

OPTIMIZACION DE PARAMETROS PARA EL MODELADO DE UN PROBLEMA 1D DE DIFUSION DEL CALOR

OPTIMIZATION OF PARAMETERS FOR MODELING OF A PROBLEM 1D HEAT DIFFUSION

Óscar Babilonia ¹

¹Departamento de Física
Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, Barranquilla (Colombia)

Wilfran Leiva², Arnold Garcia³, Larry Teheran ⁴

² SEOEL
Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, Barranquilla (Colombia)
E-mail: GarciaA@gmail.com

Francisco Racedo ⁵

⁵Profesor departamento de Física
Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, Barranquilla (Colombia)
Email: fran@mail.uniatlantico.edu.co

Resumen

Obtener el modelo de un fenómeno físico basándose en medidas experimentales garantizará que ese modelo describirá mejor la realidad que los modelos ideales, obteniéndose las ecuaciones dinámicas que podrán llegar a predecir con mayor exactitud el comportamiento del sistema en el futuro. Se propone un método de optimización basado en el método de Gauss-Newton, el cual consistirá en reducir el error de ajuste entre un modelo planteado y un conjunto de datos correspondientes a cierto fenómeno descrito por una ecuación diferencial parcial (EDP). El método será aplicado para estimar el cambio de distribución de temperatura en un cuerpo a partir de datos sintéticos (no se obtienen por medición directa), sabiendo que el modelo ideal de este fenómeno está dado por la ecuación de difusión del calor. Teniendo en cuenta criterios como precisión, exactitud y rapidez de convergencia, se empleará el método de diferencias finitas para encontrar la solución de la EDP.

Palabras claves: FDTD; optimización; DIFUSIÓN.

Abstract

Get the model of a physical phenomenon based on experimental measurements will ensure that this model best described the reality that the ideal models, obtaining the dynamic equations which may extend to more accurately predict system behavior in the future. An optimization method based on Gauss-Newton method, which consists in reducing fitting error between a proposed model and a set of corresponding to a phenomenon described by a partial differential equation (PDE) data is proposed. The method will be applied to estimate the change of temperature distribution in a body from synthetic data (not obtained by direct measurement), knowing that the ideal model of this phenomenon is given by the equation of heat diffusion. Taking into account criteria such as precision, accuracy and speed of convergence, finite difference method is used to find the solution of the EDP.

Keywords: FDTD; optimización; DIFUSIÓN.

1. INTRODUCCION

El problema de mínimos cuadrados se convirtió en el pilar de la optimización en el modelado de fenómenos, aunque muchos de los aspectos básicos de la optimización se desarrollaron en los siglos XVIII y XIX el verdadero desarrollo de la programación matemática comienza con Andre-Louis Cholesky que durante la I guerra mundial desarrolló el primer algoritmo pensado para una computadora con el propósito de resolver ecuaciones matriciales en problemas de mínimos cuadrados, luego Dantzing alrededor de 1940 desarrollo un método de programación lineal para optimizar los recursos de las fuerzas militares en la segunda guerra mundial. Posteriormente se desarrolló por Powell Michael en 1970 el método de interpolación cuadrática sucesiva el cual sirvió como base para el desarrollando de algoritmos desarrolladores de modelos no lineales. Acoplar un método de resolución numérica de ecuaciones diferenciales parciales junto al problema de mínimos cuadrados no lineales, tal y como se presenta en este documento, surgirá como alternativa para aproximar modelos ideales a fenómenos reales descritos por ecuaciones diferenciales parciales, tales como el de difusión de calor. Actualmente el calor se considera como una forma de energía en tránsito debido a una diferencia de temperatura en el espacio que cumple con las leyes de la termodinámica, sin embargo a pesar de que la transferencia de calor se basa en las leyes de la termodinámica, estas no son suficientes para explicar el fenómeno de la transferencia de calor.

