1} f_i}$, donde $f(x) = -e^x$, es decir $f(x_i) = f_i = -e^{x_i}$.
- El **sistema lineal** con las condiciones de frontera incorporadas para esta aproximación es el siguiente:

$$\Longrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}}_{(N+1)\times(N+1)} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} 0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \\ f_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} hA \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ B \end{bmatrix}$$

- El **orden** de la aproximación es lineal $\mathcal{O}(h)$.

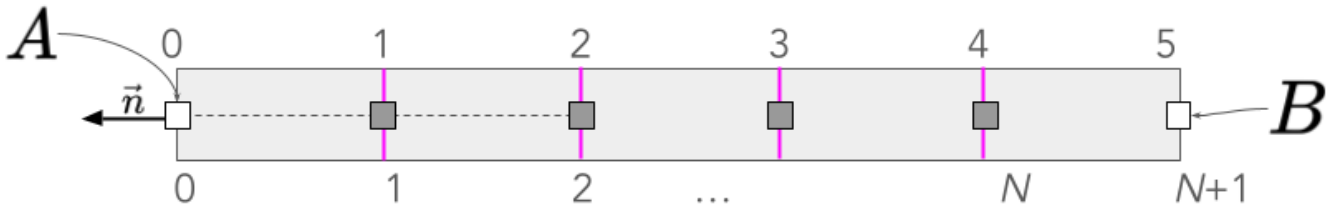
Modelo Numérico: aproximación de primer orden

Esta aproximación genera el siguiente resultado:



Modelo Numérico: aprox. de segundo orden (tres puntos)

- Es posible aproximar la derivada normal usando tres puntos hacia adelante (véase el ejemplo 2 de la presentación *Diferencias Finitas: Introducción*):

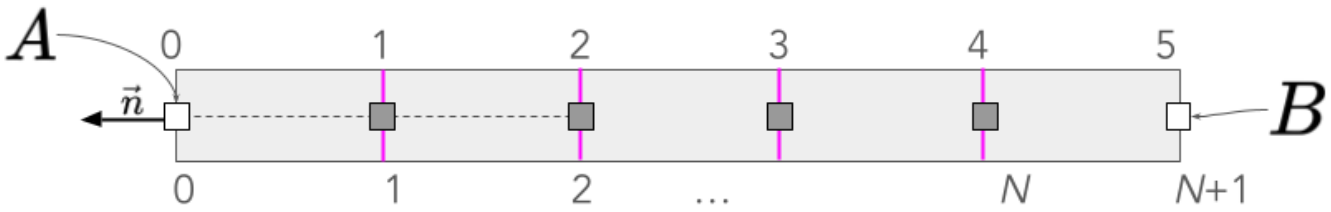


- Entonces, la fórmula de la aproximación queda como sigue:

$$\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_0 = -\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_0 \approx -\frac{-3u_0 + 4u_1 - u_2}{2h} = A \Longrightarrow \boxed{3u_0 - 4u_1 + u_2 = 2hA}$$

esta ecuación se debe incorporar al sistema lineal.

Modelo Numérico: aprox. de segundo orden (tres puntos)



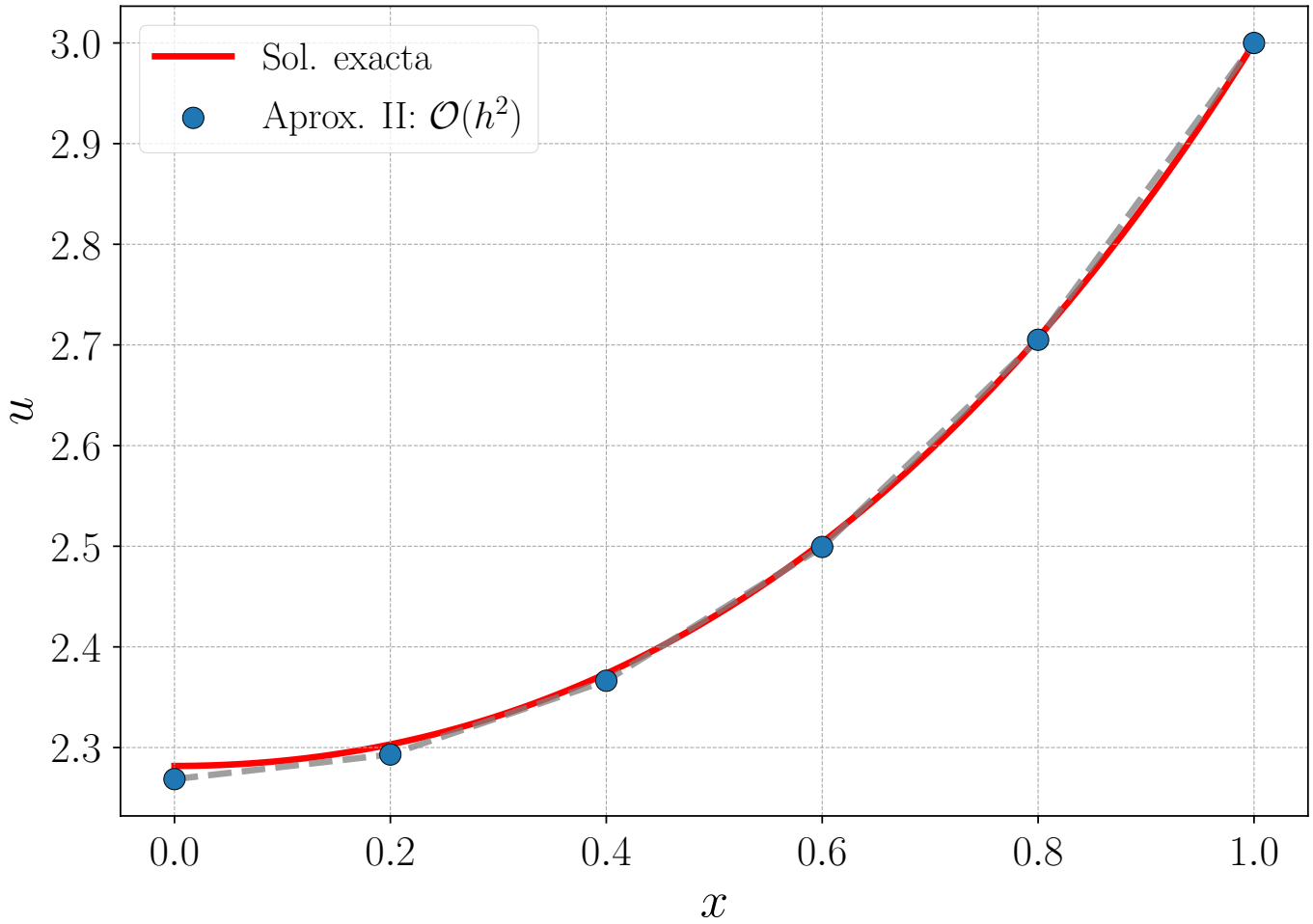
El **sistema lineal** para esta aproximación es el siguiente:

$$\Longrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & -4 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}}_{(N+1)\times(N+1)} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} 0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \\ f_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2hA \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ B \end{bmatrix}$$

