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



Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-No Comercial-Compartir
Igual 4.0 Internacional.



CONTENIDO

- Calibración 1. Ejercicio 3.
- 2 Calibración 2: Condiciones tipo Neumman

Aproximación I.

Aproximación II.

Aproximación III.

Medición el error

- **3** Calibración 3: conductividad variable Ejercicio 5.
- 4 Referencias
- 6 Créditos

Contenido

- Calibración 1. Ejercicio 3.
- Calibración 2: Condiciones tipo Neumman

Aproximación l

Aproximación II.

Aproximación III

Medición el error

- 3 Calibración 3: conductividad variable Ejercicio 5.
- REFERENCIAS
- 6 CRÉDITOS



Modelo Matemático

Considere el siguiente problema:

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

$$T(0) = 1$$

$$T(1) = 1$$
(1)

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

donde $\omega = \text{constante}$.

Modelo Numérico

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

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

$$T_A \overset{\circ}{\begin{picture}(1,0) \put(0,0){\line(0,0){100}} \put(0,0){\line($$

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



Modelo Numérico

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

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

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



Usando como base el código del Ejercicio 2, resuelva el sistema lineal de este problema de calibración. Para ello utilice el notebook EO3_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, \mathbf{d} , de la matriz, que en este caso debe ser: $2 - \omega^2/r$. Realice lo siguiente:

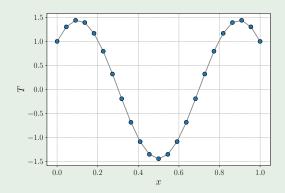
- Agregue una celda para definir los parámetros físicos y numéricos del problema (de manera similar al ejercicio 2).
- 2 Agregue una celda para resolver el sistema lineal. Observe que en este caso la construcción de la matriz deberá realizarse como sigue:

```
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
```

Solución:

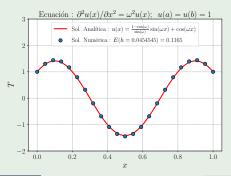


1 Agregue una celda con la implementación de la solución exacta:

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

6 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

- Calibración 1. Ejercicio 3.
- 2 Calibración 2: Condiciones tipo Neumman
 - Aproximación I.
 - Aproximación II.
 - Aproximación III.
 - Medición el error
 - Ejercicio 4.
- 3 Calibración 3: conductividad variable Ejercicio 5.
- A REFERENCIAS
- 6 CRÉDITOS

Modelo Matemático

Considere el siguiente problema:

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -e^x \quad x \in [0, 1]$$

$$\frac{du}{dn}(0) = 0$$

$$u(1) = 3$$
(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: $\frac{du}{dn}\Big|_{0} = A$, con A = 0 (condición tipo Neumman).
- $\bullet\,$ Se observa en la figura que se considera la normal a la frontera \vec{n} hacia afuera del dominio, por lo tanto: $\frac{du}{dn}\Big|_{0} = -\frac{du}{dx}\Big|_{0}$.
- Se puede entonces aproximar la derivada con DF hacia adelante: $-\frac{du}{dx}\Big|_{0} \approx -\frac{u_1 - u_0}{h} = A \Longrightarrow \boxed{u_0 - u_1 = hA}$ 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



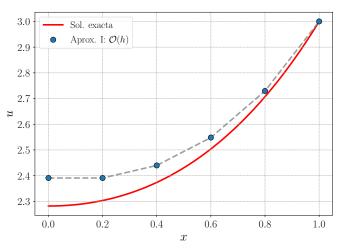
- Para los puntos 1 a N, la forma discreta de la ecuación (3) usando DF centradas es $-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1} = r^{-1}f_i$, donde $f(x) = -e^x$, es decir $f(x_i) = f_i = -e^{x_i}$.
- El sistema lineal con las condiciones de frontera incorporadas para esta aproximación es el siguiente:

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

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):

