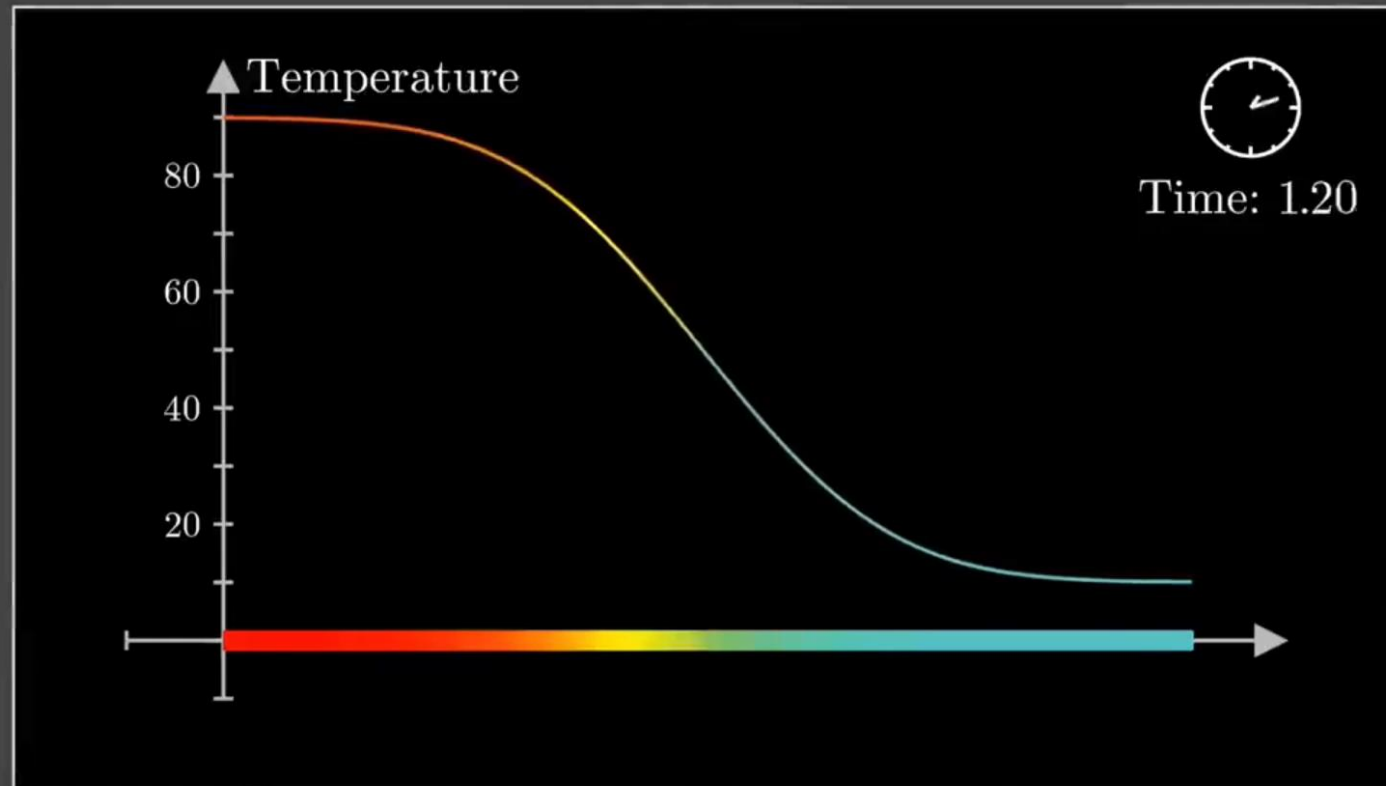


Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación
ECUACIONES DIFERENCIALES Y SUS APLICACIONES
Ecuación del calor (difusión, PDE parabólica)

Last chap¹



Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

DIFERENCIAS FINITAS EN 1D

El método de diferencias Finitas está basado en aproximaciones que permiten reemplazar ecuaciones diferenciales por ecuaciones de diferencia. Estas aproximaciones de Diferencias Finitas son de forma algebraica; relacionan el valor de la variable dependiente, en un punto dentro de la región de solución, con sus valores en algunos puntos vecinos. En base a esto, la solución por Diferencias Finitas básicamente involucra 3 pasos:

- **Discretización.**
- **Aproximación de la Ecuación Diferencial.**
- **Solución de las Ecuaciones en Diferencias**

Base Teórica del Método de Diferencias Finitas

De la mecánica del continuo surgen modelos matemáticos que sirven para resolver muchos problemas de la ingeniería. Entre ellos un modelo muy utilizado es el de transporte de escalares.

$$\rho C_p \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \right) + c \phi = \nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) + Q$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

DIFERENCIAS FINITAS EN 1D

Si ρC_p son constante, se suele redefinir los coeficientes de la anterior expresión de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}c &\Leftarrow \frac{c}{\rho C_p} \\Q &\Leftarrow \frac{Q}{\rho C_p} \\\kappa &\Leftarrow \frac{\kappa}{\rho C_p}\end{aligned}$$

Nota: Ecuación de conducción de calor transitoria (no estacionaria)

El término $\rho C_p \frac{\partial \phi}{\partial t}$, aparece porque la temperatura cambia en el tiempo, y el material almacena o libera energía térmica.

El término ρC_p representa la **capacidad calorífica volumétrica** $[J/m^3 K]$, es decir, cuánta energía puede almacenar el material por unidad de volumen y por grado de temperatura.

Si ρC_p es muy grande, entonces el material "**almacena mucho calor**" y la temperatura cambia lentamente.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

DIFERENCIAS FINITAS EN 1D

Ecuación de conducción de calor estacionaria:

En estado estacionario, ya no hay acumulación de energía $\frac{\partial \phi}{\partial t}=0$.

Es decir, **ya no hay almacenamiento de energía**, por lo tanto, el término con ρC_p desaparece..

Lo único que queda es el balance entre flujo de calor conducido $k\nabla\phi$ (entre el calor que entra/sale por conducción (k) y la fuente térmica interna $Q(x)$.

Interpretación física:

En el **transitorio**, la temperatura todavía está cambiando en el tiempo, es decir, el material actúa como un “almacén de calor”, de allí que tengamos el término ρC_p . El material se comporta como una “batería térmica”, guarda y libera calor,

En el **estacionario**, la temperatura dejó de cambiar, es decir, no hay almacenamiento, solo importa cómo se conduce el calor (k) y si se genera o se destruye en el interior. La batería dejó de cargarse/descargarse, solo importa cómo se transmite el calor (k).

A veces pasamos por alto el término ρC_p en los problemas prácticos pero es importante en el modelo que utilicemos, incluso puede depender de la variable dependiente.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

DIFERENCIAS FINITAS EN 1D

Definimos Ω , tal que represente el dominio de definición de nuestro problema, en nuestro caso restringido a coordenadas cartesianas sobre dominios rectangulares y alineados con los ejes cartesianos.

Por ejemplo: $[x_0, x_1] \times [y_0, y_1]$, con (x_0, y_0) , el vértice inferior izquierdo del dominio rectangular y (x_1, y_1) , el rincón superior derecho. El contorno del dominio es representado por $\Gamma = \Gamma_\phi \cup \Gamma_q \cup \Gamma_h$, siendo cada uno de los Γ , la parte del contorno donde se aplican condiciones de tipo Dirichlet, Neumann o Mixtas (Robin).

Las condiciones de borde expresadas matemáticamente, las podemos definir como

$$\begin{aligned}\phi &= \bar{\phi} & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_\phi \\ -\kappa \nabla \phi \cdot \eta &= \bar{q} & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_q \\ \kappa \nabla \phi \cdot \eta + h(\phi - \phi_\infty) &= 0 & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_h\end{aligned}$$

Nota: En este curso no vamos a tener en cuenta el término: $\mathbf{v} \cdot \nabla \phi$ donde el escalar es advectado por la velocidad del medio que lo transporta.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

DIFERENCIAS FINITAS EN 1D

Aplicación a problemas estacionarios, solo conducción y términos fuentes

El objetivo es simplificar el problema y sólo utilizar una dimensión espacial asumiendo un estado estacionario. Las variables independientes, normalmente $\mathbf{x} = [x, y, z]$, y el tiempo (t) se reducen simplemente a x con lo cual las ecuaciones a derivadas parciales (PDEs) se transforman en ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs). En este caso hemos dejado el término $c\phi$, que representa un término reactivo.

$$c\phi = \frac{d}{dx} \left(\kappa \frac{d\phi}{dx} \right) + Q$$

El término $c\phi$, se suele llamar **término reactivo** o de **absorción/decadencia**.

Interpretación física:

Matemáticamente, es una contribución proporcional a la propia variable temporal ϕ . **Físicamente**, significa que la **temperatura (o concentración, si hablamos de transporte de masa)** tiende a **decaer de manera proporcional a su valor local**. El parámetro c actúa como una constante de “pérdida” o “consumo” de calor.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

DIFERENCIAS FINITAS EN 1D

Ejemplos:

En **transferencia de masa**, si se modela la difusión de un contaminante con degradación química, se pone un término $-cC$.

En **transferencia de calor**, si el medio absorbe calor por un proceso de **reacción endotérmica** o por **radiación simplificada lineal**, puede modelarse como $-c\phi$. También puede aparecer con signo positivo $+c\phi$: en ese caso se interpreta como una **fuentes reactiva**, donde la cantidad crece proporcionalmente a sí misma (tipo inestabilidad, como una reacción exotérmica auto catalítica).

En muchos libros a esta clase de ecuaciones se las llama **ecuaciones de difusión-reacción**, porque combinan transporte (difusión) y transformación (reacción lineal en este caso).