2. LA ECUACION DE DIFUSION

Es una EDP de tipo parabólico, esta es usada para analizar procesos de transporte. En fenómenos de la física se presentan este tipo de

procesos tal como el transporte de energía térmica que ocurre con la difusión de calor. Se sabe de las leyes de la termodinámica que cuando se encuentran diferentes partes de un cuerpo a distintas temperaturas, existirá un transporte de energía en forma de calor donde la energía térmica fluirá de las partes más calientes a las más frías y se establecerá gradualmente un estado de equilibrio térmico en donde la temperatura será distribuida uniformemente y permanecerá constante a través de todo el cuerpo. La dinámica de este proceso se describe por la ecuación de difusión de calor, el caso más simple se presenta para difusión unidimensional, un ejemplo será la difusión del calor en una barra de espesor despreciable, el cual se encuentra descrito por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = f(x, t), \quad x \in D \subset \mathbb{R} \quad (1)$$

Donde $f(x, t)$ es una expresión relacionada a las fuentes de calor externas, si $f(x, t) = 0$ se dice que el sistema está aislado térmicamente y no puede haber intercambio de calor con el entorno excepto en las fronteras, pero esto no ocurre en la realidad porque no es posible encontrar un aislante perfecto para separar el sistema del entorno, siempre existirá disipación de la energía térmica por radiación y/o contacto (considerando que el medio es un sólido).

$\alpha = \frac{k}{\rho c}$ es la *difusividad térmica* y es propia de cada cuerpo, donde k es el coeficiente de dilatación, ρ la densidad y c el calor específico del medio de propagación. Es posible considerar la difusividad térmica independiente de la posición si se asume que el cuerpo es homogéneo

En la descripción de un fenómeno no solo se requiere la EDP que describe el proceso, también es necesario el planteamiento del estado inicial (Condiciones iniciales) y el comportamiento en la frontera en la que ocurre el fenómeno (Condi-

ciones de frontera), esto se debe a que la EDP por si sola tendrá como solución una familia de funciones. La solución debe ser única para que se le pueda dar una interpretación física. Cuando se posee la EDP junto con sus condiciones iniciales y de frontera se dice que el problema está bien planteado.

3. SOLUCIÓN ECUACIÓN DE DIFUSIÓN 1-D POR FDM

A continuación se aplicará el método de diferencias finitas para modelar la difusión del calor a través de una barra de cobre con las siguientes particularidades.

- La barra posee un espesor despreciable, lo cual genera que la difusión se de a través de una sola dimensión.
- La barra posee una longitud finita $L = 180$ mm.
- El material que compone la barra es homogéneo con coeficiente de difusión $\alpha = 111 \text{ mm}^2/\text{s}$ correspondiente al cobre.
- La barra no se encuentra aislada térmicamente, posee una fuente de calor externa modelada por un $f(x, t)$ lo cual convierte la ecuación de difusión en una EDP no homogénea.
- La temperatura de los extremos de la barra es fija.

Se asume que la barra ha sufrido un calentamiento inicial que generó una distribución de temperatura descrita por la función $T(x, 0) = \sin(x) + 0,6 * \sin(3x)$ como se muestra en la figura.

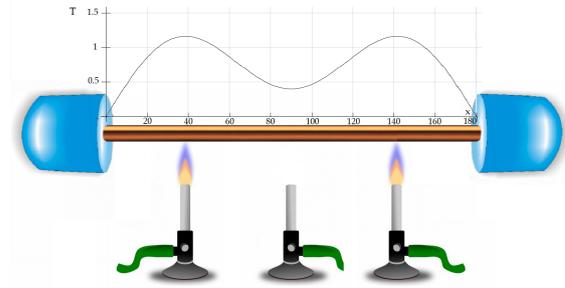


Figura 1. Distribución de temperatura inicial en un problema de difusión del calor.

Se puede decir que el siguiente problema especifica los supuestos anteriores.

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 4e^{-\left(\frac{x-90}{30}\right)^2} & \text{para } 0 \leq x \leq 180\text{mm} \\ T(x, t) = 0 & \text{en } \partial\Omega \\ T_0 = T(x, 0) = \sin(x) + 0,6 * \sin(3x) & \text{para } t = 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

Donde se puede observar que luego de dadas las condiciones iniciales al sistema se le introduce una fuente con características gaussianas con una fase de 90 mm la cual ubica a la fuente en el centro de la barra como lo describe la figura.

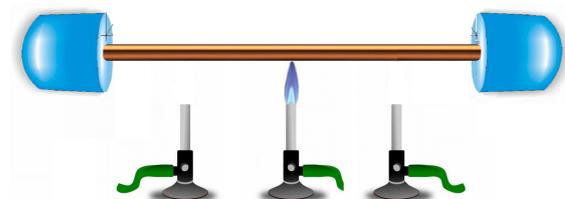


Figura 2. Modelo de difusión del calor unidimensional con una fuente externa.