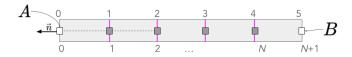


Entonces, la fórmula de la aproximación queda como sigue:

$$\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{0} = -\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{0} \approx -\frac{-3u_{0}+4u_{1}-u_{2}}{2h} = A \Longrightarrow \boxed{3u_{0}-4u_{1}+u_{2}=2hA}$$

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:

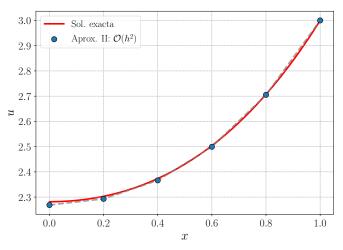
$$\implies \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{3} & -\mathbf{4} & \mathbf{1} & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -\mathbf{1} & \mathbf{2} \end{bmatrix}}_{(N+1)\times(N+1)}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

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

©LMCS (IGEF-UNAM)

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:

$$\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{0} = -\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{0} \approx -\frac{(u_{1} - \mathbf{u}_{-1})}{2h} = A \Longrightarrow \mathbf{u}_{-1} = 2hA + u_{1}$$

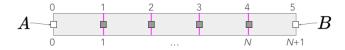
• Como no existe el nodo -1, escribimos la ecuación discreta para el nodo 0: $-\mathbf{u}_{-1} + 2u_0 - u_1 = r^{-1}f_0$ y sustituimos en ella la fórmula anterior para obtener:

$$\implies u_0 - u_1 = \frac{1}{2r}f_0 + hA$$

esta ecuación se debe incorporar al sistema lineal.

4□ > 4□ > 4 = > 4 = > = 900

Modelo Numérico: Aprox. de segundo orden (centrales)



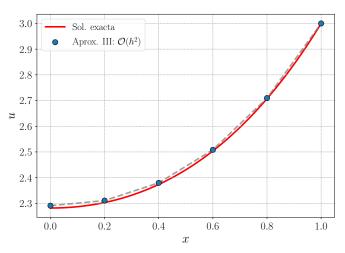
El **sistema lineal** para esta aproximación es el siguiente:

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

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

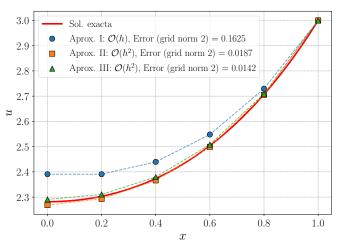
- Si $\hat{u}(x)$ representa la solución exacta del problema, definimos el error absoluto en el punto x_i de la aproximación como $e_i = u(x_i) \hat{u}(x_i)$.
- El vector $\mathbf{E} = (e_0, e_1, \dots, e_{N+1})$ representa el error en todos los puntos de la malla.
- La magnitud (norma) de este vector 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 ∞ : $||E||_{\infty} = \max_{1 \le i \le N} |e_i|$
- Grid norm 1: $||E||_1 = h \sum_{i=1}^{N} |e_i|$

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

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

MEDICIÓN DEL ERROR

Comparación de las tres aproximaciones.



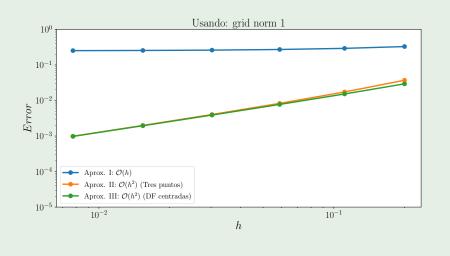
Abra el notebook E04_Calibracion2.ipynb del repositorio Mixbaal. Analice y entienda cada una de las 7 celdas de código que están implementadas. Observe que en la celda 6 se resuelve el problema con las tres aproximaciones para la condición de Neumman y se genera la gráfica presentada en la página anterior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