Queremos resolver el campo de temperaturas a través de una pared de material ($-\infty \leq y, z \leq +\infty$; $0 \leq x \leq L_x$). La temperatura en $x = 0, L_x$ es mantenida a $\bar{\phi}_0, \bar{\phi}_{L_x}$, y hay una fuente de calor repartida $Q(x)$:

$$\begin{aligned}k \frac{d^2 \phi}{dx^2} &= -Q(x) \\ \phi(0) &= \bar{\phi}_0 \\ \phi(L_x) &= \bar{\phi}_{L_x}\end{aligned}$$

donde se asume un valor constante de conductividad. Dividimos el intervalo en L segmentos de longitud $\Delta x = \frac{L_x}{L}$, y llamaremos “nodos” o “puntos de la grilla” a los extremos de dichos segmentos:

$$x_l = l\Delta x, \quad l = 0, 1, 2, \dots, L, \quad x_0 = 0, \quad x_L = L_x$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

2.3.2. Desarrollo en Serie de Taylor

Si bien la ecuación que debemos resolver es de segundo orden, empezaremos, por simplicidad, por desarrollar aproximaciones en diferencias para la derivada de primer orden,

$$\begin{aligned}\phi(x_{l+1}) &= \phi(x_l + \Delta x) \\ &= \phi(x_l) + \Delta x \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=x_l} + \frac{\Delta x^2}{2!} \left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x=x_l+\theta_1\Delta x} \quad \text{donde : } 0 \leq \theta_1 \leq 1\end{aligned}\quad (2.7)$$

Indicando $f_l = f(x_l)$ para cualquier función $f(x)$, tenemos:

$$\phi_{l+1} = \phi_l + \Delta x \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_{l+\theta_1} \quad (2.8)$$

Donde el subíndice $l + \theta_1$ es una extensión de la notación que indica evaluación en $(l + \theta_1)\Delta x$. Despejando la derivada de primer orden:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l = \frac{\phi_{l+1} - \phi_l}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_{l+\theta_1} \quad (2.9)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

A esta aproximación para la derivada de primer orden la denominamos “*por diferencia hacia adelante*” (*forward difference*):

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_l \approx \frac{\phi_{l+1} - \phi_l}{\Delta x} \quad (2.10)$$

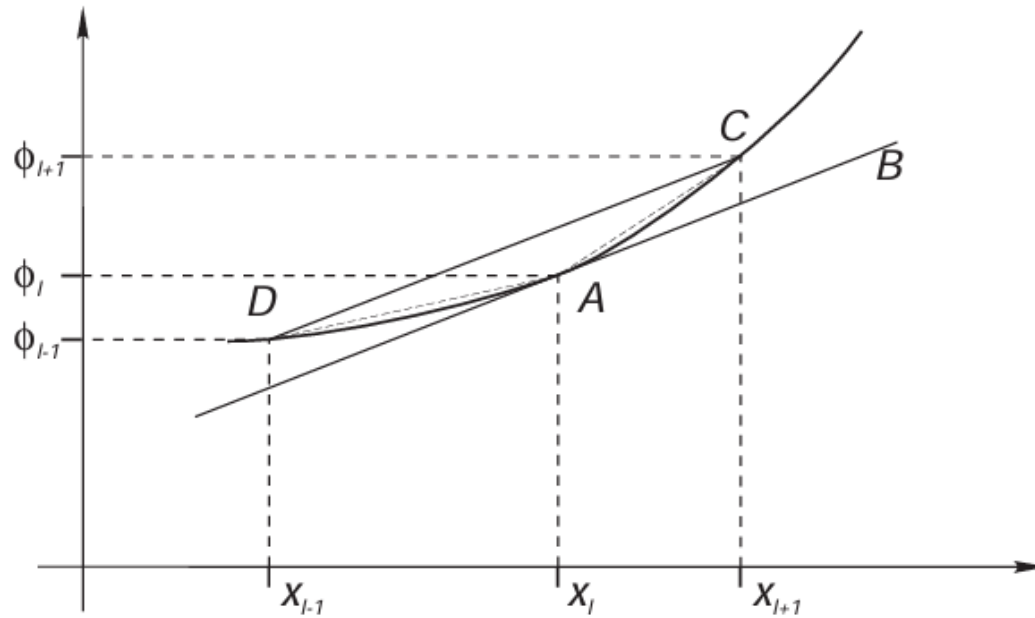
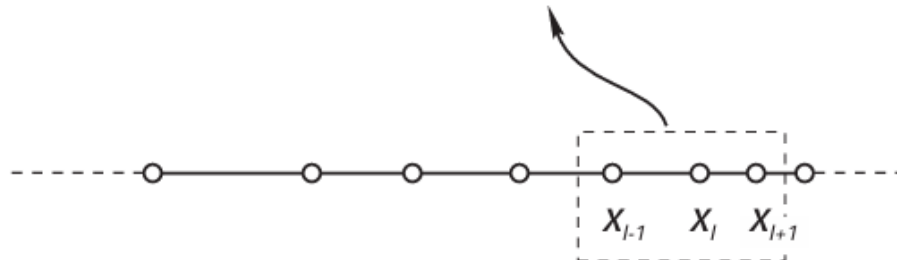


Figura 2.1: Interpretación geométrica de las diferentes aproximaciones por diferencias finitas a la derivada



Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Véase la Figura 2.1 para una interpretación gráfica de esta aproximación. Hemos aproximado la derivada en el punto x_l por la pendiente de la secante a la curva que pasa por los puntos x_l y x_{l+1} (segmento AC). El error de esta aproximación es:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\Delta x}{2} \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_{l+\theta_1} \\ |E| &\leq \frac{\Delta x}{2} \max_{[x_l, x_{l+1}]} \left| \frac{d^2 \phi}{dx^2} \right| \leq C' \Delta x, \quad \Delta x \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

En forma similar, la aproximación hacia atrás (“*backward difference*”) da:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l \approx \frac{\phi_l - \phi_{l-1}}{\Delta x} \quad (2.12)$$

$$|E| \leq \frac{\Delta x}{2} \max_{[x_{l-1}, x_l]} \left| \frac{d^2 \phi}{dx^2} \right| \leq C' \Delta x, \quad \Delta x \rightarrow 0 \quad (2.13)$$

que corresponde a la pendiente del segmento DA en la Figura.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

2.3.3. Aproximaciones de mayor orden

Realizando desarrollos de mayor orden:

$$\phi_{l\pm 1} = \phi_l \pm \Delta x \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l \pm \frac{\Delta x}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \right)_{l\pm\theta_{3,4}}, \quad 0 \leq \theta_{3,4} \leq 1 \quad (2.14)$$

de donde:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l \approx \frac{\phi_{l+1} - \phi_{l-1}}{2\Delta x} \quad (2.15)$$

que corresponde al segmento DC de la Figura 2.1. La correspondiente estimación del error es:

$$|E| \leq \frac{\Delta x^2}{6} \max_{[x_{l-1}, x_{l+1}]} \left| \frac{d^3\phi}{dx^3} \right| \leq C'' \Delta x^2 \quad (2.16)$$

A esta la llamamos una “*aproximación centrada*”, ya que involucra a los dos nodos vecinos del nodo l . Notar que, al contrario de las otras, esta es simétrica con respecto al punto en cuestión. Además el error resulta ser un orden mayor, con lo cual en principio se pueden obtener mejores aproximaciones con menos puntos usando una de mayor orden como esta. Pero, como veremos más adelante, en la sección §2.3.9, el hecho de que la aproximación sea de un mayor orden no es una condición “*suficiente*” para obtener un orden de convergencia mayor.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

2.3.4. Aproximación de derivadas de orden superior

Para obtener una estimación de la derivada segunda comenzamos haciendo una expansión hasta cuarto orden de $\phi_{l\pm 1}$:

$$\begin{aligned}\phi_{l\pm 1} &= \phi_l \pm \Delta x \frac{d\phi}{dx}_l + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l \pm \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \right)_l \\ &\quad + \frac{\Delta x^4}{24} \left(\frac{d^4\phi}{dx^4} \right)_{l\pm\theta_{5,6}}, \quad 0 \leq \theta_{5,6} \leq 1\end{aligned}\tag{2.17}$$

de donde:

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l = \frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{24} \left[\left(\frac{d^4\phi}{dx^4} \right)_{l+\theta_5} + \left(\frac{d^4\phi}{dx^4} \right)_{l+\theta_6} \right]\tag{2.18}$$

o sea que:

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l \approx \frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta x^2}\tag{2.19}$$

$$|E| \leq \frac{\Delta x^2}{12} \max_{[x_{l-1}, x_{l+1}]} \left| \frac{d^4\phi}{dx^4} \right|\tag{2.20}$$

Esta es una “*aproximación centrada*”.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

2.3.6. Ejemplo de derivadas de orden superior con mallas homogéneas

Supongamos que queremos obtener una derivada tercera a segundo orden, en ese caso tener en cuenta que el termino que involucra a la derivada tercera tiene un Δx^3 con lo cual si quiero que la aproximación sea de segundo orden debo subir dos términos más para que cuando divida por Δx^3 me quede un Δx^2 , es decir

$$\begin{aligned}\phi_{l\pm 1} &= \phi_l \pm \Delta x \frac{d\phi}{dx}_l + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l \pm \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \right)_l + \frac{\Delta x^4}{24} \left(\frac{d^4\phi}{dx^4} \right)_l \\ &\quad \pm \frac{\Delta x^5}{120} \left(\frac{d^5\phi}{dx^5} \right)_{l\pm\theta}, 0 \leq \theta \leq 1\end{aligned}\tag{2.22}$$

Las condiciones que debemos cumplir para que nos quede una derivada tercera libre y orden 2 es que

- el término de la derivada primera, segunda y cuarta se anule
- el termino de la derivada tercera quede unitario

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Como ejemplo vamos a calcular el stencil de la derivada tercera: (puede ser un problema de examen)
Este ejemplo esta en el apunte.

$$\left(\frac{d^3\phi}{dx^3}\right)_l = \alpha_1\phi_{l+1} + \alpha_2\phi_{l-1} + \alpha_3\phi_{l+2} + \alpha_4\phi_{l-2} - (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4)\phi_l + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (2.23)$$

con

$$\begin{aligned}\Delta x(\alpha_1 - \alpha_2 + 2\alpha_3 - 2\alpha_4) &= 0 \\ \frac{\Delta x^2}{2}(\alpha_1 + \alpha_2 + 4\alpha_3 + 4\alpha_4) &= 0 \\ \frac{\Delta x^3}{6}(\alpha_1 - \alpha_2 + 8\alpha_3 - 8\alpha_4) &= 1 \\ \frac{\Delta x^4}{24}(\alpha_1 + \alpha_2 + 16\alpha_3 + 16\alpha_4) &= 0\end{aligned} \quad (2.24)$$

¿Como se armó el sistema de ecuaciones para obtener los coeficientes?

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Expandimos con **Taylor** alrededor de x_ℓ :

$$\phi_{\ell\pm 1} = \phi_\ell \pm \Delta x \phi'_\ell + \frac{\Delta x^2}{2} \phi''_\ell \pm \frac{\Delta x^3}{6} \phi^{(3)}_\ell + \frac{\Delta x^4}{24} \phi^{(4)}_\ell \pm \frac{\Delta x^5}{120} \phi^{(5)}_{|\ell+\theta},$$

$$\phi_{\ell\pm 2} = \phi_\ell \pm 2\Delta x \phi'_\ell + \frac{(2\Delta x)^2}{2} \phi''_\ell \pm \frac{(2\Delta x)^3}{6} \phi^{(3)}_\ell + \frac{(2\Delta x)^4}{24} \phi^{(4)}_\ell \pm \frac{(2\Delta x)^5}{120} \phi^{(5)}_{|\ell+\theta}.$$

Al combinar linealmente y **dividir por Δx^3** :

- queremos que el coeficiente de $\phi^{(3)}_\ell$ sea **1**;
- y que se **anulen** los términos de $\phi_\ell, \phi'_\ell, \phi''_\ell, \phi^{(4)}_\ell$
(para obtener error $O(\Delta x^2)$ tras dividir por Δx^3).

