

Laboratorio 1 - Diferencias finitas

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 empleó el método de diferencias finitas centradas de orden 2 y la aproximación de Padé de orden 4. En primer lugar, se analizó cualitativamente ambas aproximaciones para K y N fijos. Se observó que la aproximación de Padé es más precisa que la de diferencias centradas. En segundo lugar, se estudió la dependencia del error en un punto particular en función del espaciamiento h . En ambos métodos, el error disminuye a medida que h también lo hace, con distinto ritmo para cada aproximación. Finalmente, se estudió la capacidad de ambos métodos para adaptarse a soluciones oscilatorias. En concreto, se calculó cuántos puntos discretos N_{\min} son necesarios para obtener un error total menor a una tolerancia determinada en función de las oscilaciones de la solución exacta. Se obtuvo que en la aproximación de Padé se necesitan menos puntos que en la de diferencias centradas para obtener el mismo error total, independientemente de la frecuencia de las oscilaciones y de la norma elegida para calcular el error.

I. INTRODUCCIÓN

En ciencias físicas no todos los problemas tienen solución analítica [1]. Debido a esto, es necesario recurrir a aproximaciones del mismo que sí posean solución o a esquemas numéricos que permitan aproximarlos computacionalmente. Sin embargo, estos esquemas no están exentos de error, por lo que deben ser estudiados en detalle para 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

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

con solución analítica

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

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 $i = 1, \dots, N$ y $h = 1/(N+1)$. En base a esto, el problema de valores iniciales 1 se puede escribir como

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

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 emplearon diferencias finitas centradas y la aproximación de Padé.

A. Diferencias finitas centradas

La fórmula de diferencias finitas centradas de segundo orden para la derivada segunda es [2]

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

Aplicándola a la ecuación diferencial 3 para los nodos internos $i = 2, \dots, N-2$, 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 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 lineal $A_{DC} \vec{y} = \vec{b}$, donde

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

$$\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T \text{ y}$$

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

B. Aproximación de Padé

La fórmula de Padé de 4to orden para la derivada segunda es [2]

$$\frac{1}{12}y''_{i-1} + \frac{10}{12}y''_i + \frac{1}{12}y''_{i+1} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^4) \quad (5)$$

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

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

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

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,

$$\begin{aligned} y''_2 &= y''_1 + h y'''_1 + \frac{h^2}{2} y^{(IV)}_1 + O(h^3), \\ y_2 &= y_1 + h y'_1 + \frac{h^2}{2} y''_1 + \frac{h^3}{6} y'''_1 + \frac{h^4}{24} y^{(IV)}_1 + O(h^3), \\ y_0 &= y_1 - h y'_1 + \frac{h^2}{2} y''_1 - \frac{h^3}{6} y'''_1 + \frac{h^4}{24} y^{(IV)}_1 + O(h^3), \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} y''_1 &= y_1(a_0 + a_1 + a_2) + y'_1(-a_0 h + a_2 h) \\ &+ y''_1(a_0 \frac{h^2}{2} + a_2 \frac{h^2}{2} - b_2) + y'''_1(-a_0 \frac{h^3}{6} + a_2 \frac{h^3}{6} - b_2 h) \\ &+ y^{(IV)}_1(a_0 \frac{h^4}{24} + a_2 \frac{h^4}{24} - b_2 \frac{h^2}{2}) + O(h^3). \end{aligned}$$

Igualando ambos miembros da lugar al siguiente conjunto de ecuaciones para los coeficientes a_0, a_1, a_2 y b_2

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

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

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

que coincide con diferencias centradas de orden dos 4.

Análogamente, se puede repetir el procedimiento para el nodo de borde $i = N$. 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. La aproximación de Padé resultante es de segundo orden y su expresión es

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

idéntica a la de diferencias centradas de orden dos 4.

Empleando las fórmulas de diferencia finita de Padé de segundo orden (7, 8 y 5) se puede escribir la relación lineal $A_P \vec{y}'' = B_P \vec{y} + \vec{c}$, donde

$$A_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{12} & \frac{10}{12} & \frac{1}{12} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$B_P = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

ambas matrices tridiagonales. Mientras que $\vec{y}'' = (y''_1, y''_2, \dots, y''_N)^T$, $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$ y $\vec{c} = (y(0)/h^2, 0, \dots, 0, y(1)/h^2)^T$

Aplicando esta relación lineal a la ecuación diferencial 3 se obtiene el sistema lineal