El **orden** de la aproximación es cuadrático $\mathcal{O}(h^2)$.

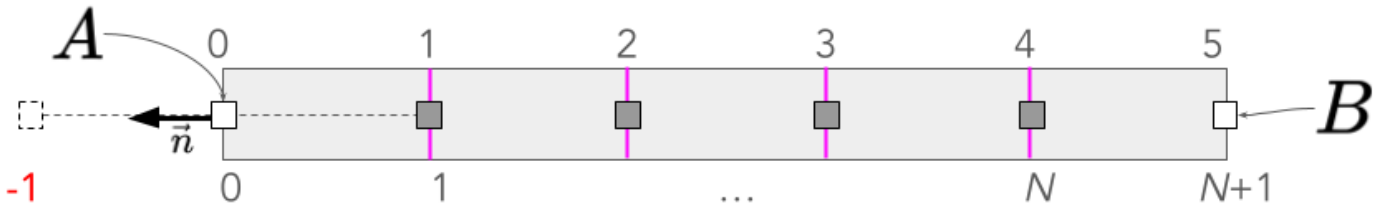
Modelo Numérico: aprox. de segundo orden (tres puntos)

Esta aproximación genera el siguiente resultado:



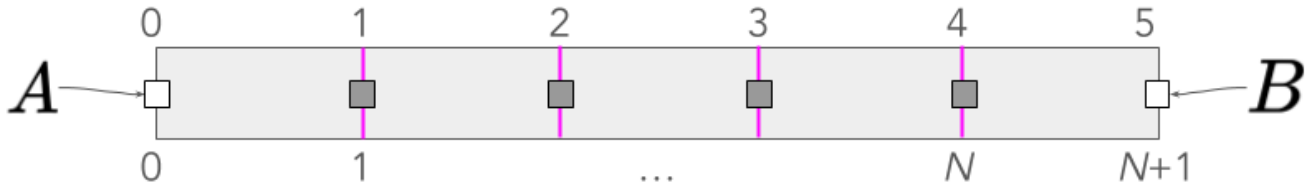
Modelo Numérico: aprox. de segundo orden (centrales)

- Otra manera de obtener un orden cuadrático de aproximación en la derivada normal es mediante diferencias centrales. Para ello supondremos que existe un nodo a la izquierda del nodo 0, al cual generalmente se le conoce como nodo "fantasma", y lo etiquetamos con el subíndice -1:



- En este caso la fórmula de la aproximación queda como sigue:
$$\left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_0 = -\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_0 \approx -\frac{(u_1 - u_{-1})}{2h} = A \Longrightarrow u_{-1} = 2hA + u_1$$
- Como no existe el nodo -1, escribimos la ecuación discreta para el nodo 0:
$-u_{-1} + 2u_0 - u_1 = r^{-1} f_0$ y sustituimos en ella la fórmula anterior para obtener:
$$\Longrightarrow \boxed{u_0 - u_1 = \frac{1}{2r} f_0 + hA}$$
esta ecuación se debe incorporar al sistema lineal.

Modelo Numérico: aprox. de segundo orden (centrales)



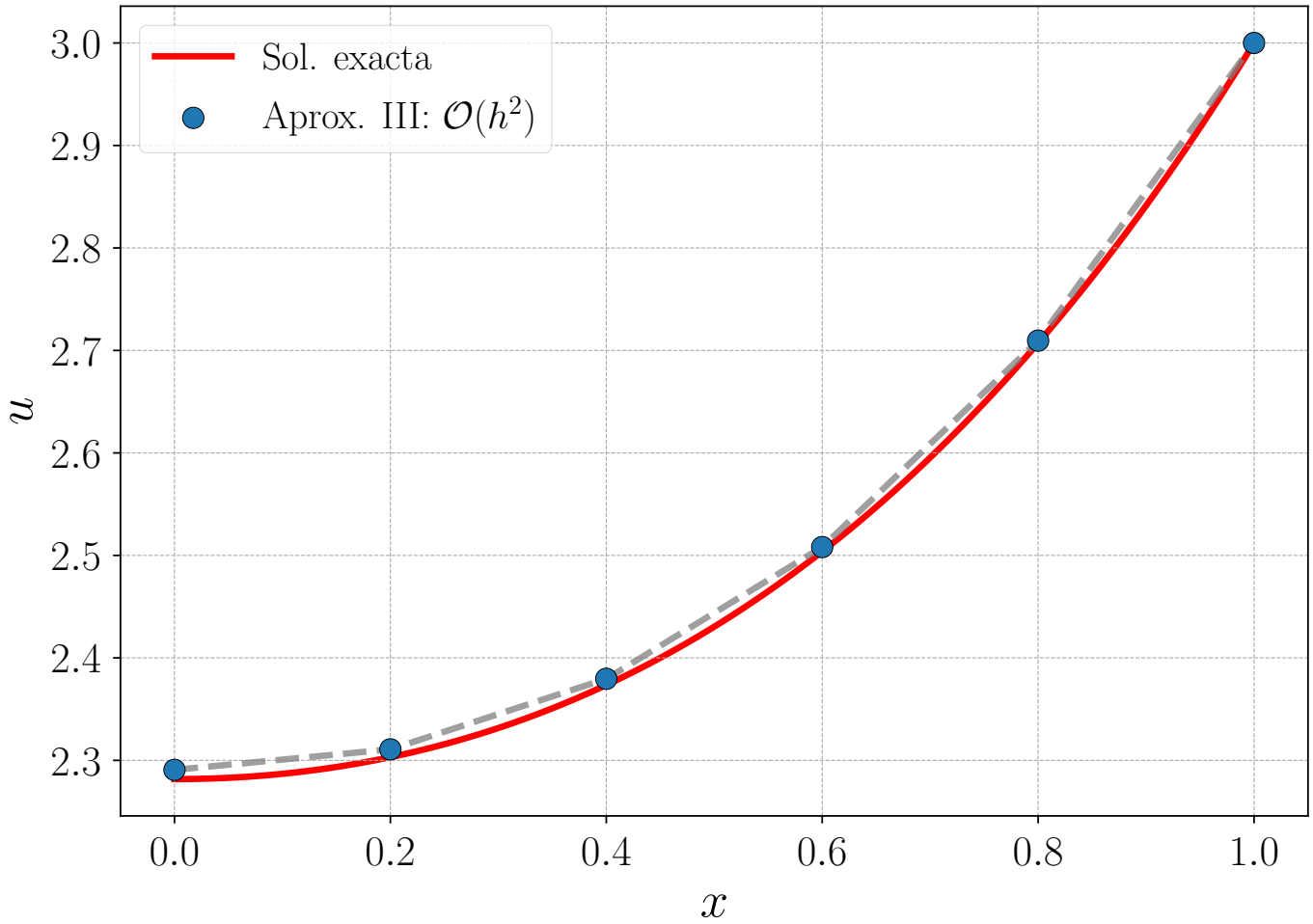
El **sistema lineal** para esta aproximación es el siguiente:

