Laboratorio 1

Pablo Chehade
pablo.chehade@ib.edu.ar
Métodos Numéricos en Fluidos I, Instituto Balseiro, CNEA-UNCuyo, Bariloche, Argentina, 2022

Se estudió el comportamiento de distintas aproximaciones numéricas en un problema de valores de contorno tipo Dirichlet de solución exacta conocida.
Se obtuvo...

- ¿Tengo que mencionar la computadora que usé? ¿En qué sección lo hago?
- ¿Está bien el nombre de la sección ”Método Numérico¿
- ¿Cuánto desarrollo hay que hacer en b y c?
- ¿Es necesario hacer el desarrollo para obtener la solución exacta o se puede dar por sabido?

I. INTRODUCCIÓN

En ciencias físicas no todos los problemas tienen solución analítica Referencia a Chule. Debido a esto, es necesario recurrir a aproximaciones que sí posean solución analítica o a esquemas numéricos que permitan permitan resolver computacionalmente el problema. Sin embargo, estos esquemas no están excentos de error, por lo que es necesario estudiarlos con detalle para poder determinar su validez y aplicabilidad. Para esto es útil aplicar estos esquemas a problemas de solución exacta conocida.

En este trabajo se estudió el comportamiento de distintas aproximaciones numéricas en el siguiente problema de valores de contorno tipo Dirichlet

$$\begin{cases} \frac{d^2y}{dx^2} - y = g(x) = -\sum_{j=1}^{K}(1+(j\pi)^2)\sin(j\pi x), 0 \leq x \leq 1, \\ y(0) = 0, \\ y(1) = 1, \end{cases} \tag{1}$$

con solución analítica

$$y(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e - e^{-1}} + \sum_{j=1}^{K} \sin(j\pi x) \tag{2}$$

La obtención de esta solución se resume en el Anexo **??**.

II. MÉTODO NUMÉRICO

Para resolver numéricamente el problema de valores de contorno es necesario discretizar el dominio y proponer un esquema numérico que permita obtener la solución aproximada. El dominio se discretizó con puntos equiespaciados $x_i = ih$ donde $i = 1, \cdots, N$ y $h = 1/(N+1)$. En base a esto, el problema de valores iniciales **??** se puede escribir como

$$\begin{cases} y_i^{''} - y_i = g_i, i = 1, \cdots, N \\ y_0 = y(0) = 0, \\ y_{N+1} = y(1) = 1, \end{cases} \tag{3}$$

donde $y_i^{''} = \frac{d^2 y_i}{dx^2}$ y $g_i = g(x_i)$.

Para estimar $y_i^{''}$ se pueden utilizar distintos esquemas numéricos. En este trabajo se empleó diferencias finitas centradas y la aproximación de Padé.

A. Diferencias finitas centradas

La fórmula de diferencias centradas finitas de segundo orden para la derivada segunda es ref Moine pag 15

$$y_i^{''} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2). \tag{4}$$

Aplicándola a la ecuación diferencial **??** se obtiene

$$\frac{1}{h^2}y_{i-1} + \left(-\frac{2}{h^2} - 1\right) y_i + \frac{1}{h^2}y_{i-1} = g_i$$

para los nodos internos $i = 2, \cdots, N-2$. Para los nodos del borde se puede emplear la misma aproximación bajo la consideración de que $y_0 = y(0)$ e $y_{N+1} = y(1)$, es decir,

$$\frac{1}{h^2}y_2 + \left(-\frac{2}{h^2} - 1\right) y_1 = g_1 - \frac{1}{h^2}y(0)$$

$$\frac{1}{h^2}y_N + \left(-\frac{2}{h^2} - 1\right) y_{N-1} = g_N - \frac{1}{h^2}y(1)$$

El sistema de ecuaciones algebraicas anterior se puede escribir de la forma $A_{DC}\vec{y} = \vec{b}$, donde

$$A_{DC} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{h^2} - 1 & \frac{1}{h^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} - 1 & \frac{1}{h^2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} - 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{2}{h^2} - 1 & \frac{1}{h^2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} - 1 \end{pmatrix},$$

$$\vec{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_N)$$

y

$$\vec{b} = (g_1 - y(0)/h^2, g_2, \cdots, g_{N-1}, g_N - y(1)/h^2)$$

B. Aproximación de Padé

La fórmula de Padé de 4to orden para la derivada segunda es ref Moine pag 23

$$\frac{1}{12}y''_{i-1} + \frac{10}{12}y''_i + \frac{1}{12}y''_{i+1} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \tag{5}$$

válida sólo para los nodos internos $i = 2, \cdots, N-2$.