Donde la distribución de temperatura para $t > 0$ solo puede ser conocida al resolver el problema planteado. Para la solución de dicho problema por el método de diferencias finitas se introduce una malla en la cual se ubicaran los valores conocidos determinados por las condiciones iniciales y las condiciones de frontera, para este problema sería el siguiente dominio.

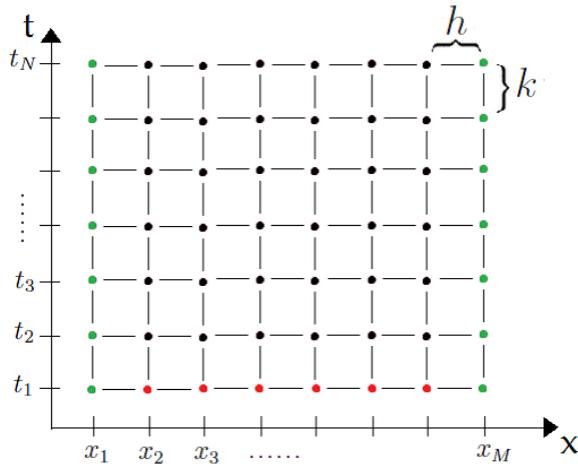


Figura 3. Condiciones iniciales y de contorno en un dominio 1D discretizado.

En el dominio discretizado se observan lo que se denomina puntos de malla, al solucionar el problema solo en estos puntos se conocerá la solución de la función, en las zonas intermedias de los puntos no se puede conocer la solución a menos de que los factores h y k sean modificados de tal forma que la malla se haga mas fina y se obtengan mayor número de puntos lo que con lleva a obtener mas resultados de la solución para el mismo dominio.

La función evaluada en los puntos de malla de color rojo son conocida por las condiciones iniciales que se le imponen al problema, de la misma forma ocurre para los puntos de malla de color verde por las condiciones de frontera.

La solución del problema se alojara en una matriz llamada *matriz solución*. Para trabajar con esta matriz inicialmente se debe:

- Realizar el análisis de Von Neumann para definir los valores de los intervalos espacial y temporal h y k .
- Obtener el número de intervalos M y N .
- Definir el dominio espacial en que se trabajará, para este caso $0 \leq x \leq 180mm$
- Definir el dominio temporal, para este caso se analizará la evolución del sistema durante 17 segundos $0 \leq t \leq 17 s$.
- Introducir las condiciones iniciales a la matriz solución.

- Introducir las condiciones de frontera a la matriz solución.

4. EL METODO EXPLICITO

El método explícito consiste en escoger un esquema que al expandirlo se forma un sistema de ecuaciones donde en cada ecuación quedará una incógnita en función de factores conocidos a partir de valores anteriores de n y m , lo que hace inmediato conocer la incógnita sin necesidad de conocer la solución de las demás ecuaciones.

Para ilustrar el método explícito se toma el problema y se discretiza con el esquema forward-time central-space descrito por.

$$\frac{T_m^{n+1} - T_m^n}{k} - \alpha \frac{T_{m+1}^n - 2T_m^n + T_{m-1}^n}{h^2} = 4e^{-(\frac{x_m-90}{30})^2} \tag{3}$$

donde al despejar el termino T_m^{n+1} se obtiene:

$$T_m^{n+1} = T_m^n + \alpha\mu (T_{m+1}^n - 2T_m^n + T_{m-1}^n) + 4ke^{-(\frac{x_m-90}{30})^2} \tag{4}$$

Donde se ha tomado $\mu = \frac{k}{h^2}$. Claramente se observa como se relaciona cada punto de malla con los puntos vecinos, esta relación lleva a la creación de lo que se le denomina *molécula computacional* o *célula reticular* la cual no es mas que una forma de ilustrar la relación que se da entre cada incógnita del esquema con sus puntos vecinos.