$$\Longrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}}_{(N+1)\times(N+1)} \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} f_0/2 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \\ f_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} hA \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ B \end{bmatrix}$$

El **orden** de la aproximación es cuadrático $\mathcal{O}(h^2)$.

Modelo Numérico: aprox. de segundo orden (centrales)

Esta aproximación genera el siguiente resultado:



Medición del error

- Si $\hat{u}(x)$ representa la solución exacta del problema, definimos el error absoluto en el punto x_i de la aproximación como $e_i = u(x_i) - \hat{u}(x_i)$.
- El vector $\mathbf{E} = (e_0, e_1, \ldots, e_{N+1})$ representa el error en todos los puntos de la malla.
- La magnitud (norma) de este vector nos proporciona el error global de la aproximación. Se puede usar cualquier norma por el teorema de equivalencia y para tener un significado más descriptivo del error usaremos las llamadas normas de malla (*grid norms*), véase [2].

- Grid norm ∞: $||E||_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq N} |e_i|$

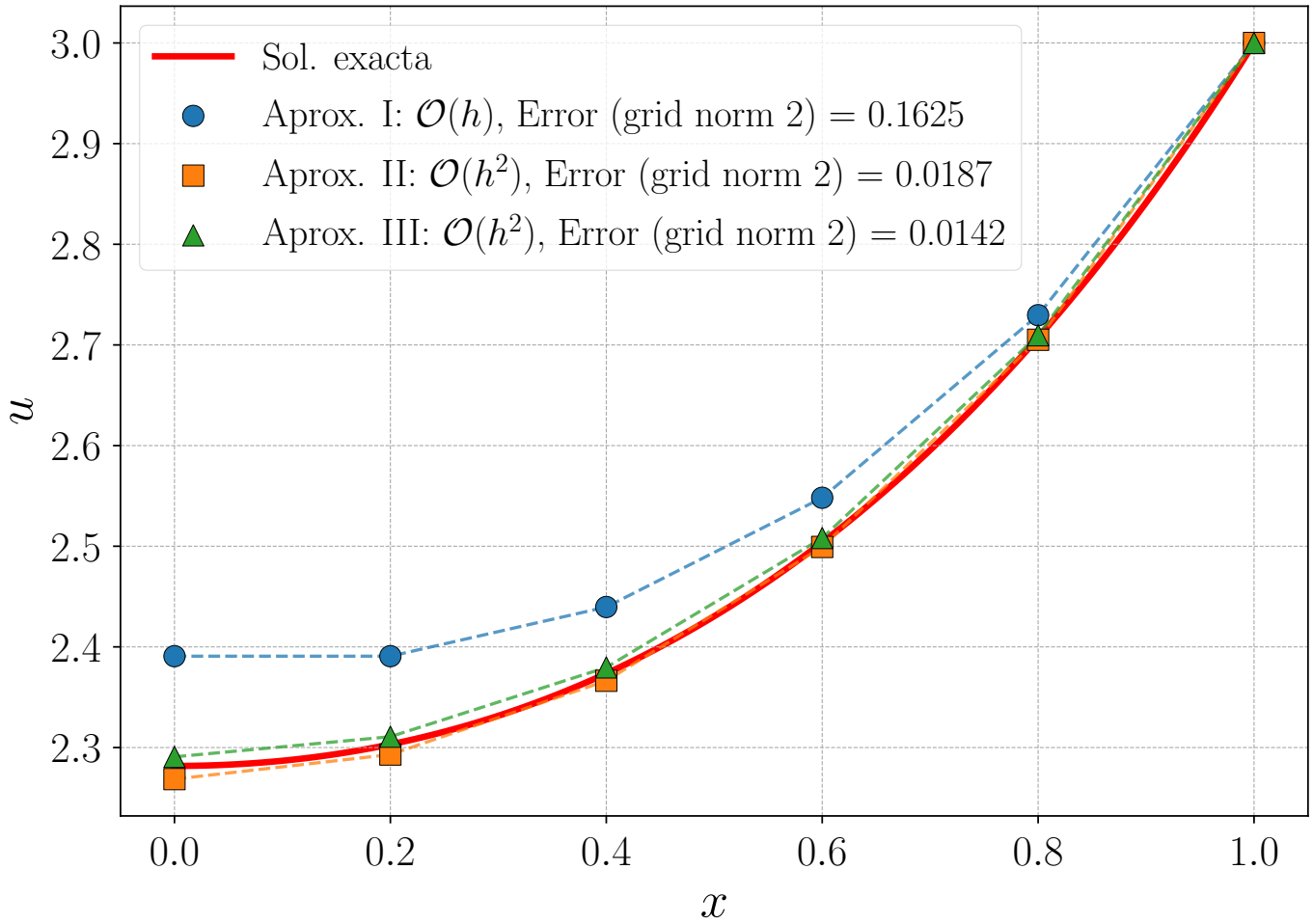
- Grid norm 1: $||E||_1 = h \sum\limits_{i=1}^{N} |e_i|$

donde $h \approx \dfrac{(b-a)}{N}$ representa el tamaño de la malla.