Para los nodos del borde con $i = 1$ e $i = N$ es necesario derivar una aproximación de Padé. Para esto basta plantear

$$y''_1 + b_2 y''_2 = a_0 y_0 + a_1 y_1 + a_2 y_2 + O(h^\alpha) \tag{6}$$

y determinar los coeficientes a_0, a_1, a_2 y b_2 de modo de obtener el mayor orden de aproximación α posible. Para esto, se desarrolla en Taylor y''_2, y_0 e y_2 alrededor de x_1. De este modo,

$$y''_2 = y''_1 + hy'''_1 + \frac{h^2}{2}y_1^{(IV)} + O(h^3)$$

$$y_2 = y_1 + hy'_1 + \frac{h^2}{2}y''_1 + \frac{h^3}{6}y'''_1 + \frac{h^4}{24}y_1^{(IV)} + O(h^3)$$

$$y_0 = y_1 - hy'_1 + \frac{h^2}{2}y''_1 - \frac{h^3}{6}y'''_1 + \frac{h^4}{24}y_1^{(IV)} + O(h^3),$$

donde se consideró que a_2 tiene unidades de $1/h^2$. Reemplazando estas expresiones en **??** se obtiene

$$y''_1 = y_1(a_0+a_1+a_2)+y'_1(-a_0h+a_2h)+y''_1(a_0\frac{h^2}{2}+a_2\frac{h^2}{2}-b_2)+y'''_1(-a_0\frac{h^3}{6}+a_2\frac{h^3}{6}-b_2h)+y_1^{(IV)}(a_0\frac{h^4}{24}+a_2\frac{h^4}{24}-b_2\frac{h^2}{2})+O(h^3),$$

que igualando ambos miembros da lugar al siguiente conjunto de ecuaciones para los coeficientes

$$\begin{cases} a_0 + a_1 + a_2 = 0 \\ h(-a_0 + a_2) = 0 \\ a_0\frac{h^2}{2} + a_2\frac{h^2}{2} - b_2 = 1 \\ h(-a_0\frac{h^2}{6} + a_2\frac{h^2}{6} - b_2) = 0 \\ \frac{h^2}{2}(a_0\frac{h^2}{12} + a_2\frac{h^2}{12} - b_2) = 0 \end{cases}$$

Solo es posible cumplir las cuatro primeras ecuaciones mediante la elección $a_0 = 1/h^2$, $a_1 = -2/h^2$, $a_2 = 1/h^2$ y $b_2 = 0$. Al no ser posible anular el término de orden h^2, la aproximación de Padé resultante es de segundo orden. La expresión final es

$$y''_1 = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2} + O(h^2). \tag{7}$$

que coincide con diferencias centradas de orden dos **??**.

Análogamente, se puede repetir el procedimiento para el nodo de borde $i = N-1$. Planteando

$$y''_N + b_{N-1}y''_{N-1} = a_{N-1}y_{N-1} + a_N y_N + a_{N+1}y_{N+1} + O(h^\alpha)$$

y desarrollando en Taylor y''_{N-1}, y_{N-1} e y_{N+1} alrededor de x_N, se obtiene un sistema de ecuaciones para los coeficientes cuales. La aproximación de Padé resultante es de segundo orden y su expresión es

$$y''_N = \frac{y_{N+1} - 2y_N + y_{N-1}}{h^2} + O(h^2), \tag{8}$$

idéntica a la de diferencias centradas de orden dos **??**.

Empleando las fórmulas de diferencia finita de Padé de segundo orden (**??**, **??** y **??**) se puede escribir la relación lineal $A_P\vec{y''} = B_P\vec{y} + \vec{c}$, donde

$$A_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$B_P = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \tag{10}$$

ambas matrices tridiagonales. Mientras que

$$\vec{y''} = (y''_1, y''_2, \cdots, y''_N),$$

$$\vec{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_N)$$

y

$$\vec{c} = (y(0)/h^2, 0, \cdots, 0, y(1)/h^2)$$

Aplicando esta relación lineal a la ecuación diferencial **??** se obtiene

$$(B_P - A_P)\vec{y} = A_P\vec{g} - \vec{c}$$

donde $\vec{g} = (g_1, g_2, \cdots, g_N)$.

Habiendo desarrollado ambos métodos y habiéndolos aplicado a la ecuación diferencial, se está en condiciones de resolver el problema y comparar con la solución exacta.

III. RESULTADOS

En primer lugar, se observó cualitativamente el comportamiento de los esquemas numéricos para

-

IV. CONCLUSIÓN

-

V. ANEXO

A. Solución exacta del problema de valores de contorno

- La solución general se puede expresar como una solución de la ec homogéna
- ec. homogénea
- y una solución particular
- Obtención de la solución homogénea (brevemente, sin hacer muchas cuentas)
- Obtención de la solución particular
- Obtención de las ctes C1 y C2
- Solución gral