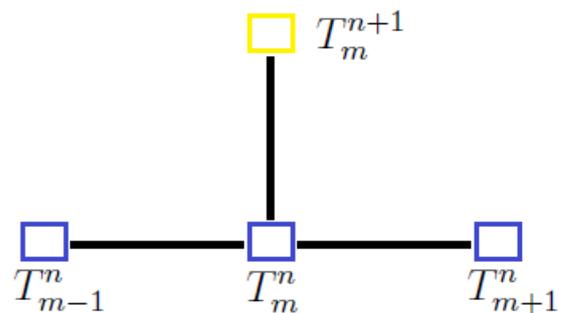


Figura 4. Molécula computacional del esquema forward-time central-space.

La molécula computacional brinda una gran ayuda ilustrativa ya que por medio de los valores que se

le asignan a n y m la molécula puede ser desplazada a través de la malla de tal manera que se acomoden los puntos conocidos en los cuadros de color azul, de esta forma el punto que quede ubicado en el cuadro amarillo podrá conocerse inmediatamente a partir de la relación que se forma, es por esta razón que cuando se utiliza el método de diferencias finitas con moléculas computacionales que posean esta característica son denominados explícitos.

Antes de empezar una implementación con cualquier esquema se debe determinar si cumple con el criterio de estabilidad. Con el objetivo de verificar cuando el método es estable se utiliza el análisis de Von Neumann sustituyendo $T_m^n = g^n e^{im\theta}$ en el esquema FTCS. Con lo cual tenemos:

$$g^{n+1} e^{im\theta} = g^n e^{im\theta} + \alpha\mu \left(g^n e^{i(m+1)\theta} - 2g^n e^{im\theta} + g^n e^{i(m-1)\theta} \right)$$

Dividimos todo por $g^n e^{im\theta}$.

$$g = 1 + \alpha\mu \left(e^{i\theta} - 2 + e^{-i\theta} \right)$$

Reemplazamos $2\cos(\theta) = e^{i\theta} + e^{-i\theta}$ y factorizamos -2 . Quedando:

$$g = 1 - 2\alpha\mu (1 - \cos(\theta)) \quad (5)$$

El factor de amplificación g debe cumplir la condición de estabilidad $|g| \leq 1$, esto equivale a decir:

$$|g|^2 \leq 1 \quad (6)$$

Lo que resulta en:

$$-1 \leq 1 - 2\alpha\mu (1 - \cos(\theta)) \leq 1 \quad (7)$$

Realizando una inspección cuidadosa a la relación anterior se puede decir que para cualquier valor de θ la desigualdad de la derecha siempre es satisfecha debido a que $\alpha\mu$ siempre es positivo. Ahora tomando los valores de θ que hacen al coseno mínimo y máximo la relación se convierte en:

$$-1 \leq 1 - 4\alpha\mu \leq 1 \quad (8)$$

Notemos que la desigualdad se cumple para $0 \leq \alpha\mu \leq 0,5$, con lo que se debe cumplir esta condición

para que sea establecida la estabilidad en el esquema. A partir de esta relación y sabiendo que $\mu = k/h^2$ se puede escribir $k \leq 0,5h^2/\alpha$ cuya desigualdad genera el área de estabilidad.

La relación anterior es muy importante al momento de definir los valores de h y k pues ellos son los que proporcionan la estabilidad y su escogencia debe caer en un punto contenido en el area roja de la figura (??). Así pues definiendo un intervalo espacial de $h = 9mm$ y el coeficiente de difusión del cobre $\alpha = 111mm^2/s$ la implementación en Matlab podría ser la siguiente:

```
h=9;           %Intervalo espacial en mm
alfa=111;     %Coeficiente de difusión del cobre
mu=0.48/alfa; %Criterio de estabilidad
k=h^2*mu;    %Intervalo temporal
x=0:h:180;   %dominio espacial
t=0:k:17;    %dominio temporal
M=length(x); %Numero de intervalos espaciales
N=length(t); %Numero de intervalos temporales
```

onde el intervalo temporal es $k = 0:350s$ y ha sido calculado de tal forma que se cumpla el criterio de estabilidad con $k = h^2 = 0 : 48 < 0 : 5$, el dominio espacial se ha definido con 0_x180mm tal cual como lo plantea el problema al igual que el dominio temporal 0_t17s . Los vectores "x" y "t" definidos contienen la ubicación de los puntos de malla en el dominio y la función length() proporciona el numero de dimensiones que contiene un vector lo que corresponde a el número de intervalos.