- Grid norm 2: $||E||_2 = \left(h \sum\limits_{i=1}^{N} |e_i|^2 \right)^{1/2}$

Medición del error

Comparación de las tres aproximaciones.



Ejercicio 4.

Abra el notebook **E04_Calibracion2.ipynb** del repositorio Mixbaal. Analice y entienda cada una de las 7 celdas de código que están implementadas. Observe que en la celda 6 se resuelve el problema con las tres aproximaciones para la condición de Neumman y se genera la gráfica presentada en la página anterior (22). La celda 7 contiene la siguiente función:

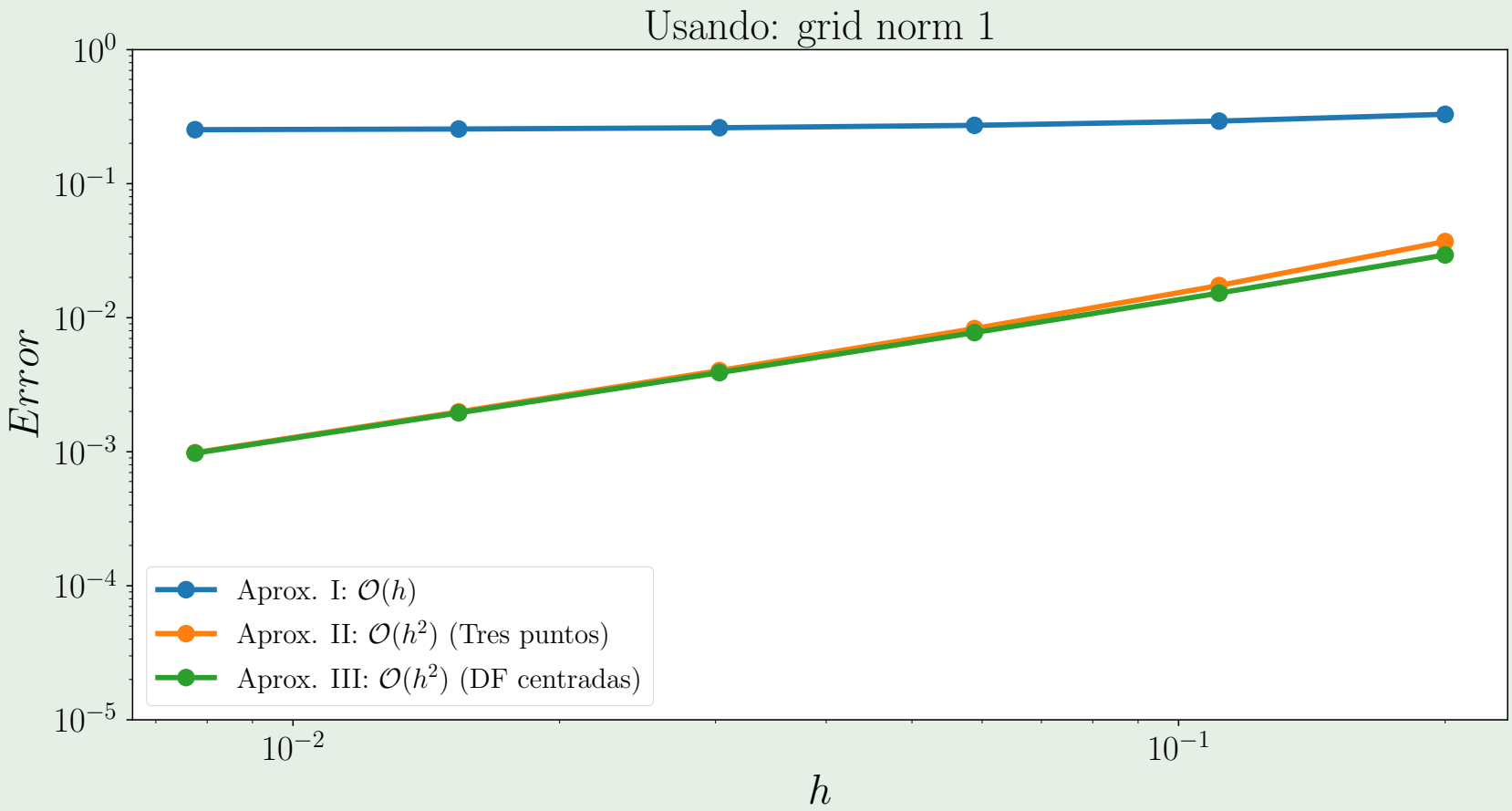
```
def meshRefining(fcondNeumman, nodes, norma):
```

Esta función permite realizar un estudio de refinamiento de malla. En este tipo de estudio se resuelve el problema para diferente número de nodos y se calcula el error con respecto a la solución exacta.