Eso da el sistema (quitando los factores Δx^m comunes):

$$(\text{constante}) \quad \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 = 0,$$

$$(\phi') \quad \alpha_1 - \alpha_2 + 2\alpha_3 - 2\alpha_4 = 0,$$

$$(\phi'') \quad \alpha_1 + \alpha_2 + 4\alpha_3 + 4\alpha_4 = 0,$$

$$(\phi^{(3)}) \quad \alpha_1 - \alpha_2 + 8\alpha_3 - 8\alpha_4 = 6,$$

$$(\phi^{(4)}) \quad \alpha_1 + \alpha_2 + 16\alpha_3 + 16\alpha_4 = 0.$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Algunos conceptos a tener en cuenta para el coloquio

Cuando se discretiza una derivada utilizando series de Taylor para diferencias finitas, la suma de los coeficientes de cada término no necesariamente tiene que dar cero en todos los casos. Sin embargo, en muchos esquemas de diferencias finitas, la condición de que la suma de los coeficientes sea cero es importante y se relaciona con la conservación de la precisión y la eliminación de términos de error.

Derivada de Primer Orden

Consideremos una aproximación a la derivada primera de una función $f(x)$ en el punto x_i . Una aproximación central de la derivada primera utilizando diferencias finitas es:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$$

Aquí, los coeficientes de $f(x_{i+1})$ y $f(x_{i-1})$ son $+\frac{1}{2h}$ y $-\frac{1}{2h}$ respectivamente. La suma de estos coeficientes es:

$$\frac{1}{2h} - \frac{1}{2h} = 0$$

Esta condición de suma cero asegura que los términos lineales en la expansión de Taylor se cancelen, lo que es esencial para que la fórmula sea una aproximación de la derivada de primer orden y no contenga un término constante incorrecto.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Derivada de Segundo Orden

Para la derivada segunda, una aproximación común es:

$$\left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x_i} \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2}$$

$$\frac{1}{h^2} - \frac{2}{h^2} + \frac{1}{h^2} = 0$$

Esto asegura que los términos lineales (correspondientes a la derivada primera) se cancelen, permitiendo que la fórmula sea una buena aproximación de la derivada segunda.

Importancia de la Suma de los Coeficientes

La suma cero de los coeficientes se relaciona con la consistencia del esquema y con la cancelación de errores en el orden adecuado. Esto es crucial para mantener la precisión de la aproximación y garantizar que la discretización represente correctamente la derivada que se desea aproximar.

Si la suma de los coeficientes no es cero, significa que hay un término constante que no debería estar presente, lo que introduce un sesgo en la aproximación y afecta la precisión del método.

Explicación Física:

1. Conservación de Flujo o Cantidad de Movimiento

En muchos problemas físicos, la derivada de una cantidad está relacionada con el flujo de esa cantidad a través de un punto o en un volumen. Por ejemplo, en la ecuación de continuidad en dinámica de fluidos, la derivada espacial de la densidad o de la velocidad está relacionada con el flujo de masa o cantidad de movimiento.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Cuando se discretiza una derivada, **por ejemplo, la derivada de la densidad** respecto a la posición en una ecuación de continuidad, estás esencialmente describiendo cómo la cantidad de densidad entra o sale de un punto en el espacio. Si los coeficientes de las diferencias finitas no suman cero, implicaría que hay una ganancia o pérdida artificial de masa en el sistema, lo que violaría la conservación de masa (o de cualquier otra cantidad conservada).

2. Simetría y Neutralidad

En un sistema físico, la falta de sesgo es fundamental. Para la derivada de primer orden, por ejemplo, la simetría en la aproximación central garantiza que no haya un sesgo hacia la derecha o hacia la izquierda. Si la suma de los coeficientes no fuera cero, eso podría introducir un "falso" gradiente que no existe físicamente, lo que alteraría los resultados de la simulación.

En la derivada de segundo orden, que típicamente se relaciona con la difusión o aceleración en muchos modelos físicos, la neutralidad de la suma de los coeficientes asegura que no se introduzca una fuente o sumidero artificial en la cantidad que se está calculando.

3. Interpretación de la Derivada como Flujo

Consideremos la derivada primera de una función $f(x)$, que en física podría representar la velocidad o el flujo de una cantidad. Cuando discretizamos usando diferencias finitas, estamos evaluando cómo esta cantidad varía entre puntos en un espacio discreto. Si sumamos los coeficientes de la aproximación de la derivada y no obtenemos cero, en un sentido físico, esto implica que hay una creación o destrucción artificial de flujo en el sistema.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Por ejemplo, si modelamos la difusión de calor (donde la derivada segunda del campo de temperatura representa cómo se distribuye el calor), **una suma no cero de los coeficientes** podría introducir artificialmente una fuente o sumidero de calor, lo que físicamente no tiene sentido y comprometería la validez del modelo.

4. Efecto de Bordes y Condiciones de Contorno

En algunos esquemas de diferencias finitas, especialmente cerca de los bordes de un dominio, la condición de suma cero de los coeficientes también está vinculada a la correcta aplicación de las condiciones de contorno. Una suma no cero podría implicar que el flujo o la cantidad conservada no se comporta correctamente en los bordes, introduciendo elementos en la simulación que no reflejan la realidad física.

Resumen

La suma cero de los coeficientes en las discretizaciones por diferencias finitas está ligada a la conservación de propiedades físicas fundamentales, como la conservación de la masa, energía o cantidad de movimiento, y asegura que la discretización no introduzca fuentes, sumideros o sesgos artificiales en el modelo físico. Esto es crucial para obtener resultados precisos y físicamente consistentes en simulaciones numéricas.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Solución

Resolviendo, se obtiene

$$\alpha_1 = -1, \quad \alpha_2 = 1, \quad \alpha_3 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_4 = -\frac{1}{2}$$

por lo que

$$\left(\frac{d^3 \phi}{dx^3} \right)_\ell \approx \frac{-\phi_{\ell+1} + \phi_{\ell-1} + \frac{1}{2}\phi_{\ell+2} - \frac{1}{2}\phi_{\ell-2}}{\Delta x^3} + O(\Delta x^2)$$

y, de hecho, el término líder del error es

$$\frac{\Delta x^2}{4} \phi^{(5)}(x_\ell).$$

Comentario sobre el “número de puntos”

Para $k = 3$ y orden $p = 2$, la regla “segura” $N \geq k + p = 3+2=5$.

.

Aquí usamos **4 puntos** porque el Stencil **anti simétrico** (pares $|\pm 1$ y $|\pm 2$) hace que los términos **pares** del desarrollo se cancelen automáticamente; eso reduce el número de condiciones independientes necesarias. Es justo el caso donde la simetría permite “un punto menos”.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

2.3.5. Número de puntos requeridos

Nos cuestionamos cuantos puntos son necesarios para obtener una aproximación de un dado orden (digamos $O(\Delta x)$) para una derivada de orden k . Por ejemplo para obtener una aproximación a la derivada primera es obvio que necesitamos al menos dos puntos ya que por dos puntos pasa una recta y la recta es el polinomio de bajo orden que posee una derivada de primer orden no nula. El mismo razonamiento nos dice que se necesitan tres puntos para aproximar una derivada segunda. Por otra parte, parece también obvio que si queremos una aproximación de mayor orden entonces necesitaremos más puntos. La expresión que relaciona

- N el número de puntos,
- p la precisión del método y
- k el orden de la derivada a aproximar,

es:

$$N \geq k + p \quad (2.21)$$

Por lo tanto, con N puntos o más podemos desarrollar una aproximación de orden p (es decir $|E| \leq C \Delta x^p$) para $\frac{d^k \phi}{dx^k}$. Verificamos esto en los desarrollos anteriores,

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Aproximación	Precisión (p)	Orden de la derivada (k)	Puntos utilizados	Puntos req. Eq. (2.21)
descentrada	1	1	2	2
centrada	2	1	3	3
centrada	2	2	3	4

Tabla 1: Número de puntos utilizados en las diferentes aproximaciones por diferencias utilizadas.
La relación anterior:

$$N \geq k + p$$

es la **condición mínima sobre el número de puntos N** necesarios para construir una **fórmula de diferencias finitas** que aproxime la derivada de orden k con **precisión de orden p** .

Regla general:

La condición $N \geq k + p$ es una **cota superior de seguridad** que asegura que podemos construir un esquema de orden p para una derivada de orden k .

k = orden de la derivada que quiero aproximar.

p = orden de precisión deseado (número de términos que el error debe anularse en el desarrollo de Taylor). N = número de puntos (coeficientes desconocidos) que necesito resolver.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos – Notas:

Expansión de Taylor:

Para aproximar una función $f(x)$ alrededor de un punto x_0 , expandimos en serie de Taylor en varios nodos $x_0 + mh$ (con paso h):

$$f(x_0 + mh) = f(x_0) + mh f'(x_0) + \frac{(mh)^2}{2!} f''(x_0) + \dots$$

Esto genera un sistema de ecuaciones lineales que relaciona los coeficientes de la fórmula con las derivadas.

Número de condiciones:

- Para una derivada de orden k , queremos que la combinación lineal de valores de $f(x)$ reproduzca exactamente todos los términos hasta orden k .
- Además, si pedimos **orden de precisión p** , eso significa que el error debe ser del orden de h^p o superior.

Para lograrlo, necesitamos **anular los términos de orden $k + 1, k + 2, \dots, k + p - 1$** , en la expansión.

Número de incógnitas (puntos):

- Cada punto $f(x_0 + mh)$, aporta un coeficiente desconocido en la fórmula de diferencias.
- Para satisfacer todas las condiciones, necesitamos al menos tantos puntos N como ecuaciones.

De ahí se obtiene la condición:

$$N \geq k + p$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Por qué a veces parece que se usa "un punto menos"

Esto pasa porque la fórmula es más general que los ejemplos básicos.

Ejemplo 1: Aproximar $f'(x)$ con precisión de orden 2 (esquema central).

Según la regla: $N \geq k + p = 1 + 2 = 3$.

Pero el esquema clásico de 3 puntos $(-1, 0, +1)$ ya cumple con eso.

Parece justo, no sobra nada. Sólo que en la fórmula aparecen 2 puntos.

Ejemplo 2: Aproximar $f''(x)$ con precisión de orden 2 (esquema central).

Regla: $N \geq k + p = 2 + 2 = 4$.

Pero la fórmula clásica usa **3 puntos** $(-1, 0, +1)$.

¿Por qué? Porque la simetría de los coeficientes cancela automáticamente los términos impares del desarrollo de Taylor.