A continuación se crea la matriz solución la cual llamaremos T, primero que todo se procede a introducir las condiciones iniciales y condiciones de frontera como sigue:

```
T0=inline(' (sind(x)-+0.6*sind(3*x))','x'); %Condicion inicial
for m=1:M
T(1,m)=T0(x(m)); %Introduciendo Estado inicial del sistema
end
for n=1:N
T(n,1)=0; %Aplicando condición de frontera izquierda
T(n,M)=0; %Aplicando condición de frontera derecha
End
```

La función T0 pudo haber sido declarada en un archivo .m independiente lo cual es una gran ventaja si se quisiera realizar cambios en esta condición.

Hasta aquí se tiene la matriz solución tal como lo ilustra la figura, para obtener los valores de los demas puntos de mallas se expande la relación inicialmente

para $m = \{2, 3, 4 \dots (M - 1)\}$ con $n = 1$ con lo cual se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 T_1^2 &= \text{Frontera izquierda} \\
 T_2^2 &= T_2^1 + \alpha\mu (T_3^1 - 2T_2^1 + T_1^1) + kf(x_2) \\
 T_3^2 &= T_3^1 + \alpha\mu (T_4^1 - 2T_3^1 + T_2^1) + kf(x_3) \\
 T_4^2 &= T_4^1 + \alpha\mu (T_5^1 - 2T_4^1 + T_3^1) + kf(x_4) \\
 &\vdots \\
 T_{M-1}^2 &= T_{M-1}^1 + \alpha\mu (T_M^1 - 2T_{M-1}^1 + T_{M-2}^1) + kf(x_{M-1}) \\
 T_M^2 &= \text{Frontera derecha}
 \end{aligned}$$

Donde al resolver dicho sistema se obtendrá la solución del segundo nivel temporal. Luego se hace el mismo proceso para $n = \{2, 3, 4, 5 \dots (N - 1)\}$, notar que en los puntos para $n = 1$ las funciones T_m^1 son proporcionadas por las condiciones iniciales al igual que las funciones T_1^n y T_M^n por las condiciones de frontera.

La implementación de este paso podría realizarse de la siguiente manera:

```

f=inline('4*exp(-(x-90)/30)^2','x'); %Declarando función fuente
for n=1:N-1
    for m=2:M-1
        T(n+1,m)=T(n,m)+(alfa*mu*(T(n,m+1)-2*T(n,m)+T(n,m-1))) + k*f(x(m));
    end
    plot(x,T(n,:)); xlabel('x'); ylabel('T');
end
    
```

El for interno llena los niveles espaciales para un nivel temporal que es proporcionado por el for externo. La función `plot()` gráfica la relación T vs x para cada nivel temporal con lo que se obtendrá la evolución de dicha relación. Los comando `xlabel()` y `ylabel()` son usados con el fin de darle una mejor presentación a la gráfica obtenida. con la anterior implementación se obtuvieron los siguientes resultados:

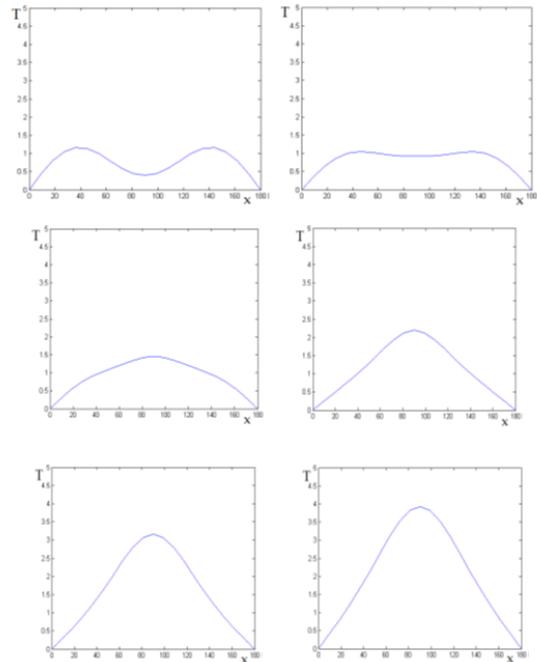


Figura 6. Comportamiento de la distribución de temperatura a través de una barra sometida a condiciones de frontera fijas y a una fuente externa.