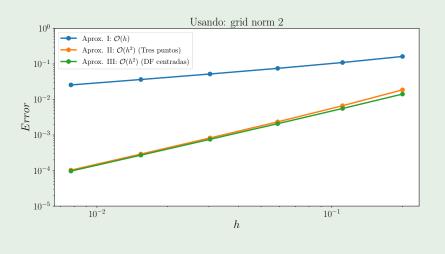
```
def meshRefining(fcondNeumman, nodes, norma):
```

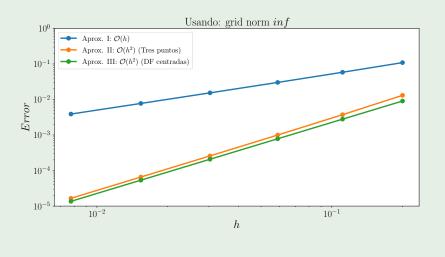
Esta función permite realizar un estudio de refinamiento de malla. En este tipo de estudio se resuelve el problema para diferente número de nodos y se calcula el error con respecto a la solución exacta.

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: $nodos = [4, 8, \ldots]$; 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.







Contenido

- Calibración 1. Ejercicio 3.
- 2 Calibración 2: Condiciones tipo Neumman

Aproximación I

Aproximación II.

Aproximación III.

Medición el error

- 3 Calibración 3: conductividad variable Ejercicio 5.
- 4 Referencias
- 6 Créditos

MODELO MATEMÁTICO Y NUMÉRICO

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

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

$$-\frac{du}{du} \quad \text{per le tents} \quad d\left(\frac{du}{dx}\right) \quad dg \quad \text{Fats}$$

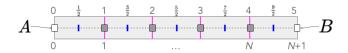
Definimos $g = \kappa \frac{du}{dx}$ por lo tanto $\frac{d}{dx} \left(\kappa \frac{du}{dx} \right) = \frac{dg}{dx}$. Esta derivada se puede aproximar como sigue (véase la figura):

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

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



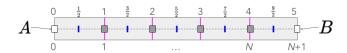
Usando (5), (6) y (7) en (4) obtenemos:

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

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

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

Modelo Numérico

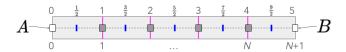


Las conductividades $\kappa_{i+\frac{1}{2}}$ y $\kappa_{i-\frac{1}{2}}$ se pueden aproximar de varias maneras, por ejemplo:

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

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

Modelo Numérico)



La ecuación (8) la podemos escribir como

 $N \times N$

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

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:

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

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)

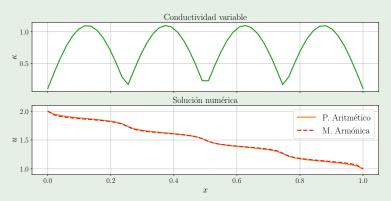
def mArmonica(a, b):
    return 2 * a * b / (a + b)
```

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):
```

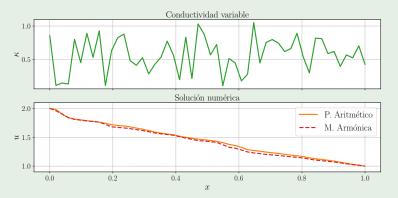
3 Las celdas 4, 5 y 6 contienen código que hace uso de las funciones anteriores para calcular la solución. Reproduzca los casos que se describen en las siguientes dos páginas:

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



4□ ト 4団 ト 4 豆 ト 4 豆 ・ 夕 Q C・

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

- Calibración 1. Ejercicio 3.
- 2 Calibración 2: Condiciones tipo Neumman

Aproximación l

Aproximación II.

Aproximación III

Medición el error

- 3 Calibración 3: conductividad variable Ejercicio 5.
- 4 Referencias
- 6 CRÉDITOS



- [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

- Calibración 1. Ejercicio 3.
- 2 Calibración 2: Condiciones tipo Neumman

Aproximación l

Aproximación II.

Aproximación III

Medición el error

- 3 Calibración 3: conductividad variable Ejercicio 5.
- 4 Referencias
- 6 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