En otras palabras: **no todos los grados de libertad son necesarios**, porque la estructura de la aproximación ya elimina parte del error.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODOS NUMERICOS APLICADOS A LAS ECUACIONES DIFERENCIALES – METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Conclusión

- La regla $N \geq k + p$ es suficiente pero no siempre mínima.
- En casos simétricos (como diferencias centrales para derivadas pares) se logra el mismo orden con **un punto menos** porque el error se cancela de forma natural.
- Por eso en los ejemplos de libros o clases a veces aparece un esquema “más corto” que el predicho.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos – Condiciones de Contorno

Problema Estacionario (Poisson)

Recordando el problema de difusión en una dimensión:

$$\rho C_p \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - k \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = Q(x, t) \quad \text{donde } u = u(x, t) \text{ es la variable dependiente.}$$

$$\text{y además } 0 \leq x \leq L, \quad t \geq 0$$

Al considerar el estado estacionario, donde la variable $u(x, t)$ no cambia con el tiempo, entonces:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = 0$$

La ecuación de Poisson nos queda de la siguiente forma

$$-k \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = Q(x) \quad u = u(x) \quad \text{y además } 0 \leq x \leq L$$

Lo que haremos ahora es discretizar el problema 1D con condiciones de borde del tipo DIRICHLET

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Condiciones de borde del tipo DIRICHLET.

Consideremos el problema:

$$\begin{cases} -k \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = f(x), & 0 \leq x \leq L \\ u(0) = a, \\ u(L) = b, \end{cases}$$

Tenemos una derivada segunda, la cual la tenemos que discretizar. Definimos un error de aproximación de $O(\Delta x^2) \equiv O(h^2)$. Siempre que $x - h, x, x + h \in [0, L]$.

Para obtener un método numérico, definimos N como el numero de subdominios en que dividimos nuestro dominio, de tal forma que: $0 \leq x_1 \leq x_2 \leq x_3 \leq \dots \leq x_N = L - h \leq x_{N+1} = L$.

La idea principal del método de Diferencias Finitas consiste en reemplazar derivadas por cocientes de diferencias.

Si observamos que: $x_i - h = x_{i-1}$ y que $x_i + h = x_{i+1}$, entonces:

$$-k \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h))}{h^2} = -k \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} \approx f(x_i)$$

Para $i = 2, 3, 4, \dots, L$ y que $u(x_1) = a$ y que $u(x_{N+1}) = b$, el sistema quedará de la siguiente forma:

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

$$\left\{ \begin{array}{l} u(x_1) = a, \\ -k \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} \approx f(x_i), \quad i = 2, 3, \dots, N, \\ u(x_{N+1}) = b \end{array} \right.$$

La idea es entonces definir aproximaciones $U_i \cong u(x_i)$ que cumplan las formulas anteriores con igualdad, es decir:

$$\left\{ \begin{array}{l} U_1 = a, \\ -k \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} = f(x_i), \quad i = 2, 3, \dots, N, \\ U_{N+1} = b. \end{array} \right.$$

Multiplicando por $\frac{h^2}{k}$ obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\left\{ \begin{array}{l} U_1 = a, \\ -U_{i-1} + 2U_i - U_{i+1} = \frac{h^2}{k} f(x_i), \quad i = 2, 3, \dots, N, \\ U_{N+1} = b. \end{array} \right.$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Este sistema de ecuaciones tiene $N + 1$ ecuaciones y $N + 1$ incógnitas $U_1, U_2, U_3, \dots, U_{N+1}$

El mismo, puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\left\{ \begin{array}{l} U_1 \\ -U_1 + 2U_2 - U_3 \\ -U_2 + 2U_3 - U_4 \\ \vdots \\ -U_{N-1} + 2U_N - U_{N+1} \\ U_{N+1} \end{array} \right. = \left\{ \begin{array}{l} a \\ \frac{h^2}{k} f_2 \\ \frac{h^2}{k} f_3 \\ \vdots \\ \frac{h^2}{k} f_N \\ b \end{array} \right.$$

En forma matricial resulta

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ \vdots \\ U_N \\ U_{N+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ \frac{h^2}{k} f_2 \\ \frac{h^2}{k} f_3 \\ \vdots \\ \frac{h^2}{k} f_N \\ b \end{bmatrix}$$

***De esta manera lo implementamos en forma computacional
Analizar la matriz: radio espectral,
Autovalores, si es SDP, diagonal dominante, etc.***

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Proposición 1: Si la solución real es $u(x) \in C^4$ y la reemplazamos en la ecuación en diferencias, tenemos:

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} + O(h^2).$$

Más precisamente, si denominamos $M_4 = \max_{[x-h, x+h]} |d^4u/dx^4|$, entonces:

$$\left| \frac{d^2u}{dx^2}(x) - \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} \right| \leq \frac{M_4}{12} h^2.$$

Lo que se puede demostrar utilizando el teorema de Taylor, a partir de la fórmula en diferencias.

Teorema 1: Si la solución exacta $u(x)$ de la Proposición 1 es $C^4 [0, L]$, entonces

$$\max_{i=1,2,\dots,N+1} |u(x_i) - U_i| \leq CM_4 h^2 = CM_4 L^2 \frac{1}{N^2},$$

donde $M_4 = \max_{[0,L]} |d^4u/dx^4|$ y C es una constante que depende de los parámetros k, L , de la ecuación, pero es independiente de la función $f(x)$, y de los datos de borde a, b y del parámetro de discretización $\Delta x \equiv h$ (o N). **Demostración:** La demostración se puede encontrar en [Larsson-Thomé 2009, Cap. 4].

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Para verificar si el código funciona bien, se busca una solución exacta. Esto parece difícil, pero es cuestión de elegir una $u(x)$ cualquiera, que sea $C^4 [0, L]$ aunque no sea muy obvia, como lineal o cuadrática y luego, dado un k elegido, se calcula $f(x)$, $u(0)$ y $u(L)$.

Por ejemplo: Tomemos: $L = 1$, $k = 2$ y $u(x) = x^2 + e^{-(x-0,5)^2}$

Para que esta $u(x)$ sea solución de la proposición 1, calculamos: $f = -k d^2u/dx^2$

$$u_x(x) = 2x - 2(x - 0,5)e^{-(x-0,5)^2}, \quad u_{xx}(x) = 2 - 2[1 - 2(x - 0,5)^2]e^{-(x-0,5)^2}$$

Luego, resolvemos el problema con

$$\begin{aligned} f(x) &= -4 + 4[1 - 2(x - 0,5)^2]e^{-(x-0,5)^2} & \left(\begin{array}{l} = -ku_{xx}(x) \quad \text{con} \quad k = 2 \end{array} \right) \\ a &= e^{-0,5^2} & \left(\begin{array}{l} = u(0) \end{array} \right) \\ b &= 1 + e^{-0,5^2} & \left(\begin{array}{l} = u(1) \quad \text{con} \quad L = 1 \end{array} \right) \end{aligned}$$

y deberíamos obtener una solución aproximada a $u(x) = x^2 + e^{-(x-0,5)^2}$.

Para estar seguros que el código esta bien programado, debemos verificar que cuando tomamos h más pequeño, el error máximo se reduce como Ch^2 . Es decir, cada vez que tomamos h igual a la mitad de un h anterior, el error debe reducirse por un factor 1/4.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Vayamos a los ejemplos del apunte:

Consideremos primero, por simplicidad, el caso de condiciones Dirichlet $\phi(0) = \bar{\phi}_0$, y $\phi(L_x) = \bar{\phi}_{L_x}$.
Evaluando la ecuación diferencial en x_l :

$$k \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_l = -Q_l \quad (2.30)$$

y aproximando la derivada segunda por diferencias finitas de segundo orden centradas:

$$k \frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta x^2} = -Q_l \quad (2.31)$$

hay una ecuación para cada $l = 1, 2, \dots, L - 1$, que son los *puntos interiores*.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Concretamente, las ecuaciones resultan ser:

$$\begin{array}{ccccccc} & +2\phi_1 & -\phi_2 & = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} & +\bar{\phi}_0 \\ -\phi_1 & +2\phi_2 & -\phi_3 & = \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} & \\ -\phi_2 & +2\phi_3 & -\phi_4 & = \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ -\phi_{L-3} & +2\phi_{L-2} & -\phi_{L-1} & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} & \\ -\phi_{L-2} & +2\phi_{L-1} & & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} & +\bar{\phi}_{L_x} \end{array} \quad (2.32)$$

Lo anterior se obtiene simplemente reemplazando el stencil interior en cada uno de los nodos interiores y para los nodos inmediatamente vecinos a aquellos que forman parte del contorno y que incluyen a la incógnita al contorno, se le aplica la condición de contorno conocida.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Es decir, la ecuación del nodo 1 es:

$$-\phi_0 + 2\phi_1 - \phi_2 = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k}$$

$$\phi_0 = \bar{\phi}_0$$

reemplazando

$$2\phi_1 - \phi_2 = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} + \bar{\phi}_0$$

similar a la primera fila del sistema de ecuaciones anterior (2.33)

Idem con el último nodo. Esto **reduce el sistema de ecuaciones** en 2 ecuaciones porque hay 2 BCs.

Esto desde el punto de vista matemático es válido pero desde lo informático no es lo más directo.

Otra alternativa mejor desde lo informático es mantener la misma cantidad de ecuaciones originales, una para cada nodo y para los nodos del contorno agregar las ecuaciones correspondientes a sus condiciones de contorno, por ej.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

$$\begin{array}{cccc}
 & & \phi_0 & = \bar{\phi}_0 \\
 -\phi_0 & +2\phi_1 & -\phi_2 & = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} \\
 -\phi_1 & +2\phi_2 & -\phi_1 & = \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\
 -\phi_2 & +2\phi_3 & -\phi_4 & = \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -\phi_{L-3} & +2\phi_{L-2} & -\phi_{L-1} & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\
 -\phi_{L-2} & +2\phi_{L-1} & -\phi_{Lx} & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} \\
 & & \phi_{Lx} & = \bar{\phi}_{Lx}
 \end{array} \tag{2.34}$$

Definiendo un vector de incógnitas ϕ , que contiene sólo los nodos interiores:

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{L-1} \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^{L-1} \tag{2.35}$$

Tenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\mathbf{K}\phi = \mathbf{f} \tag{2.36}$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \Delta x^2 Q_1/k + \bar{\phi}_0 \\ \Delta x^2 Q_2/k \\ \vdots \\ \Delta x^2 Q_{L-1}/k + \bar{\phi}_{L_x} \end{bmatrix}$$

Nótese la analogía:

$$\begin{array}{ccc} \frac{d^2}{dx^2} & \phi & = & -Q/k \\ \downarrow & \downarrow & & \downarrow \\ \mathbf{K} & \phi & = & \mathbf{f} \end{array} \quad (2.39)$$

El operador del continuo $\frac{d^2}{dx^2}$ es reemplazado por la matriz \mathbf{K} , el campo del continuo ϕ es reemplazado por el conjunto de valores nodales ϕ y, finalmente, la fuente interna $Q(x)$ es reemplazada por el vector miembro derecho \mathbf{f} . A su vez, las condiciones de contorno tipo Dirichlet también generan un término en el miembro derecho.