Las figuras mostradas anteriormente corresponden a la solución para un nivel temporal determinado. se observa como inicialmente se tiene un calentamiento máximo en los puntos $x=40\text{mm}$ y $x=140\text{mm}$ luego con cada paso en el tiempo se observa como gradualmente se va haciendo máximo en la posición $x=90\text{mm}$ lo cual se esperaba ya que en este punto fue ubicada la fuente y dicha fuente posee una amplitud mayor que las dos fuentes dadas por las condiciones iniciales.

Todos los niveles temporales se encuentran alojados en la matriz solución T cuya gráfica en 3D tomando el eje x como eje temporal sería:

```

mesh(x,t,T);
xlabel('x'); ylabel('t'); zlabel('T');
axis([0,180,0,20,0,5]);
    
```

Para obtener la siguiente figura:

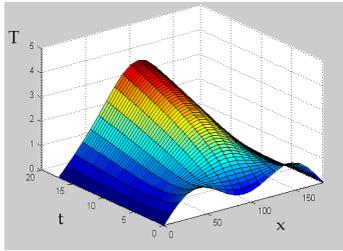


Figura 7. Evolución de la distribución de temperatura en una barra de espesor despreciable con condiciones de frontera Dirichlet.

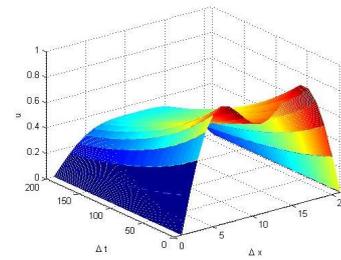


Figura 8. Superficie de la solución real.

5. ANÁLISIS Y RESULTADOS

Estimación de parámetros en ecuaciones diferenciales parciales considerando la solución de una particular EDP:

$$u(x, t, \Theta), \text{ con } t > 0, \text{ y } x_l < x < x_u \quad (9)$$

Donde t y x representan tiempo y espacio respectivamente y $\Theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)^T \in \mathbb{R}^p$ es el vector de parámetros. En la descripción de un fenómeno los valores de los parámetros Θ^* son desconocidos (quienes proporcionan los estados reales del modelo), pero se sabe que están relacionados con el modelo (9) a través de las medidas (datos).

Denotando los puntos de observaciones en el tiempo y el espacio como t_n y x_m , donde $1 \leq n \leq N$ y $1 \leq m \leq M$, asumiendo que k y h son las distancias entre dos puntos consecutivos en el tiempo y el espacio respectivamente. También denotando:

$$\begin{aligned} u_m^n(\Theta) &= u(t_n, x_m, \Theta) \\ \tilde{u}_m^n &= u_m^n(\Theta^*) \end{aligned}$$

Por otra parte, las medidas pueden ser escritas como:

$$y_m^n = \tilde{u}_m^n + \sigma_m^n \quad (10)$$

Donde y_m^n son el conjunto de datos y σ_m^n el error en el punto (ruido) (t_n, x_m) respectivamente, así se obtienen los datos sintéticos. Se asume que el error posee una distribución normal con media igual a cero y matriz de covarianza $R^{(N \times M)}$. La figura (??) muestra un simple ejemplo de la relación entre las medidas y_m^n y el estado del modelo ideal (desconocido) \tilde{u}_m^n .

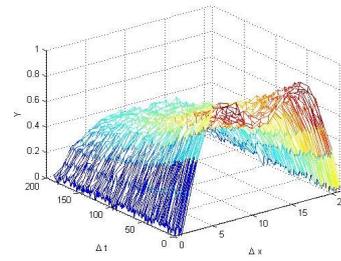


Figura 9. Superficie de la solución medidas.

Entonces es posible formular el problema inverso como sigue: Dado el conjunto de datos $Y = y_m^n$ con $1 \leq n \leq N$ y $1 \leq m \leq M \in \mathbb{R}^{(N \times M)}$ y dado el modelo (9) se puede encontrar los parámetros Θ^* que mejor se ajusten a los datos.