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

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

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

Se analizaron cualitativamente ambas aproximaciones para $K = 6$ y $N = 23$ fijos. En la figura 1 se grafica la solución exacta junto a las soluciones aproximadas en puntos discretos obtenidas mediante ambos métodos. A grandes rasgos se observa que si bien ambos logran

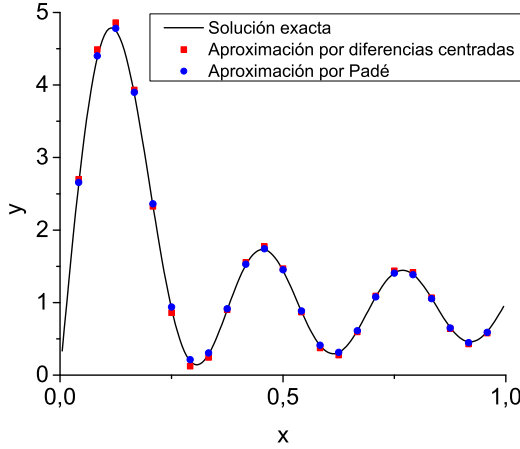


Figura 1: Solución exacta y soluciones aproximadas en puntos discretos por los métodos de diferencias finitas centradas y aproximación de Padé para $K = 6$ y $N = 23$.

aproximar la solución, el método de diferencias centradas tiene mayor error que la aproximación de Padé, especialmente en los puntos máximos y mínimos de la oscilación. Para analizar cuantitativamente la diferencia se calculó el error local en el punto central $x = 0,5$ en función del espaciamiento h . Esta dependencia se grafica en la figura 2 en escala log-log. Se observa una dependencia similar para ambos métodos. Inicialmente, para h grande, el error presenta un comportamiento aleatorio. A medida que h disminuye, el error varía como una potencia de h , es decir, de forma lineal en escala logarítmica. Por último, para valores de h menores, el error aumenta debido a los errores de precisión de la computadora. En base a la dependencia observada en la zona intermedia se ajustó una recta en escala log-log, es decir, la función $\log(\text{error}) = a \log(h) + b$ con a pendiente y b ordenada al origen. De este modo a representa el orden del error de truncamiento. Para diferencias finitas centradas se obtuvo un orden $a_{DC} = 1,995 \pm 0,004$. Esto es consistente con el orden de aproximación de orden 2 del método numérico, tal como se observa en 4. Por otro lado, para la aproximación de Padé se obtuvo un orden $a_P = 4,47 \pm 0,07$. Como en los nodos del borde el orden de aproximación es 2 y en los nodos internos el orden es 4, se hubiera esperado que el orden de aproximación en el punto central se encuentre entre 2 y 4. Este no es el caso y habría que estudiar con mayor detalle a qué se debe este comportamiento.

Por último, se analizó la capacidad de cada método para adaptarse a soluciones oscilatorias. Las oscilaciones están caracterizadas en este problema mediante el parámetro K . A mayor K , la solución exacta contiene componentes con mayor frecuencia, tal como se verifica en la ecuación 2. De este modo, se determinó para ambos métodos el número de puntos mínimos N_{\min} necesarios

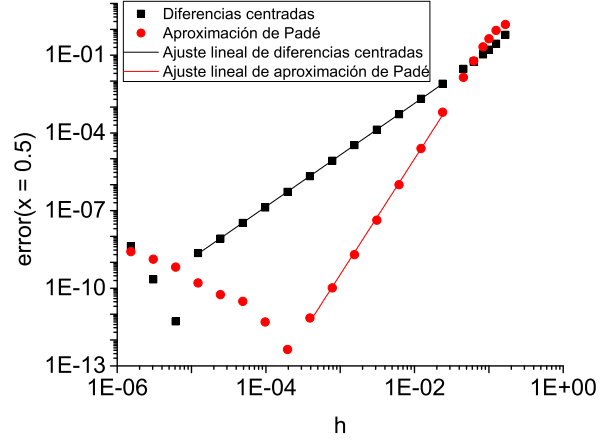


Figura 2: Error local en el punto $x = 0,5$ en función del espaciamiento h para diferencias finitas centradas y aproximación de Padé en escala log-log. Se ajustó en ambos casos una dependencia lineal $a \log(h) + b$. En el caso de diferencias finitas se obtuvo una pendiente $a_{DC} = 1,995 \pm 0,004$ y una ordenada al origen $b_{DC} = 1,13 \pm 0,02$. Mientras que en la aproximación de Padé, $a_P = 4,47 \pm 0,07$ y $b_P = 3,9 \pm 0,2$.