La matriz \mathbf{K} es simétrica ($K_{ij} = K_{ji}$ para todos i, j) y definida positiva ($\mathbf{v}^T \mathbf{K} \mathbf{v} > 0$ para todo $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^{L-1}$). Esto tiene mucha importancia: se puede demostrar la existencia y unicidad de la solución discreta y además tiene importancia práctica ya que permite el desarrollo de rutinas de resolución especialmente diseñadas.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Sigamos con los ejemplos del apunte:

Ejemplo de Aplicación:

Resolver:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \phi = 0, \quad \phi(0) = 0, \quad \phi(1) = 1 \quad (2.40)$$

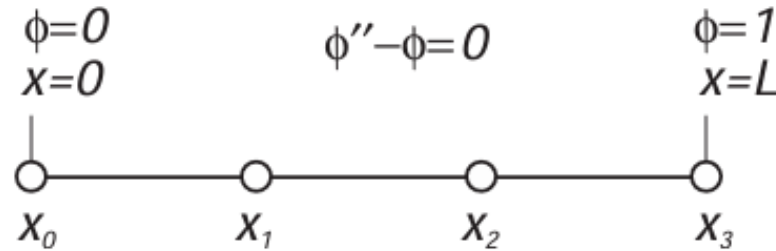


Figura 2.2: Problema unidimensional con condiciones de contorno Dirichlet en ambos extremos

Usaremos $\Delta x = \frac{1}{3}$ (ver Figura 2.2). Tenemos 4 valores nodales ϕ_0, ϕ_1, ϕ_2 y ϕ_3 , de los cuales ϕ_0 y ϕ_3 son conocidos de las condiciones de contorno y sólo restan dos incógnitas ϕ_1 y ϕ_2 . La ecuación en los nodos interiores es:

$$\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1} - \Delta x^2 \phi_l = 0 \quad (2.41)$$

para $l = 1$:

$$\phi_2 - 2\phi_1 + \phi_0 - \Delta x^2 \phi_1 = 0 \quad (2.42)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

pero $\phi_0 = 0$ por la condición de contorno, de manera que la ecuación resultante es:

$$\phi_2 - \frac{19}{9}\phi_1 = 0 \quad (2.43)$$

Para $l = 2$ la ecuación resultante es:

$$-\frac{19}{9}\phi_2 + \phi_1 = -1 \quad (2.44)$$

Resolviendo el sistema (2.43 y 2.44) obtenemos:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{1}{\left(\frac{19}{9}\right)^2 - 1} = 0,2893 \dots \\ \phi_2 &= \frac{19}{9}\phi_1 = 0,6107 \dots \end{aligned} \quad (2.45)$$

La solución exacta a este problema puede ser encontrada fácilmente. Proponiendo soluciones de la forma $e^{-\alpha x}$, se obtiene la ecuación característica $\alpha^2 = 1$ de donde $\alpha = \pm 1$. Proponemos entonces soluciones de la forma $\phi = ae^x + be^{-x}$, donde a y b se obtienen de imponer las condiciones de contorno, y resulta ser:

$$\phi = \frac{\sinh(x)}{\sinh(1)} \quad (2.46)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Los resultados numéricos y exactos son comparados en la Tabla 2, se incluyen también los resultados obtenidos para $\Delta x = \frac{1}{6}$:

	Exacta	$\Delta x = 1/3$		$\Delta x = 1/6$	
x	ϕ	ϕ	Error	ϕ	Error
1/3.	0.28892	0.28929	3.6×10^{-4} (0.12 %)	0.28901	9.2×10^{-5} (0.032 %)
2/3	0.61024	0.61071	4.7×10^{-4} (0.077 %)	0.61036	1.2×10^{-4} (0.019 %)

Tabla 2: Errores para $\phi'' - \phi = 0$, $\phi(0) = 0$, $\phi(1) = 1$, para $\Delta x = \frac{1}{3}$ y $\frac{1}{6}$

Nótese que tanto en $x = \frac{1}{3}$ como en $x = \frac{2}{3}$ el error ha bajado en un factor $\frac{1}{4}$ al reducir el paso de la malla en un factor $\frac{1}{2}$. Primero vemos que, cualitativamente, el esquema de discretización es *convergente*, es decir el error, en alguna norma predeterminada, se reduce, al reducir el paso de la malla. Cuantitativamente, podemos decir que el error tiene un comportamiento $\propto \Delta x^2$. También se dice que el “orden de convergencia” es $\propto h^2$, donde h representa el paso de la malla (Δx en nuestro caso). Esto es consistente con el error de truncamiento que encontramos en el desarrollo de Taylor usado.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

Notas sobre las Series de Taylor en Diferencias Finitas

Cuando usamos la serie de Taylor para aproximar derivadas, o cuando nos queremos aproximar a una función de características complejas, esta serie resulta en una herramienta muy importante. Su validez se da (en el caso de una función a aproximar) cuando estamos dentro del radio de convergencia. En el caso que discreticemos una ecuación diferencial, donde no conocemos la función a resolver, y usando un método como Diferencias Finitas, no tenemos idea de este radio de convergencia. ¿Cómo evaluamos su alcance?

Cuando usamos **Taylor** en métodos numéricos para PDEs no estamos realmente buscando “aproximar la función” en sí, sino **desarrollar localmente la misma para obtener una fórmula de discretización**.

Diferencia entre “aproximar la función” y “derivar el método”

Cuando en cálculo usamos la serie de Taylor, estamos interesados en **reconstruir la función** a partir de sus derivadas en un punto. Ahí sí necesitamos preocuparnos por el **radio de convergencia**: si estamos fuera, la serie no converge y la aproximación no tiene sentido.

En métodos numéricos como **diferencias finitas**, la función desconocida $u(x)$ no la aproximamos directamente mediante Taylor, en su lugar:

- Usamos **Taylor como herramienta formal** para expresar cómo se comporta $u(x)$ y sus derivadas **si asumimos que es suficientemente suave** (analítica o al menos de clase C^k).
- El objetivo no es reconstruir $u(x)$, sino **crear una relación algebraica entre valores en puntos discretos y sus derivadas**.

Usamos la serie como una “herramienta algebraica” para deducir el error de truncamiento, no como una aproximación global de la función.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

Series de Taylor en Diferencias Finitas

¿Qué pasa con el radio de convergencia?

En problemas de ingeniería y física, se suele **asumir** que la solución es lo bastante suave (derivable las veces necesarias) en el dominio interior.

Eso hace que el radio de convergencia sea, en la práctica, **mayor que el paso** $\Delta_x \equiv h$ que elegimos.

Si hubiera **discontinuidades** (ej. shocks en ecuaciones hiperbólicas, gradientes muy bruscos), ahí sí el desarrollo de Taylor pierde sentido localmente, y el método de diferencias finitas puede degradarse o volverse inestable.

¿Cómo evaluamos si “alcanzamos” en diferencias finitas?

Como no conocemos la función exacta, usamos **otros criterios** para evaluar si el método está dando una solución correcta:

1. Orden de consistencia

Lo deducimos a partir de Taylor: el error de truncamiento $O(h^p)$, nos indica que, si u (variable dependiente) es suave, la aproximación mejora como h^p al reducir el paso.

2. Estudio de convergencia numérica

Se compara la solución numérica para pasos $h, h/2, h/4$ y se verifica que el error disminuye con la tasa esperada. Esto es independiente de conocer la solución exacta:

$$\text{tasa} \approx \frac{\ln \left(\frac{u_h - u_{h/2}}{u_{h/2} - u_{h/4}} \right)}{\ln 2}$$

¿Como lo deducimos?



Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

Series de Taylor en Diferencias Finitas

Dedución de:

$$\text{tasa} \approx \frac{\ln \left(\frac{u_h - u_{h/2}}{u_{h/2} - u_{h/4}} \right)}{\ln 2}$$

Como no conocemos la solución exacta, podemos **inferir el orden p** del método usando tres discretizaciones sucesivas, $h, \frac{h}{2}$ y $\frac{h}{4}$

1. Idea general

Supongamos que el error de la aproximación u al valor exacto u_h se comporta como:

donde:

$$E(h) = |u - u_h| \approx Ch^p,$$

- C es una constante independiente de h ,
- p es el **orden de convergencia** que queremos estimar.

2. Usando diferencias entre mallas

Si no tenemos u exacto, no podemos calcular $E(h)$. Pero sí podemos trabajar con las **diferencias entre soluciones en distintas mallas**:

$$u_h - u_{h/2} \approx Ch^p - C \left(\frac{h}{2}\right)^p = Ch^p \left(1 - 2^{-p}\right).$$

De manera similar:

$$u_{h/2} - u_{h/4} \approx C \left(\frac{h}{2}\right)^p - C \left(\frac{h}{4}\right)^p = C \left(\frac{h}{2}\right)^p \left(1 - 2^{-p}\right).$$

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

Series de Taylor en Diferencias Finitas

Dedución de:
$$\text{tasa} \approx \frac{\ln \left(\frac{u_h - u_{h/2}}{u_{h/2} - u_{h/4}} \right)}{\ln 2}$$

3. Cociente de errores

Si hacemos el cociente entre esas diferencias:

$$\frac{u_h - u_{h/2}}{u_{h/2} - u_{h/4}} \approx \frac{Ch^p(1 - 2^{-p})}{C \left(\frac{h}{2}\right)^p (1 - 2^{-p})} = \frac{h^p}{(h/2)^p} = 2^p.$$

4. Aislado p

Tomando logaritmo en base 2:

$$p \approx \frac{\ln \left(\frac{u_h - u_{h/2}}{u_{h/2} - u_{h/4}} \right)}{\ln 2}.$$

- Usamos **tres discretizaciones** porque necesitamos formar dos diferencias ($u_h - u_{h/2}$ y $u_{h/2} - u_{h/4}$).
- Esto permite eliminar la constante C y la solución exacta u .
- Así podemos calcular la **tasa de convergencia** p solo con resultados numéricos.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

Series de Taylor en Diferencias Finitas

3. Condición de estabilidad (análisis de Fourier, CFL, etc.)

Si el método es consistente y estable, el **teorema de Lax** garantiza que converge (aunque no sepamos la función exacta).

4. Pruebas con soluciones conocidas

Antes de resolver un problema real, se testea el código con una solución analítica sencilla para verificar orden y estabilidad.