Para cualquier valor Θ , se introduce la matriz de residuales:

$$R(\Theta) = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^M (u_m^1(\Theta) - y_m^1) \\ \sum_{i=1}^M (u_m^2(\Theta) - y_m^2) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^M (u_m^N(\Theta) - y_m^N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1(\Theta) \\ r_2(\Theta) \\ \vdots \\ r_N(\Theta) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N)} \quad (11)$$

tenga en cuenta que, se tienen residuales para cada observación en el tiempo t_n y no para observaciones en cada punto (t_n, x_m) . Esto se puede extender fácilmente a problemas con más dimensiones espaciales de la siguiente manera:

$$R(\Theta) = \begin{bmatrix} \sum_{i_1=1, i_2=1, \dots, i_d=1}^{M_1, M_2, \dots, M_d} (u_{m_1, m_2, \dots, m_d}^1(\Theta) - y_{m_1, m_2, \dots, m_d}^1) \\ \sum_{i_1=1, i_2=1, \dots, i_d=1}^{M_1, M_2, \dots, M_d} (u_{m_1, m_2, \dots, m_d}^2(\Theta) - y_{m_1, m_2, \dots, m_d}^2) \\ \vdots \\ \sum_{i_1=1, i_2=1, \dots, i_d=1}^{M_1, M_2, \dots, M_d} (u_{m_1, m_2, \dots, m_d}^N(\Theta) - y_{m_1, m_2, \dots, m_d}^N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1(\Theta) \\ r_2(\Theta) \\ \vdots \\ r_N(\Theta) \end{bmatrix} \quad (12)$$

$t = \{t_0, t_1, \dots, t_N\}$ Puntos discretos en el tiempo
 $x = \{x_0, x_1, \dots, x_M\}$ Puntos discretos en el espacio
 $Y = \{y_m^n, 1 \leq n \leq N, 1 \leq m \leq M, \text{ Medidas en cada}$

punto i_{max} Número máximo de iteraciones $\Theta^{(0)} \leftarrow$
 Aproximación inicial de los parámetros $i_0 \rightarrow i_{max}$
 $V(\Theta^{(i)}) = \{v_m^n(\Theta^{(i)}) \leftarrow u_m^n(\Theta^{(i)})\}$ Modelar esta-
 do con $\Theta^{(i)}$ $R(\Theta^{(i)}) = \{r_n \leftarrow \sum_{i=1}^M (u_m^n(\Theta) - y_m^n)\}$
 Calcular residuales con cada n $J(\Theta^{(i)}) =$
 $\left\{ \frac{\partial r_n(\Theta)}{\partial \theta_p} \leftarrow \frac{r_n(\Theta_{p+\varepsilon}) - r_n(\Theta_{p-\varepsilon})}{2\varepsilon} \right\}$ Calcular Jacobiano
 $\Delta\Theta \leftarrow -[J(\Theta^{(i)})^T J(\Theta^{(i)})]^{-1} J(\Theta^{(i)})^T R(\Theta^{(i)})$ Calcu-
 lar el paso de Newton $\Theta^{(i+1)} \leftarrow \Theta^{(i)} + \Delta\Theta$ Obtener
 los nuevos parámetros

6. CONCLUSIONES

A partir de la implementación del método de diferencias finitas se obtiene la solución de la ecuación de difusión para problemas con una dimension temporal y una o mas dimensiones espaciales. Haciendo uso del lenguaje de programación MATLAB se programó este método en archivos .m para luego ser llamada como una función v3() la cual devuelve la solución de la ecuación de difusión con el esquema FTCS. Análogamente se realizo para el problema 2D con el esquema de Crank-Nicolson. Las simulaciones mostradas muestran las características que se deben tener la solución de cada problema planteado al aplicar el FDM y se observa como reproducen las leyes físicas implicadas en el proceso.

Crear un empalme entre un método de optimización y uno de resolución de ecuaciones diferenciales parciales brinda la posibilidad de obtener modelos óptimos a partir de un conjunto de datos tal y como se mostró en los resultados. los modelos óptimos obtenidos con la estimación de parámetros no fue exactamente igual al modelo ideal tal y como se observo en el caso unidimensional pero reproduce bastante bien el conjunto de datos, si se escoge un modelo adecuado el error tiende a cero luego de un número considerable de iteraciones, se observó que cuando se escoge un tipo de modelo adecuado se obtienen buenos resultados incluso cuando se cuentan con datos pobres e imprecisos como en el caso bidimensional que se tenia desviación del error un poco mayor del 5% lo cual es desconsiderable desde el punto de vista experimental.