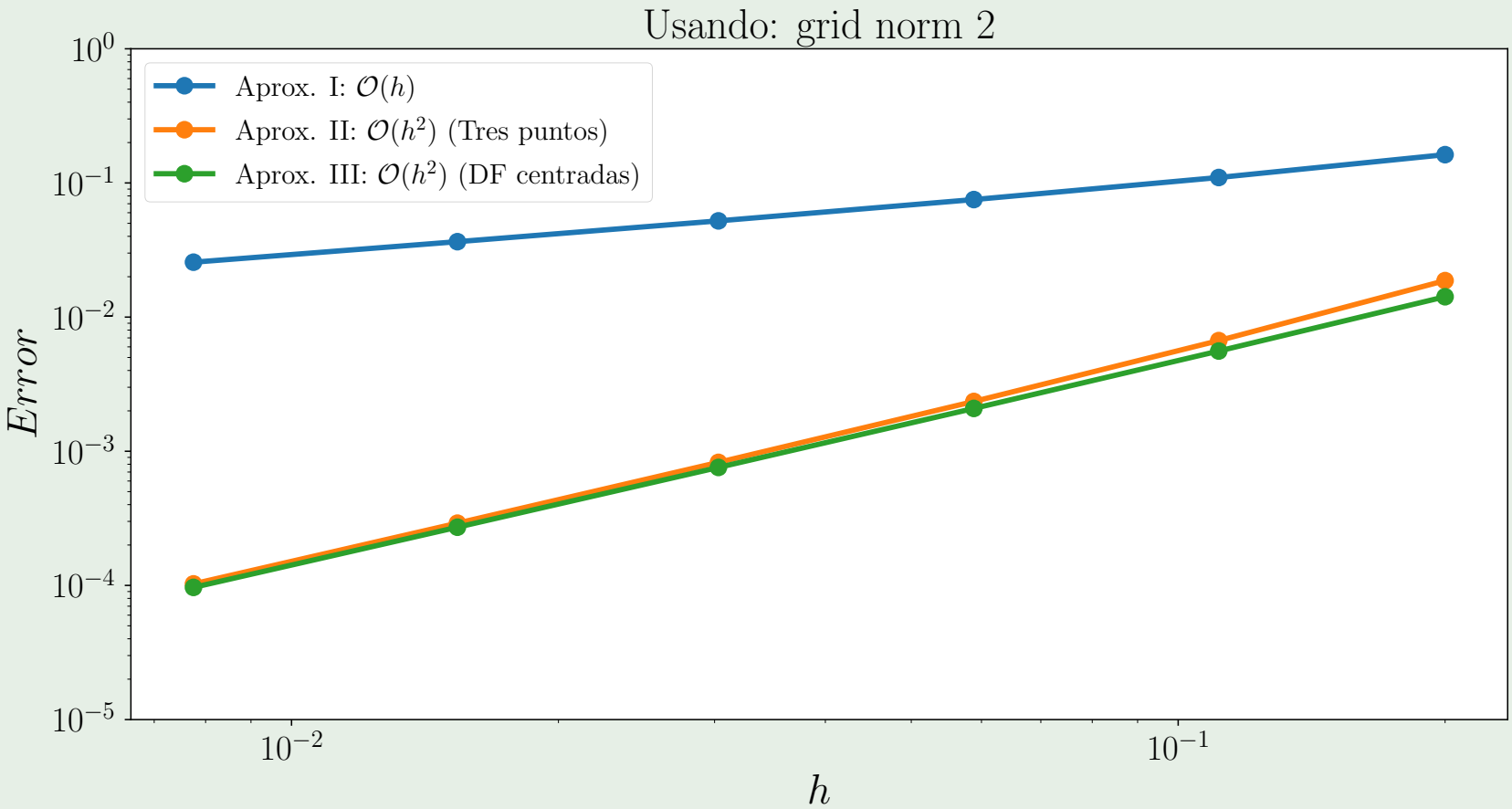
1. Realice un estudio de refinamiento de malla para el siguiente número de nodos (internos) $4, 8, 16, 32, 64, 128$ y reproduzca las tres gráficas de las siguientes páginas.

Hint: Use una lista para los nodos: `nodos = [4, 8, ...]`; enseguida calcule la h para cada uno de estos nodos usando una *list comprehension*; posteriormente ejecute la función `meshRefining()` pasando como parámetros las funciones que calculan las aproximaciones de la condición Neumman, la lista de nodos y la norma correspondiente para el cálculo del error. Note que la función `meshRefining()` regresa la lista de errores con la cual puede generar las gráficas requeridas.

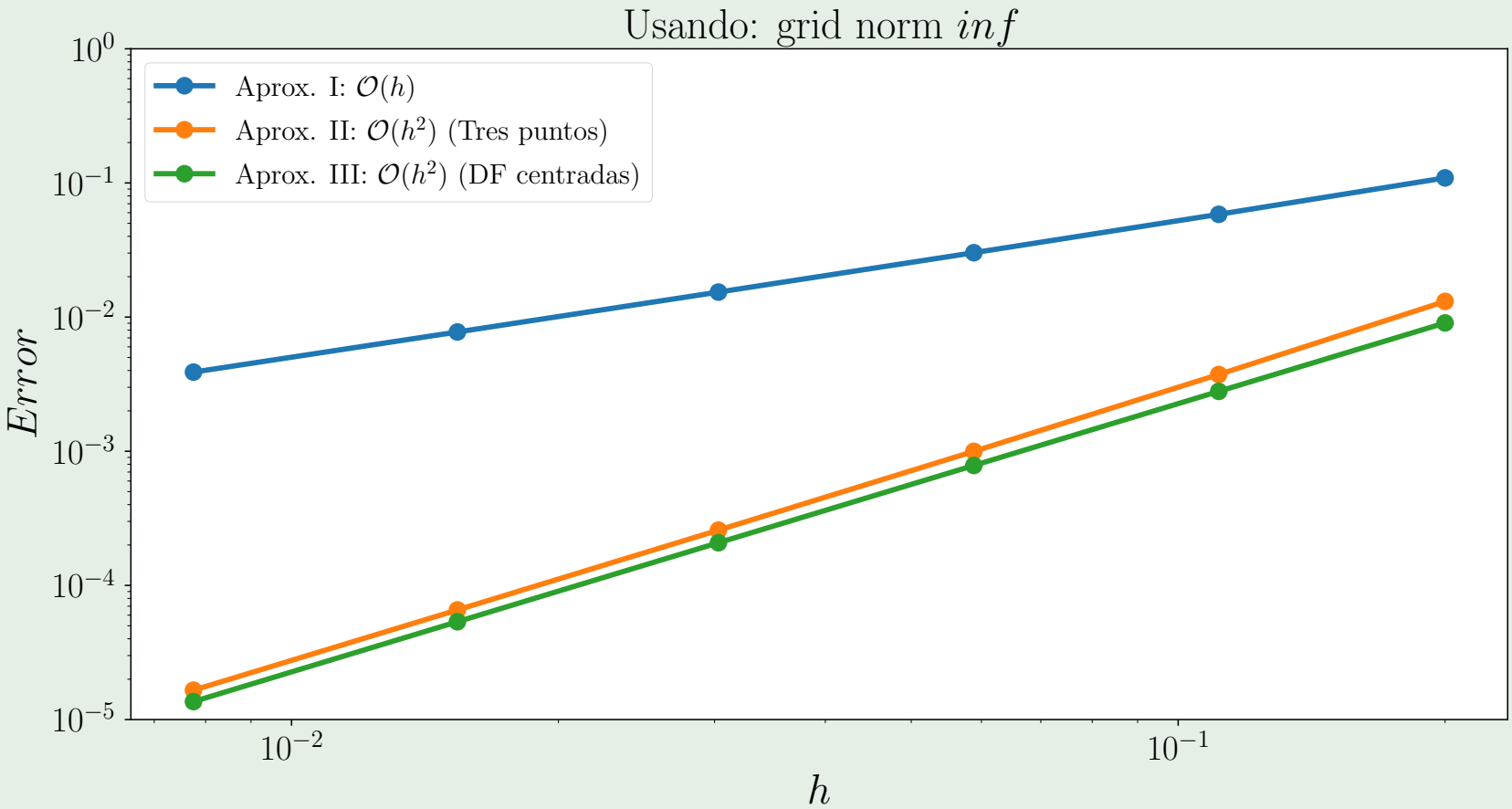
Ejercicio 4.


