# 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.

En primer lugar, se analizó cualitativamente ambas aproximaciones para $K$ y $N$ fijos. En segundo lugar, se estudió la dependencia del error local en un punto particular en función del espaciamiento $h$. Finalmente, se estudió cuántos puntos discretos $N$ son necesarios para obtener un determinado error global en función de las oscilaciones de la solución representadas por el parámetro $K$.

- ¿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 [? ]. Debido a esto, es necesario recurrir a aproximaciones del mismo que sí posean solución o a esquemas numéricos que permitan aproximarlo 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

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

con solución analítica

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

## 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 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 [? ]

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

Aplicándola a la ecuación diferencial **??** para los nodos internos $i = 2, \cdots, N-2$, 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 $A_{DC}\vec{y} = \vec{b}$, 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 [? ]

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

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

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 $\alpha$ posible. Para esto se desarrolla en Taylor $y''_2$, $y_0$ e $y_2$ alrededor de $x_1$. De este modo,

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

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

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

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

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

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

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

que coincide con diferencias centradas de orden dos ??.

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 ??.

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

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

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

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

Borrar: En primer lugar, se analizó cualitativamente ambas aproximaciones para $K$ y $N$ fijos. En segundo lugar, se estudió la dependencia del error local en un punto particular en función del espaciamiento $h$. Finalmente, se estudió cuántos puntos discretos $N$ son necesarios para obtener un determinado error global en función de las oscilaciones de la solución representadas por el parámetro $K$.

Se analizaron cualitativamente ambas aproximaciones para $K$ y $N$ fijos. En la figura **??** se grafica la solución exacta junto a las soluciones aproximadas en puntos discretos por ambos métodos. ¿Qué se boserva?

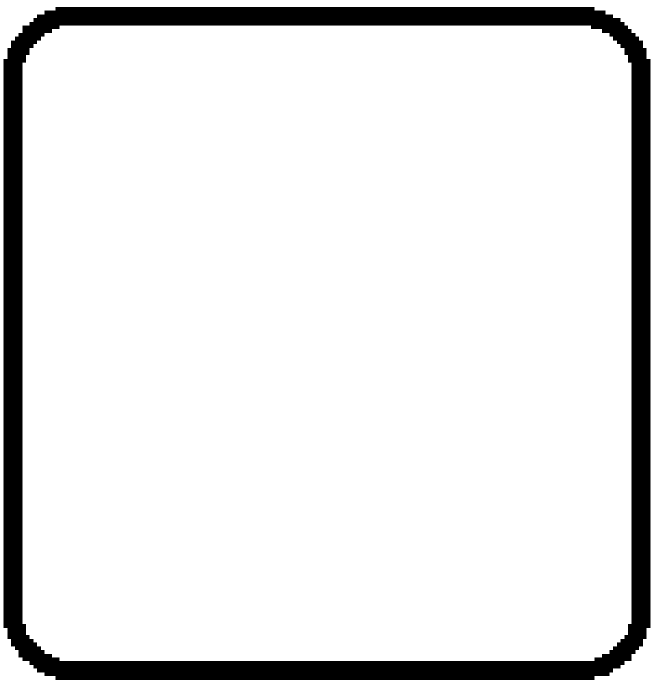

Figura 1: Solución exacta y soluciones aproximadas en puntos discretos por los métodos de diferencias finitas centradas y aproximación de Padé para $K = 6$ y $N = 23$.

Además, se calculó el error local en el punto central $x = 0{,}5$ en función del espaciamiento $h$ para ambos métodos numéricos. Esta dependencia se grafica en la figura **??** en escala log-log.

- Discutir la dependencia en cada zona: para h grande el error es grande. A medida que h disminuye se encuentra un comportamiento polinómico. Luego de este régimen intermedio el error vuelve a aumentar como consecuencia del error de precisión de la computadora.
- En base a la dependecia observada en la zona intermedia se ajustó una función del tipo $x^\beta$ para ambas, donde $\beta$ sería el orden del error de truncamiento en ese punto
- Se obtuvo para el método de diferencias finitas centradas $\beta = 2$ y para el método de Padé $\beta = 4$.
- Es consistente que el método de Padé tenga mayor orden que el de diferencias centradas debido a que el error local en los puntos intermedios es mayor, como se verifica al comparar **??** y **??**.
- Sin embargo, como el orden de aproximación en los bordes en ambos casos es 2, se esperaría que en Padé el orden local esté entre 2 y 4. Habría que estudiar esto con mayor detalle.

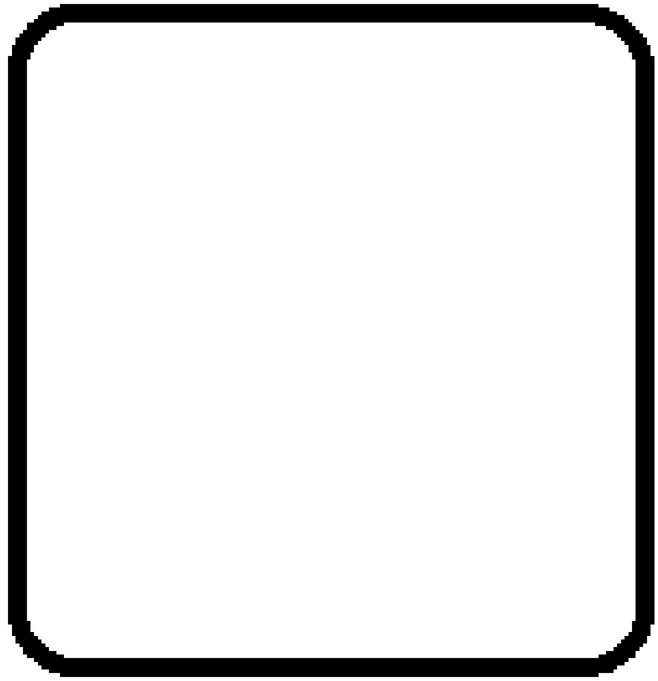

Figura 2: Error local en el punto $x = 0{,}5$ en función del espaciamiento $h$ para diferencias finitas centradas y aproximación de Padé en escala log-log. Se ajustó en ambos casos una dependencia $x^\beta$ correspondiente a una línea de pendiente $\beta$ en escala log-log. En el caso de diferencias finitas se obtuvo una pendiente $\beta_{DF} =$ cuánto?. Mientras que en la aproximación de Padé, $\beta_P =$ cuánto?

- Se determinó el nro de puntos mínimos necesarios para obtener un error menor a 10e-1 en distintas normas en función de la frecuencia K
- **??**
- Se obtuvo que a mayor $K$, es decir, oscilaciones de mayor frecuencia en la solución exacta, más puntos se necesitan para disminuir el error global.
- test

## IV. CONCLUSIÓN

- test

Figura 3: N tal que el error es menor a $10e - 1$ en función de K apra distintas normas.