En este caso teniendo en cuenta la rapidez de convergencia se usó el método de Gauss-Newton junto con el método de diferencias finitas pero el empalme de estos dos métodos poseen varias desventajas tales como el sacrificio de precision por ganar rapidez de convergencia, la limitación de trabajar solo con dominios rectangulares, requerimiento de que se escoja un modelo muy adecuado al igual que se debe dar una buena aproximación inicial para que se de la convergencia. Estas desventajas son apreciables si se trabaja-se con problemas mas complejos, pero dichas desventajas pueden ser removidas si se implementase diferentes tipos de empalmes tales como:

el metodo de Newton junto con el metodo de diferencias finitas (en caso de que se necesite mayor precision), el metodo Gauss-Newton con elementos finitos (en caso de que se necesitara trabajar con un dominio irregular), el metodo de secante con el de volumentes finitos o cualquier otra combinación que sea necesaria según el tipo de problema y el balance de precision, rapidez de convergencia.

Como aporte al laboratorio quedan los códigos de las implementaciones realizadas de las cuales se podrá hacer uso y modificaciones para su mejoramiento.

Reconocimiento: Este artículo es un producto del Proyecto *SEMILLERO DE INVESTIGACIÓN - GRUPO DE INVESTIGACIÓN GEOEL* Financiado por Colciencias y la Universidad del Atlántico.

Referencias

- [1] Ortega J. *Historia de la termodinamica*. Notas de clase.
- [2] Tassi, P. A., and C. R. Engelberger. *Introducción al Método de Diferencias Finitas*. Notas de clase.
- [3] Arfken, George B., Hans J. Weber, and Frank E. Harris. *Mathematical methods for physicists*. Academic press, 2005.
- [4] Romero, S. Moreno, F. Rodriguez, I. *Introducción a las Ecuaciones en Derivadas Parciales*. Primera Edición. Universidad de Huelva, 2001.
- [5] Alvarez R. A. *Acoplamiento MEF-MDF para solucionar la ecuación de conducción del calor con condiciones de frontera tipo I*. Tesis de pregrado programa de física - Universidad del Atlántico, 2013.
- [6] Courant, Richard, and David Hilbert. *Methods of mathe-*

- mathematical physics*. Vol. 1 y 2. First English Edition. Wiley-VCH, 2008.
- [7] Brodkey, Robert S., and Harry C. Hershey. *Transport Phenomena, Volume 2: A Unified Approach*. Vol. 2. Brodkey publishing, 2003.
- [8] Strikwerda, John. *Finite difference schemes and partial differential equations*. Second Edition. Society for Industrial and Applied Mathematics. Philadelphia, 2004.
- [9] Rodriguez, Oscar. *Extensión del método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo para el estudio de estructuras híbridas de microondas incluyendo circuitos concentrados activos y pasivos*. Santander, 2008. 222p. Tesis. Universidad de Cantabria. Departamento de ingeniería de comunicaciones.
- [10] Zuazua, E. *Métodos Numéricos de resolución de Ecuaciones en Derivadas Parciales*. Universidad Autonoma de Madrid. Primera Edición. 2007.
- [11] Dennis, John E., and Robert B. Schnabel. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. Vol. 16. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.
- [12] Nocedal, Jorge, and Stephen J. Wright. *Numerical optimization*. Second Edition. Springer-Verlag, 2006.
- [13] Espinoza, C. y Nino, Y. *Metodo de diferencias finitas*. Notas de Clase, 2001.
- [14] Holman J. P. *Heat transfer*. New York: McGraw-Hill, 1986.
- [15] Amemiya, Takeshi. *Nonlinear regression models*. Handbook of econometrics 1 (1983): 333-389.
- [16] Marquardt, Donald W. *An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters*. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics 11.2 (1963): 431-441.

Para citar este artículo: Óscar Babilonia et al. 2014, "OPTIMIZACION DE PARAMETROS PARA EL MODELADO DE UN PROBLEMA 1D DE DIFUSION DEL CALOR". Disponible en Revistas y Publicaciones de la Universidad del Atlántico en <http://investigaciones.uniatlantico.edu.co/revistas/index.php/MATUA>.