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? NO. Nosotros no lo tenemos que poner. En los papers para cálculos grandes se suele poner.
- ¿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? Puedo poner directamente la solución exacta.

I. INTRODUCCIÓN

En ciencias físicas no todos los problemas tienen solución analítica Referencia a Chule. Debido a esto, es necesario recurrir a aproximaciones del mismo que sí posean solución analítica o a esquemas numéricos que permitan aproximarlo computacionalmente. Sin embargo, estos esquemas no están excentos de error, por lo que es necesario estudiarlos con 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

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

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