Usando: grid norm 1
10^0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
$Error$
10^{-2}
10^{-1}
h
Aprox. I: $\mathcal{O}(h)$
Aprox. II: $\mathcal{O}(h^2)$ (Tres puntos)
Aprox. III: $\mathcal{O}(h^2)$ (DF centradas)

Ejercicio 4.


Usando: grid norm 2
Aprox. I: $\mathcal{O}(h)$
Aprox. II: $\mathcal{O}(h^2)$ (Tres puntos)
Aprox. III: $\mathcal{O}(h^2)$ (DF centradas)
10^{0}
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
$Error$
10^{-2}
10^{-1}
h

Ejercicio 4.

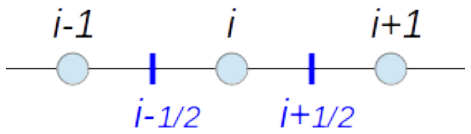

Usando: grid norm inf
Aprox. I: $\mathcal{O}(h)$
Aprox. II: $\mathcal{O}(h^2)$ (Tres puntos)
Aprox. III: $\mathcal{O}(h^2)$ (DF centradas)
10^{0}
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
$Error$
10^{-2}
10^{-1}
h

Contenido

Modelo Matemático y Numérico

Considere la ecuación de Poisson con κ variable y condiciones de frontera de tipo Dirichlet:

$$-\frac{d}{dx}\left(\kappa\frac{du}{dx}\right) = f \quad \text{con} \quad \kappa = \kappa(x) \tag{4}$$



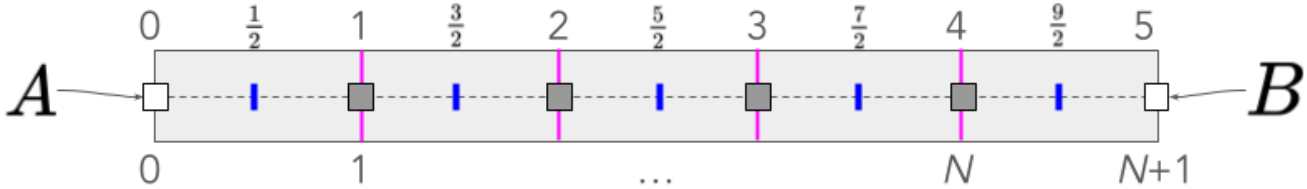
Definimos $g = \kappa\frac{du}{dx}$ por lo tanto $\frac{d}{dx}\left(\kappa\frac{du}{dx}\right) = \frac{dg}{dx}$. Esta derivada se puede aproximar como sigue (véase la figura):

$$\left.\frac{dg}{dx}\right|_i = \frac{g_{i+\frac{1}{2}} - g_{i-\frac{1}{2}}}{h} = \frac{\left[\kappa\frac{du}{dx}\right]_{i+\frac{1}{2}} - \left[\kappa\frac{du}{dx}\right]_{i-\frac{1}{2}}}{h} \tag{5}$$

$$\left[\kappa\frac{du}{dx}\right]_{i+\frac{1}{2}} = \kappa_{i+\frac{1}{2}}\left[\frac{u_{i+1}-u_i}{h}\right] = \frac{1}{h}\left[\kappa_{i+\frac{1}{2}}u_{i+1} - \kappa_{i+\frac{1}{2}}u_i\right] \tag{6}$$

$$\left[\kappa\frac{du}{dx}\right]_{i-\frac{1}{2}} = \kappa_{i-\frac{1}{2}}\left[\frac{u_i-u_{i-1}}{h}\right] = \frac{1}{h}\left[\kappa_{i-\frac{1}{2}}u_i - \kappa_{i-\frac{1}{2}}u_{i-1}\right] \tag{7}$$

Modelo Numérico



Usando (5), (6) y (7) en (4) obtenemos:

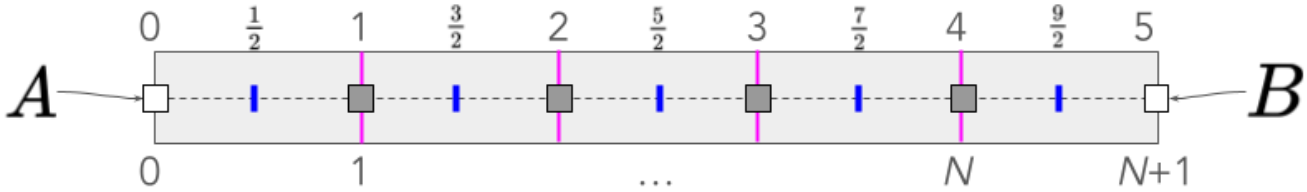
$$\boxed{-\frac{1}{h^2}\left[\kappa_{i+\frac{1}{2}}u_{i+1} - (\kappa_{i+\frac{1}{2}} + \kappa_{i-\frac{1}{2}})u_i + \kappa_{i-\frac{1}{2}}u_{i-1}\right] = f_i} \tag{8}$$