Resumen:

- En diferencias finitas, **no necesitamos el radio de convergencia de Taylor** en el sentido clásico, porque no usamos la serie para aproximar la función globalmente.
- Lo que importa es que la función sea **suficientemente suave localmente** y que el paso h esté en un régimen donde el error de truncamiento y la estabilidad sean controlables.
- Si sospechamos que la solución no es suave, hay que recurrir a otros métodos (volúmenes finitos, esquemas con limitadores, etc.).

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO: DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

Series de Taylor en Diferencias Finitas

Cuando usamos Taylor en métodos numéricos para PDEs no estamos realmente buscando “aproximar la función” en sí, sino desarrollar localmente para obtener una fórmula de discretización.

Diferencia entre “aproximar la función” y “derivar el método”

Cuando en cálculo usamos la serie de Taylor, estamos interesados en reconstruir la función a partir de sus derivadas en un punto. Ahí sí necesitamos preocuparnos por el radio de convergencia: si estamos fuera, la serie no converge y la aproximación no tiene sentido.

Pero en métodos numéricos como **diferencias finitas**, la función desconocida $\phi(x)$ (variable dependiente) no la aproximamos directamente mediante Taylor.

En su lugar:

- Usamos Taylor como herramienta formal para expresar cómo se comporta $\phi(x)$ y sus derivadas si asumimos que es suficientemente suave (analítica o al menos de clase C^n).
- El objetivo no es reconstruir $\phi(x)$, sino crear una relación algebraica entre valores en puntos discretos y derivadas.

Usamos la serie como una “herramienta algebraica” para deducir el error de truncamiento, no como una aproximación global de la función.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

Si denotamos por ϕ_{ex} los valores nodales de la solución exacta, es decir

$$\phi_{ex,i} = \phi(x_i) \quad (2.47)$$

entonces ϕ_{ex} satisface (2.31) pero con un error de truncamiento, es decir

$$k \frac{\phi_{ex,l+1} - 2\phi_{ex,l} + \phi_{ex,l-1}}{\Delta x^2} = -Q_l - E_{trunc,l} \quad (2.48)$$

donde $E_{trunc,l}$ es el error correspondiente a la ecuación l -ésima. Sabemos que el error de truncamiento es

$$|E_{trunc,l}| \leq k \frac{\Delta x^2}{12} \max_{[x_{l-1}, x_{l+1}]} \left| \frac{d^4 \phi}{dx^4} \right| \leq C \Delta x^2 \quad (2.49)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

Expresado en forma matricial, quedará de la siguiente manera:

$$\mathbf{K} \phi_{ex} = \mathbf{f} + \mathbf{E}_{trunc} \quad (2.50)$$

Restando (2.36) de (2.50) obtenemos una ecuación para el error $\mathbf{E}_\phi = \phi - \phi_{ex}$ en los valores nodales

$$\mathbf{K} \mathbf{E}_\phi = -\mathbf{E}_{trunc} \quad (2.51)$$

y entonces,

$$\mathbf{E}_\phi = -\mathbf{K}^{-1} \mathbf{E}_{trunc} \quad (2.52)$$

Al hecho de que el error de truncamiento $E_{trunc,i} \rightarrow 0$ para $\Delta x \rightarrow 0$ lo llamamos “consistencia” del método. Queremos saber bajo que condiciones, el esquema es “convergente”, es decir $\|\mathbf{E}_\phi\| \rightarrow 0$ para $\Delta x \rightarrow 0$. Por lo que vemos, esto está relacionado con alguna propiedad de \mathbf{K} , es decir que de alguna forma la inversa de \mathbf{K} “se mantenga acotada”, para $\Delta x \rightarrow 0$.

Tomando normas

$$\|\mathbf{E}_\phi\| \leq \|\mathbf{K}^{-1}\| \|\mathbf{E}_{trunc}\| \quad (2.53)$$

Recordemos que la norma (Euclídea) de un vector está definida como:

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \sum_{i=1}^{L-1} v_i^2 \quad (2.54)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

y la norma de una matriz está definida como el máximo autovalor de la misma. Puede verse entonces que $\|\mathbf{K}^{-1}\|$ es la inversa del mínimo autovalor de \mathbf{K} , y usando (2.16)

$$\begin{aligned}\sqrt{\sum (\phi_{ex,i} - \phi_i)^2} &\leq \frac{1}{\lambda_{min}} \sqrt{\sum E_{trunc,i}^2} \\ &\leq \frac{1}{\lambda_{min}} \sqrt{L-1} C \Delta x^2\end{aligned}\tag{2.55}$$

de manera que

$$\begin{aligned}\sqrt{\frac{1}{L-1} \sum_{i=1}^{L-1} (\phi_{ex,i} - \phi_i)^2} &\leq \frac{1}{\lambda_{min}} \sqrt{\sum E_{trunc,i}^2} \\ &\leq \frac{1}{\lambda_{min}} C \Delta x^2\end{aligned}\tag{2.56}$$

El miembro izquierdo de esta ecuación representa el “*error cuadrático medio*” de la solución numérica. Esta expresión nos dice que este error es del mismo orden que el error de truncamiento, con la condición de que λ_{min} se mantenga acotado (es decir, que no tienda a cero) cuando Δx tiende a cero. Si se cumple esta condición decimos que la discretización es “*estable*”. Entonces, la condición para la convergencia es

$$\text{Consistencia} + \text{Estabilidad} \implies \text{Convergencia}\tag{2.57}$$

Este resultado es conocido como *Teorema de Lax* y es la base del análisis de error para el método de Diferencias Finitas.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

1. Error de truncamiento

Se arranca con la cota del error de truncamiento para la aproximación de la segunda derivada:

$$|E_{\text{trunc},i}| \leq C \Delta x^2.$$

Esto quiere decir que, en cada nodo, la aproximación discreta al operador diferencial se desvía de la exacta en un orden $O(\Delta x^2)$.

2. Forma matricial del sistema

La ecuación discreta (tipo FEM o Diferencias Finitas) se puede escribir como:

$$\mathbf{K} \phi = \mathbf{f}.$$

La solución exacta satisface:

$$\mathbf{K} \phi_{\text{ex}} = \mathbf{f} + E_{\text{trunc}}.$$

Restando una ecuación de la otra se obtiene:

$$\mathbf{K}(\phi - \phi_{\text{ex}}) = -E_{\text{trunc}},$$

es decir:

$$\mathbf{K} E_{\phi} = -E_{\text{trunc}}.$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

3. Relación entre error absoluto y error de truncamiento

Se multiplica por la inversa de \mathbf{K} :

$$E_\phi = -\mathbf{K}^{-1} E_{\text{trunc}}.$$

Luego, en norma euclídea:

$$\|E_\phi\| \leq \|\mathbf{K}^{-1}\| \|E_{\text{trunc}}\|.$$

Aquí aparece la observación:

Para matrices simétricas definidas positivas (como el operador difusivo discretizado), se cumple que:

$$\|\mathbf{K}^{-1}\| = \frac{1}{\lambda_{\min}},$$

donde λ_{\min} es el autovalor mínimo de \mathbf{K} .

Esto viene de la teoría espectral: la norma inducida por la norma 2 es igual al mayor valor singular, y en una SPD los valores singulares coinciden con los autovalores. (**Symmetric Positive Definite** (en español: **simétrica definida positiva**)).

1. Simétrica:

$$\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}.$$

Una matriz real \mathbf{A} es **simétrica definida positiva** si cumple:

2. Definida positiva:

Para cualquier vector no nulo \mathbf{v} ,

$$\mathbf{v}^\top \mathbf{A} \mathbf{v} > 0.$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

1. Simétrica:

$$\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}.$$

2. Definida positiva:

Para cualquier vector no nulo \mathbf{v} ,

$$\mathbf{v}^\top \mathbf{A} \mathbf{v} > 0.$$

¿Por qué nos importa?

En problemas de **difusión** (ej. calor, Poisson, elasticidad lineal), las matrices de rigidez \mathbf{K} que aparecen en FEM o en Diferencias Finitas son típicamente SPD.

Esto garantiza:

- Autovalores reales y positivos ($\lambda_i > 0$).
- Inversa bien definida y estable (\mathbf{K}^{-1} existe).
- La matriz induce una **norma de energía**:
- El problema discreto es **estable** (no amplifica errores arbitrariamente).

$$\|\mathbf{v}\|_A = \sqrt{\mathbf{v}^\top \mathbf{A} \mathbf{v}}.$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

Ejemplo: Laplaciano 1D con condiciones Dirichlet

$$\mathbf{K} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

- Es simétrica ($K = K^T$).
- Para cualquier $\mathbf{v} \neq 0$,
$$\mathbf{v}^T \mathbf{K} \mathbf{v} = \sum (v_i - v_{i+1})^2 / \Delta x^2 > 0.$$
- Entonces \mathbf{K} es SPD.

Cuando decimos que la matriz \mathbf{K} de la difusión es **SPD**, estamos diciendo que tiene **todas las propiedades necesarias para asegurar estabilidad**, lo cual es justo lo que usamos en la demostración del Teorema de Lax.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

4. Cota explícita del error

Entonces:

$$\|E_\phi\| \leq \frac{1}{\lambda_{\min}} \|E_{\text{trunc}}\|.$$

Si $\|E_{\text{trunc}}\| = O(\Delta x^2)$, se obtiene:

$$\|E_\phi\| \leq \frac{C}{\lambda_{\min}} \Delta x^2.$$

5. Interpretación

- El miembro izquierdo $\|E_\phi\|$ es el **error absoluto global** de la solución numérica (medido en norma 2, equivalente al RMS que aparece en tu apunte).
- El miembro derecho depende del **error de truncamiento** y del inverso del autovalor mínimo de la matriz discreta.

6. Condición de estabilidad

Aquí entra el punto clave del Teorema de Lax:

Si λ_{\min} **se mantiene acotado** cuando $\Delta x \rightarrow 0$ (es decir, no tiende a cero), entonces la desigualdad asegura que el error absoluto es del **mismo orden** que el truncamiento:

$$\|E_\phi\| = O(\Delta x^2).$$

Esto implica que la discretización es **estable**.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax

7. Conclusión:

Entonces se cumple que:

Consistencia: porque $\|E_{trunc}\| = O(\Delta x^2)$

Estabilidad: porque λ_{min} no se va a cero, garantizando que \mathbf{K}^{-1} no “explota”.

Convergencia: por el Teorema de Lax, se sigue que $\phi \rightarrow \phi_{ex}$ cuando $\Delta x \rightarrow 0$.

Esa última línea del apunte:

Consistencia + Estabilidad \Rightarrow Convergencia

es la síntesis del **Teorema de Equivalencia de Lax** aplicada al problema de difusión con discretización espacial.

Nota: Se puede analizar porque el λ_{min} no se hace cero.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Condiciones de borde del tipo NEUMANN o MIXTAS.