KnN_{\min}	DC	Padé	DC	Padé
	norma 2	norma 2	norma ∞	norma ∞
3	14	10	10	8
8	66	32	39	26
16	202	81	107	59
32	626	204	295	136
64	1962	514	826	314
128	6188	1294	2322	724

Cuadro I: Número de puntos mínimos necesarios para obtener un error menor a 0,1 en norma 2 y norma infinito en función de la frecuencia K para el método de diferencias centradas (DC) y la aproximación de Padé.

para obtener un error total menor a 0,1 en función del parámetro K . El error fue calculado en norma 2 y norma infinito. Los resultados se resumen en la tabla I y se grafican en escala log-log en la figura 3. Como se observa N_{\min} crece con K , es decir, frente a oscilaciones de mayor frecuencia son necesarios más puntos para mantener el mismo error. Sin embargo, independientemente de la norma, se necesitan más puntos en diferencias centradas que en la aproximación de Padé. Esto se debe a que esta última aproximación es de mayor orden que el método de diferencias centradas. Además, en ambos casos se necesitan menos puntos cuando el error se calcula en norma infinito que en norma 2. Esto se debe a que en esta última se suman cuadráticamente los errores en todos los puntos, mientras que en norma infinito solo se considera

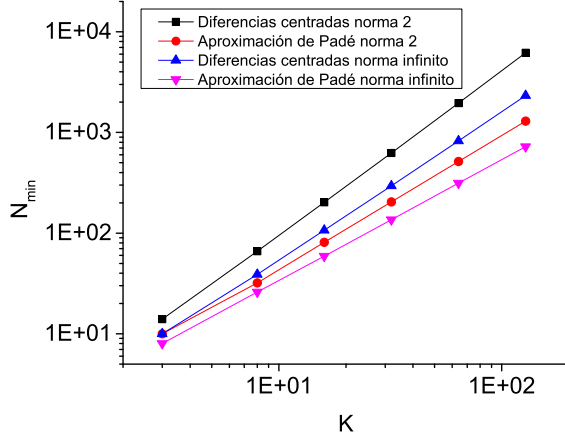


Figura 3: Número de puntos mínimos N_{\min} necesarios para obtener un error menor a 0,1 en función de la frecuencia K para diferencias finitas centradas y aproximación de Padé en escala log-log. El error fue calculado en norma 2 y norma infinito.

el máximo de los errores en todos los puntos. En base a esto, a igual N_{\min} se obtendría menor error en norma infinito que en norma 2. Análogamente, a igual error, se necesitarían más puntos en norma 2 que en norma infinito.

IV. CONCLUSIÓN

Se estudió el comportamiento de distintas aproximaciones numéricas en el siguiente problema de valores de

contorno tipo Dirichlet con solución exacta conocida

$$\begin{cases} \frac{d^2 y}{dx^2} - y = g(x), \\ g(x) = -\sum_{j=1}^K (1 + (j\pi)^2) \sin(j\pi x), 0 \leq x \leq 1, \\ y(0) = 0, \\ y(1) = 1, \end{cases} \quad (11)$$

Para los nodos internos se emplearon el método de diferencias finitas centradas de orden 2 y la aproximación de Padé de orden 4. Mientras que en los nodos del borde se emplearon diferencias finitas centradas.

En primer lugar, se analizó cualitativamente ambas aproximaciones para $K = 6$ y $N = 23$ fijos. Se observó que la aproximación de Padé es más precisa que la de diferencias centradas. En segundo lugar, con el objetivo de fundamentar cuantitativamente la afirmación anterior, se estudió la dependencia del error en el punto central en función del espaciamiento h . Para diferencias centradas el error disminuye con orden $1,995 \pm 0,004$, mientras que para la aproximación de Padé, con orden $4,47 \pm 0,07$. Finalmente, se estudió la capacidad de ambos métodos para adaptarse a las oscilaciones, representadas en este problema por el parámetro K en la ecuación diferencial. Con tal fin, se calculó cuántos puntos discretos N_{\min} son necesarios para obtener un error total menor a 0,1 en función de K . El error se calculó en norma 2 y norma infinito. Se obtuvo que en la aproximación de Padé se necesitan menos puntos que en la de diferencias centradas para obtener el mismo error total, independientemente de la frecuencia de las oscilaciones y de la norma utilizada.

-
- [1] G. Abramson, *Física computacional: notas de clase* (Guillermo Abramson, San Carlos de Bariloche, 2021) pp. 1–2,.
[2] P. Moin, *Fundamentals of Engineering Numerical Analysis*

(Cambridge University Press, 32 Avaneue of the Americas, New York, 2010) pp. 15,23.