Condiciones de frontera tipo Dirichlet: $u_0 = A$ y $u_{N+1} = B$

$$i = 1 \implies -\kappa_{1+\frac{1}{2}}u_2 + (\kappa_{1+\frac{1}{2}} + \kappa_{1-\frac{1}{2}})u_1 = h^2 f_1 + \kappa_{1-\frac{1}{2}}A$$

$$i = N \implies (\kappa_{N+\frac{1}{2}} + \kappa_{N-\frac{1}{2}})u_N - \kappa_{N-\frac{1}{2}}u_{N-1} = h^2 f_N + \kappa_{N+\frac{1}{2}}B$$

Modelo Numérico

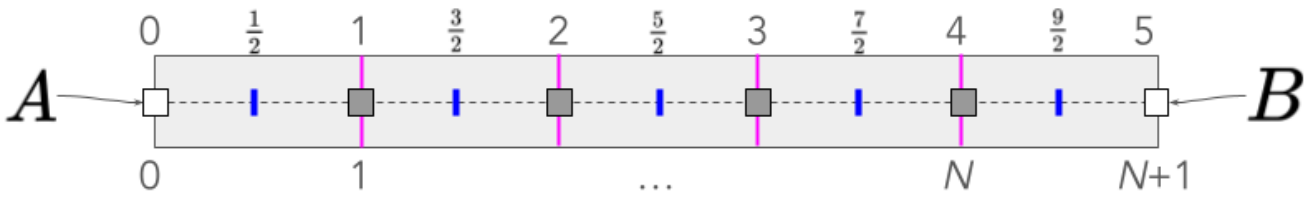


Las conductividades $\kappa_{i+\frac{1}{2}}$ y $\kappa_{i-\frac{1}{2}}$ se pueden aproximar de varias maneras, por ejemplo:

Promedio aritmético: $\kappa_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{\kappa_{i+1} + \kappa_i}{2}$ y $\kappa_{i-\frac{1}{2}} = \dfrac{\kappa_{i-1} + \kappa_i}{2}$

Media armónica: $\kappa_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{2\kappa_{i+1}\kappa_i}{\kappa_{i+1} + \kappa_i}$ y $\kappa_{i-\frac{1}{2}} = \dfrac{2\kappa_{i-1}\kappa_i}{\kappa_{i-1} + \kappa_i}$

Modelo Numérico)



La ecuación (8) la podemos escribir como

$$-b_i u_{i+1} + a_i u_i - c_i u_{i-1} = h^2 f_i \tag{9}$$

donde $b_i = \kappa_{i+\frac{1}{2}}$, $c_i = \kappa_{i-\frac{1}{2}}$ y $a_i = b_i + c_i$. Con esta notación, el **sistema lineal** es el siguiente:

$$\Longrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 & -b_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -c_2 & a_2 & -b_2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -c_{N-1} & a_{N-1} & -b_{N-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & a_N & -b_N \end{bmatrix}}_{N\times N} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = h^2 \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ f_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \kappa_{1-\frac{1}{2}} A \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \kappa_{N+\frac{1}{2}} B \end{bmatrix}$$

Ejercicio 5.

Abra el notebook `E05_Calibracion3.ipynb`, del repositorio `Mixbaal`. Implemente lo siguiente:

1. En la celda 2: las funciones para calcular las conductividades en los puntos medios, es decir el promedio aritmético y la media armónica:

```
def pAritmetico(a, b):
    return 0.5 * (a + b)

def mArmonica(a, b):
    return 2 * a * b / (a + b)
```

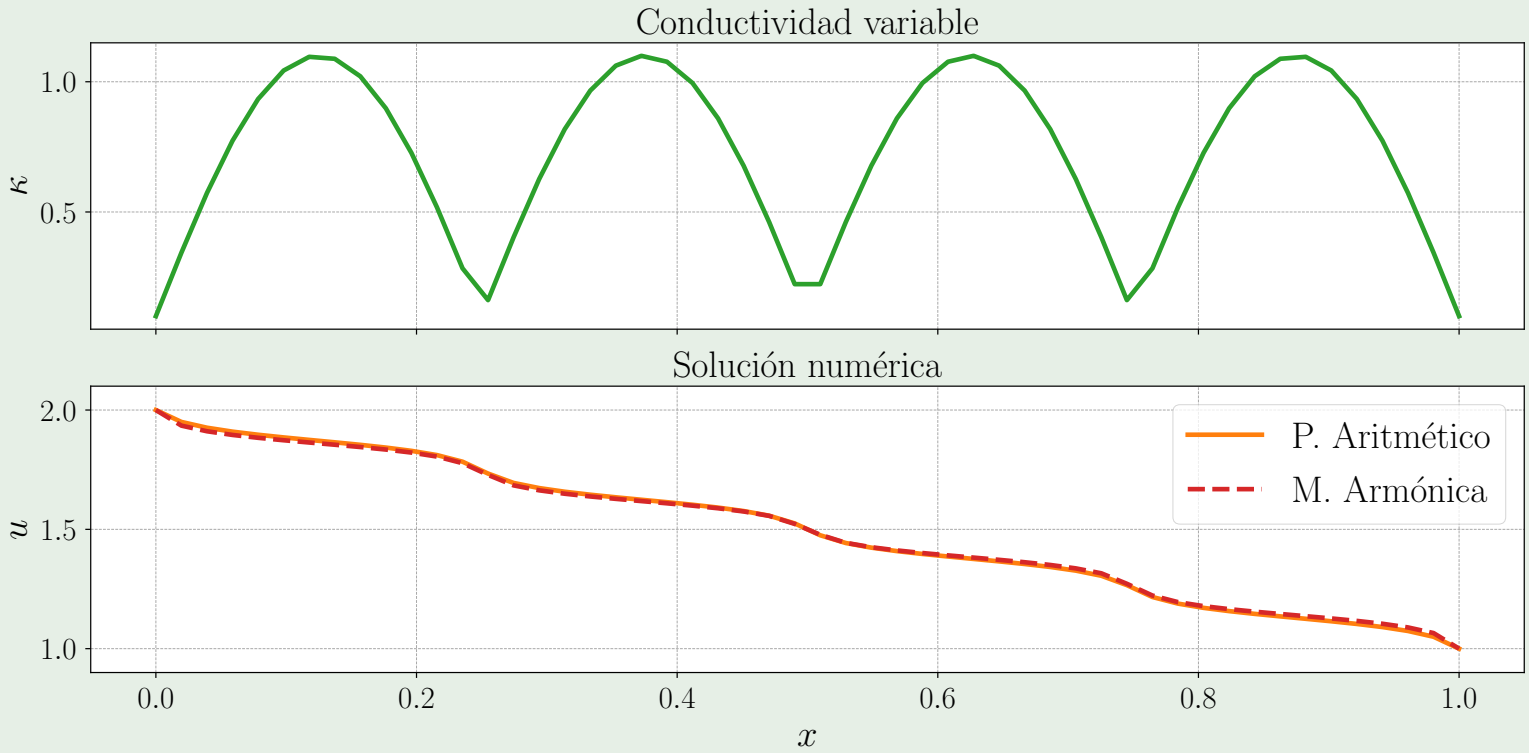
2. En la celda 3: una función para construir la matriz, que reciba como parámetros el tamaño del sistema N, la conductividad κ y la función para calcular la conductividad en los puntos medios f:

```
def buildMatrix(N, k, f):
```