Consideremos el problema:

Veamos ahora como podemos programar un sistema con una condición Neumann o Mixta: para ello consideramos en el extremo derecho $x = L$ una condición de borde diferente, que contiene a la de tipo Neumann y de tipo Robin.

Consideremos el problema

$$\begin{cases} -ku_{xx} = f, & 0 \leq x \leq L, \\ u(0) = a, \\ ku'(L) + H_1u(L) = H_2u_E. \end{cases}$$

Los datos del problema son: $k, L, f(x), a, H_1, H_2$ y u_E

La diferencia esencial entre este problema y el que programamos con la condición Dirichlet radica en la derivada $\frac{du}{dx}(L)$ que aparece en la condición de borde.

Por lo que vimos en el problema anterior y para no perder precisión en el método, y mantener un error de orden $O(h^2)$, usaremos una diferencia centrada para la derivada:

$$u'(L) \approx \frac{u(L+h) - u(L-h)}{2h}.$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Notamos que $x_{N+2} = L + h$ es un punto que cae fuera del dominio $[0, L]$ y por eso a x_{N+2} lo llamamos nodo ficticio. La condición de borde se reemplaza entonces por la ecuación:

$$k \frac{U_{N+2} - U_N}{2h} + H_1 U_{N+1} = H_2 u_E.$$

Esta ecuación reemplaza a la ecuación $U_{N+1} = b$ en el sistema del problema anterior. Observamos que seguimos teniendo $N+1$ ecuaciones, pero ahora tenemos $N+2$ incógnitas, por lo que nos falta una ecuación más. Lo que hacemos es considerar $x_{N+1} = L$ como un *nodo interior*: imponemos la ecuación diferencial $-ku'' = f$ en $x = x_{N+1} = L$. Es decir, agregamos al sistema la ecuación

$$k \frac{-U_N + 2U_{N+1} - U_{N+2}}{h^2} = f_{N+1}.$$

De esta manera, el sistema resulta

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

$$\left\{ \begin{array}{l} U_1 \\ -U_1 + 2U_2 - U_3 \\ -U_2 + 2U_3 - U_4 \\ \vdots \\ -U_{N-1} + 2U_N - U_{N+1} \\ -U_N + 2U_{N+1} - U_{N+2} \\ -U_N + \frac{2hH_1}{k}U_{N+1} + U_{N+2} \end{array} \right. \begin{array}{l} = a \\ = \frac{h^2}{k}f_2 \\ = \frac{h^2}{k}f_3 \\ \vdots \\ = \frac{h^2}{k}f_N \\ = \frac{h^2}{k}f_{N+1} \\ = \frac{2hH_2}{k}u_E, \end{array} \quad (13.4)$$

En forma matricial nos queda de la siguiente forma:

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

donde $M_4 = \max_{[0,L]} |u^{IV}|$ y C es una constante que depende de los parámetros k, L, H_1, H_2 de la ecuación, pero es independiente de la función $f(x)$, del dato u_E y del parámetro de discretización h .

Lo programamos:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & \frac{2hH_1}{k} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ \vdots \\ U_N \\ U_{N+1} \\ U_{N+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ \frac{h^2}{k} f_2 \\ \frac{h^2}{k} f_3 \\ \vdots \\ \frac{h^2}{k} f_N \\ \frac{h^2}{k} f_{N+1} \\ \frac{2hH_2}{k} u_E \end{bmatrix}.$$

También para este problema se tiene un resultado de estimación del error, cuya demostración la podemos ver en Larsson-Thomé 2009

Teorema 2: Si la solución exacta del problema es $u(x) \in C^4[0, L]$

$$\max_{i=1,2,\dots,N+1} |u(x_i) - U_i| \leq CM_4 h^2 = CM_4 L^2 \frac{1}{N^2},$$

donde $M_4 = \max_{[0,L]} \left| \frac{d^4 u}{dx^4} \right|$ y C es una constante que depende de los parámetros k, L, H_1, H_2 de la ecuación, pero es independiente de la función $f(x)$, del dato u_E y del parámetro de discretización h .

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Sigamos con los ejemplos del apunte y las condiciones de borde Neumann o Mixtas:

Condiciones de contorno tipo Neumann (“flujo impuesto”)

El problema a resolver es:

$$\begin{aligned}k \frac{d^2 \phi}{dx^2} &= -Q(x), \\ \phi(0) &= 0 \\ k \frac{d\phi}{dx} \Big|_{L_x} &= \bar{q}\end{aligned}$$

Ahora ϕ_L pasa a ser una incógnita más

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{L-1} \\ \phi_L \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^L$$

Para determinar estas incógnitas tenemos $L - 1$ ecuaciones que provienen de aproximar el operador diferencial por diferencias finitas de segundo orden en puntos interiores como en la ecuación (2.31). Para dar cuenta de la condición de contorno tipo Neumann en L_x agregamos la siguiente aproximación:

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_L \approx \frac{\phi_L - \phi_{L-1}}{\Delta x} = \frac{\bar{q}}{k} \quad (2.60)$$

Ahora sí, tenemos L ecuaciones en L incógnitas. Volviendo al ejemplo anterior del problema (2.40), pero ahora con condición de tipo Neumann en $x = 1$: $\phi'(1) = 1$ el sistema resultante es:

$$\begin{aligned} -\phi_2 + \frac{19}{9}\phi_1 &= 0 \\ -\phi_3 + \frac{19}{9}\phi_2 - \phi_1 &= 0 \\ \phi_3 - \phi_2 &= 3 \end{aligned} \quad (2.61)$$

Resolviendo el sistema, se encuentran los valores discretos que pueden observarse en la Tabla 3. (se incluyen también los resultados obtenidos para $\Delta x = 1/6$):

	Exacta	$\Delta x = 1/3$		$\Delta x = 1/6$	
x	ϕ	ϕ	Error	ϕ	Error
1/3	0.2200	0.2477	0.0277 (12 %)	0.2340	0.0140 (6 %)
2/3	0.4648	0.5229	0.0582 (12 %)	0.4942	0.0294 (6 %)
1	0.7616	0.8563	0.0947 (12 %)	0.8097	0.0481 (6 %)

Tabla 3: : Errores para $\phi'' - \phi = 0$, $\phi(0) = 0$, $\phi'(1) = 1$, para $\Delta x = \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

La solución exacta puede obtenerse de la misma forma que en el caso Dirichlet y resulta ser:

$$\phi(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(1)} \quad (2.62)$$

Notamos que los errores resultan ser notablemente mayores que en el caso Dirichlet puro, concretamente son dos órdenes de magnitud mayores. Un indicio de la causa del problema la da el hecho de que, al reducir el paso de la malla a la mitad, el error no ha bajado en un factor $1/4$ como antes, sino que apenas ha bajado un factor $1/2$, exhibiendo una convergencia $\propto \Delta x$. La causa es que hemos usado una expansión orden $O(\Delta x)$ para la condición de Neumann, ecuación (2.60), si bien la expansión en los nodos interiores es $O(\Delta x^2)$. Podemos deducir una regla muy importante que es que *"el orden de convergencia está dictado por el más bajo orden de las expansiones utilizadas, tanto para el interior del dominio como para las condiciones de contorno"*.

En consecuencia, si queremos recuperar el orden de convergencia $\propto \Delta x^2$, necesariamente debemos desarrollar una aproximación $O(\Delta x^2)$ para la condición tipo Neumann. Una forma de hacer esto es introduciendo un *"nodo ficticio"* (ver Figura 2.3) x_{L+1} y aproximando la condición de contorno como:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_L \approx \frac{\phi_{L+1} - \phi_{L-1}}{2\Delta x} = \frac{\bar{q}}{k} \quad (2.63)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

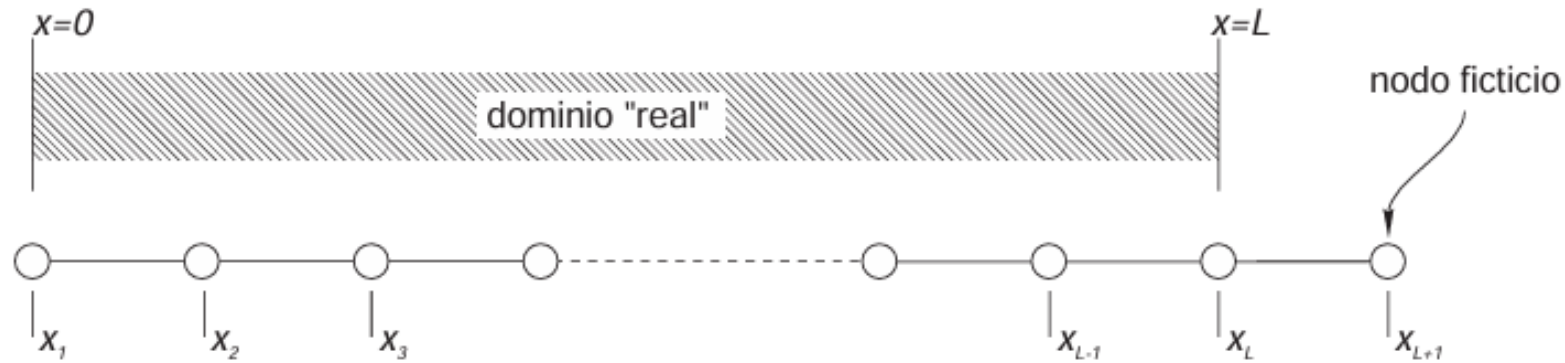


Figura 2.3: Inclusión de un nodo ficticio para obtener una discretización más precisa de la condición de contorno tipo Neumann.

Para resolver el problema con esta condición de contorno, hemos introducido una incógnita más: ϕ_{L+1} , de manera que agregamos la ecuación para nodos interiores en el nodo de contorno L :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} \approx \frac{\phi_{L+1} - 2\phi_L + \phi_{L-1}}{\Delta x^2} = -\frac{Q_L}{k} \quad (2.64)$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

El sistema es:

$$\mathbf{K}\phi = \mathbf{f} \quad (2.65)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.66)$$
$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \Delta x^2 Q_1/k + \bar{\phi}_0 \\ \Delta x^2 Q_2/k \\ \vdots \\ \Delta x^2 Q_L/k \\ 2\bar{q}\Delta x/k \end{bmatrix}$$
$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_L \\ \phi_{L+1} \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^{L+1}$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

Volviendo al ejemplo de la ecuación $\phi'' - \phi = 0$ con condiciones $\phi(0) = 0$, $\phi'(1) = 1$ y discretizado con $\Delta x = 1/3$ (ver Figura 2.4), los resultados con este nuevo método pueden observarse en la Tabla 4.

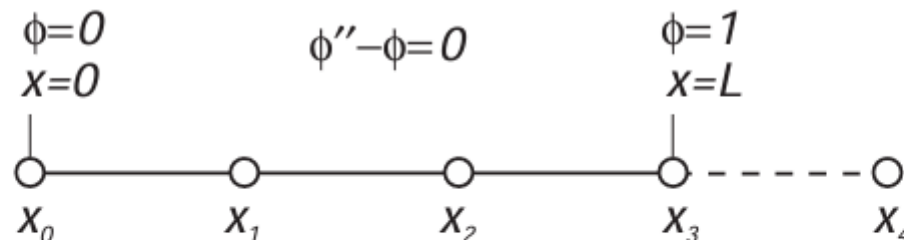


Figura 2.4: Malla 1D con $\Delta x = 1/3$ y un nodo ficticio.

	Exacta	$\Delta x = 1/3$		$\Delta x = 1/6$	
x	ϕ	ϕ	Error	ϕ	Error
1/3	0.2200	0.2168	0.0033 (1.5 %)	0.2192	0.0008 (0.4 %)
2/3	0.4648	0.4576	0.0071 (1.5 %)	0.4629	0.0018 (0.4 %)
1	0.7616	0.7493	0.0123 (1.6 %)	0.7585	0.0031 (0.4 %)

Tabla 4: Errores para $\phi'' - \phi = 0$, $\phi(0) = 0$, $\phi'(1) = 1$, para $\Delta x = 1/3, 1/6$, con esquema $O(\Delta x^2)$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

El error es ahora un orden de magnitud menor y se recupera la convergencia cuadrática. Sin embargo el sistema ha dejado de ser simétrico. Para recuperar la simetría de la matriz del sistema, podemos obtener una ecuación para ϕ_L y ϕ_{L-1} , eliminando ϕ_{L+1} de las dos últimas ecuaciones:

$$\phi_L - \phi_{L-1} = \frac{\Delta x^2 Q_L}{2k} + \frac{\bar{q}\Delta x}{k} \quad (2.69)$$

Nótese que esta ecuación es la misma que la (2.62) pero con el agregado del término $\Delta x^2 Q_L/2k$ en el miembro derecho. De hecho, esta misma ecuación puede obtenerse planteando un balance de energía en el intervalo $[L - 1/2, L]\Delta x$. El sistema total es:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \Delta x^2 Q_1/k + \phi_0 \\ \Delta x^2 Q_2/k \\ \vdots \\ \Delta x^2 Q_L/2k + \bar{q}\Delta x/k \end{bmatrix} \quad \phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_L \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^L$$

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

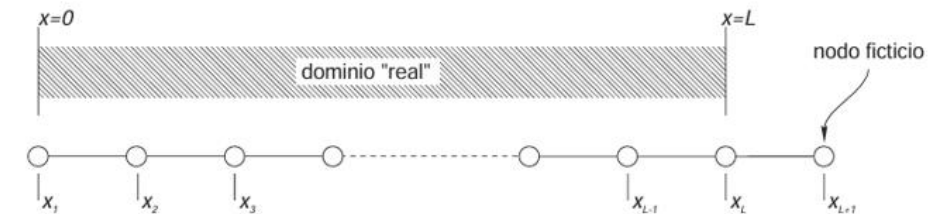
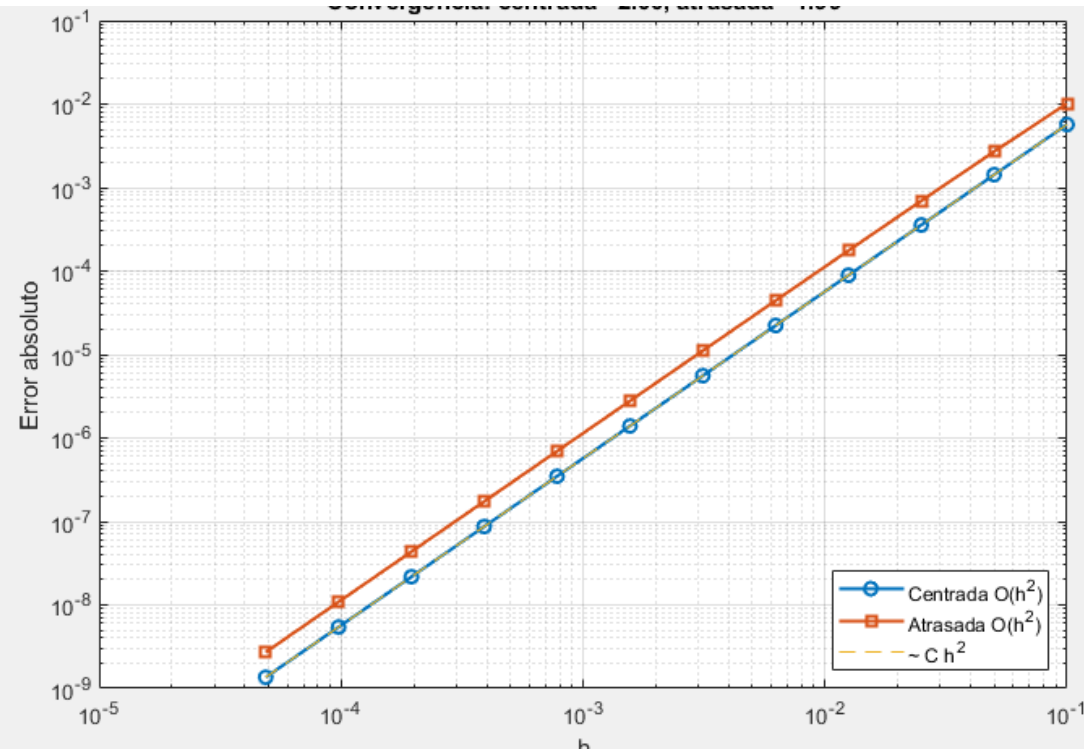
METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

DIFERENCIAS EN USAR UNA DERIVADA CENTRADA Y DESCENTRADA

- Centrada (orden 2): $f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$ (Con nodo ficticio)
- Atrasada (orden 2, 3 puntos): $f'(x_0) \approx \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h}$ (Usando tres puntos hacia atrás)

Ambas son de orden $O(h^2)$, pero la centrada tiene **constante de error menor** (teóricamente: $\frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi)$ vs $\frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi)$, ~el doble en la atrasada).



Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

PROBLEMAS NO ESTACIONARIOS

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos

APENDICES

NOTAS SOBRE LOS TEMAS TRATADOS

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax- Notas:

1) 1D, Dirichlet–Dirichlet, Diferencias Finitas

Malla uniforme $x_j = j\Delta x$, $j = 1, \dots, N$, $\Delta x = L/(N + 1)$.

Matriz tridiagonal (Toeplitz)

$$\mathbf{K} = \frac{\alpha}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & & \\ & & \ddots & \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Sus autovalores son conocidos:

$$\lambda_k = \frac{\alpha}{\Delta x^2} 4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2(N + 1)} \right), \quad k = 1, \dots, N.$$

Por lo tanto,

$$\lambda_{\min} = \lambda_1 = \frac{\alpha}{\Delta x^2} 4 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2(N + 1)} \right) \sim \frac{\alpha}{\Delta x^2} \left(\frac{\pi}{N + 1} \right)^2 = \alpha \frac{\pi^2}{L^2}.$$

Conclusión: $\lambda_{\min} \rightarrow \alpha\pi^2/L^2$ al refinar ($\Delta x \rightarrow 0$). No se va a cero $\Rightarrow \|\mathbf{K}^{-1}\|$ queda **acotada**.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax- Notas:

2) 1D con otras condiciones de borde

- **Neumann–Neumann:** hay un modo constante $\Rightarrow \lambda_0 = 0$ (matriz singular).

En el subespacio ortogonal a las constantes (imponiendo, p.ej., media nula o fijando un nodo), el **primer autovalor positivo** cumple

$$\lambda_1 \sim \alpha \frac{\pi^2}{L^2}.$$

En la práctica: unicidad + estabilidad se garantizan tras eliminar el modo nulo.

- **Robin/mixtas:** todos los autovalores son **positivos** y el mínimo también queda acotado inferiormente por una constante independiente de Δx (ligeramente distinta a $\alpha\pi^2/L^2$, depende de los coeficientes de Robin).

3) 2D (resumido) En una malla rectangular uniforme con $\Delta x, \Delta y$ y Dirichlet, el Laplaciano discreto es suma de 1D y

$$\lambda_{pq} = \alpha \left[\frac{4}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{p\pi}{2(N_x + 1)} \right) + \frac{4}{\Delta y^2} \sin^2 \left(\frac{q\pi}{2(N_y + 1)} \right) \right].$$

El mínimo (para $p = q = 1$) verifica

$$\lambda_{\min} \rightarrow \alpha\pi^2 \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} \right),$$

otra vez **independiente** de $\Delta x, \Delta y$.

Mecánica Computacional – Métodos Numéricos y Simulación

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS

Conceptos básicos- Análisis de Error. Teorema de Lax- Notas:

4) Visión general (vale para FD y FEM)

Usando el cociente de Rayleigh:

$$\lambda_{\min} = \min_{\mathbf{v} \neq 0} \frac{\mathbf{v}^\top \mathbf{K} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^\top \mathbf{v}}.$$

Para difusión, $\mathbf{v}^\top \mathbf{K} \mathbf{v} \approx \alpha \|\nabla_h v\|_2^2$.

Con **Poincaré discreto** (Dirichlet): $\|v\|_2 \leq C_P \|\nabla_h v\|_2$, donde $C_P \sim L/\pi$. Entonces

$$\mathbf{v}^\top \mathbf{K} \mathbf{v} \geq \alpha C_P^{-2} \|v\|_2^2 \quad \Rightarrow \quad \lambda_{\min} \geq \alpha C_P^{-2} \sim \alpha \frac{\pi^2}{L^2}.$$

Esto muestra que la **coercividad** del operador (y su constante de Poincaré) dan una **cota inferior uniforme** para λ_{\min} . En FEM, bajo mallas regulares, el mismo argumento vale: K es SPD y la coercividad del funcional elástico/difusivo da $\lambda_{\min} \geq \alpha c > 0$ independiente del tamaño de elemento h .

Consecuencia para Lax Como λ_{\min} **no** tiende a cero al refinar, $\|\mathbf{K}^{-1}\| = 1/\lambda_{\min}$ **permanece acotada**.
Por tanto,

$$\|E_\phi\| \leq \|\mathbf{K}^{-1}\| \|E_{\text{trunc}}\| \leq C \|E_{\text{trunc}}\|,$$

y si $E_{\text{trunc}} = O(\Delta x^2)$, entonces $\|E_\phi\| = O(\Delta x^2)$.

Es exactamente el eslabón “**Estabilidad**” que, junto con **Consistencia**, te da **Convergencia** (Lax).