3. Las celdas 4, 5 y 6 contienen código que hace uso de las funciones anteriores para calcular la solución. Reproduzca los casos que se describen en las siguientes dos páginas:

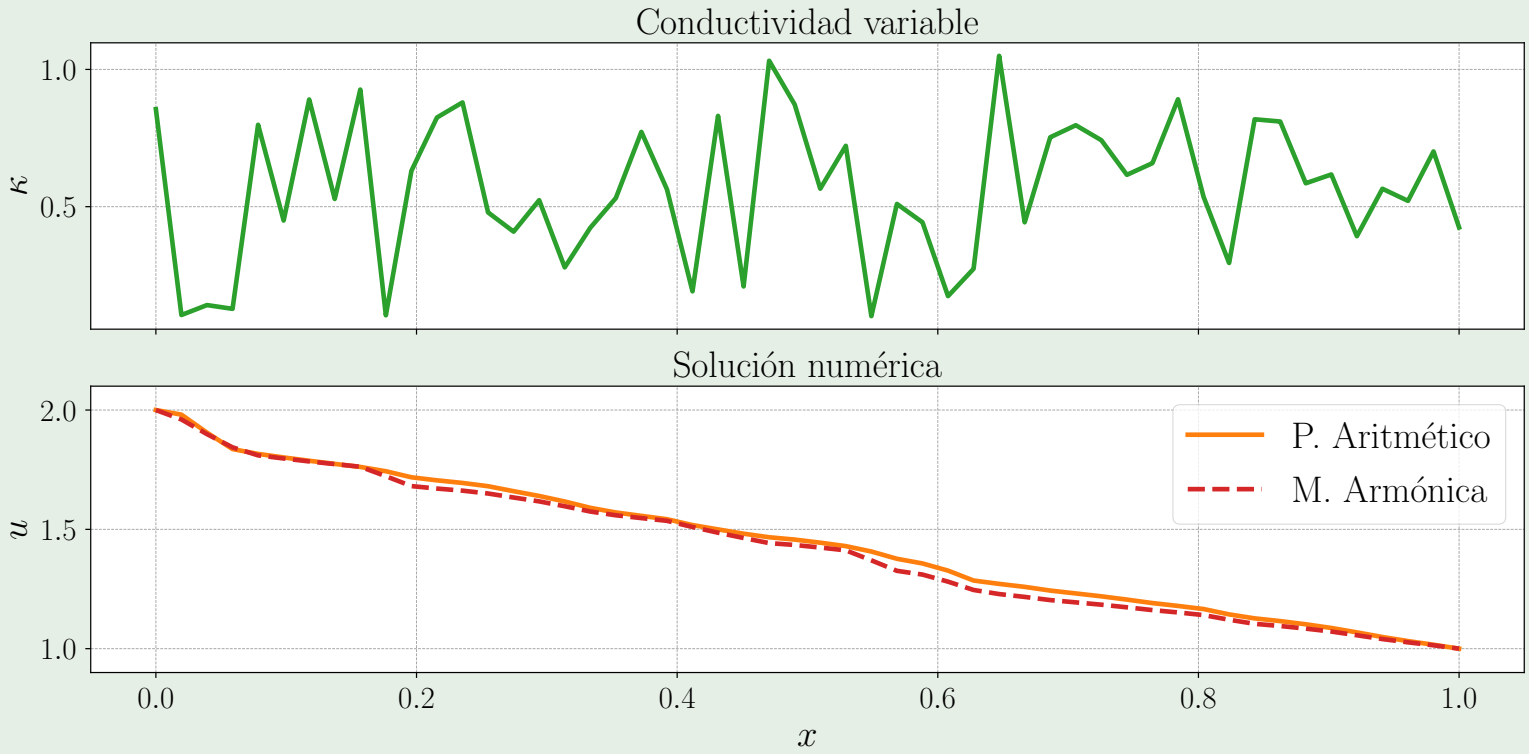
Ejercicio 5.

3. Caso 1: $L = 1$, $N = 50$, $A = 2.0$, $B = 1.0$, $\kappa = |sin(4\pi x)| + \delta\kappa$ con $\delta\kappa = 0.1$.



Ejercicio 5.

3. Caso 2: $L = 1$, $N = 50$, $A = 2.0$, $B = 1.0$, $\kappa = \texttt{random}(x) + \delta\kappa$ con $\delta\kappa = 0.1$.



Note que en este caso la solución no se reproducirá exactamente igual debido al uso de valores pseudo-aleatorios para la conductividad.

Contenido

[1] Bergman, T.L. and Incropera, F.P. and DeWitt, D.P. and Lavine, A.S.,
Fundamentals of Heat and Mass Transfer,
Wiley, **2011**.

[2] R.J. Leveque,
Finite Difference Method for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady State and Time-Dependent Problems ,
Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, **2007**.

[3] Y. Saad
Iterative Methods for Sparse Linear Systems.
PWS/ITP 1996.
Online: http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html, **2000**

[4] Richard Burden and J. Douglas Faires
Numerical Analysis
Cengage Learning; 9 edition (August 9, **2010**)

[5] I. Herrera & G. F. Pinder,
Mathematical Modeling in Science and Engineering: An Axiomatic Approach,
John Wiley **2012**.

Contenido

Créditos

Dr. Luis M. de la Cruz Salas

Departamento de Recursos Naturales

Instituto de Geofísica

Universidad Nacional Autónoma de México

Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE101019