

Un esquema alternativo para diferencias finitas generalizadas.

An alternative scheme for generalized finite differences.

A. Gaona-Arias¹, F. J. Domínguez-Mota^{*1}, G. Sánchez-Yépez¹, J. G. Tinoco-Ruiz^{1,2}, M. L. Ruiz-Zavala¹

Resumen En este trabajo se presenta un esquema para diferencias finitas sobre mallas estructuradas, que fue diseñado en base a la analogía entre las condiciones sobre los coeficientes del esquema requeridos por la condición de consistencia y la definición del conjunto factible geométrico en programación lineal; se compara su desempeño contra un esquema de tipo heurístico estudiado en la literatura, y, finalmente, se muestra que puede producir aproximaciones numéricas de segundo orden en regiones muy irregulares en una forma muy sencilla.

Abstract In this paper a scheme for finite differences over structured grids, which was designed based on the analogy between the conditions required for consistency over the coefficients of the scheme and the definition of a geometric feasible set at linear programming, is presented; its performance is compared against that of an heuristic scheme studied in the literature and, finally, it is shown that a second order numerical approximations in irregular regions is produced in an easy way.

Palabras Clave

Diferencias Finitas Generalizadas — Programación Lineal — Mallas irregulares — Mallas estructuradas — Ecuaciones Elípticas

¹Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, México, agaona@fismat.umich.mx, dmota@umich.mx, gsanchez@fismat.umich.mx, jtinoco@umich.mx, mlruiz@fismat.umich.mx.

²Universidad Abierta y a Distancia de México, Ciudad de México, México, jose.tinoco@unadm.mx

*Autor para Correspondencia

1. Diferencias finitas

1.1 Regiones regulares

El método de las diferencias finitas ha sido ampliamente utilizado durante mucho tiempo en diversas aplicaciones debido a su sencillez conceptual y, de hecho, sigue siendo la alternativa más usada en la investigación y en la industria. Sin embargo, la mayor parte de las implementaciones de los esquemas clásicos se han desarrollado para regiones rectangulares o rectangulares por bloques, lo que limita su uso en problemas físicos donde la geometría del dominio es irregular.

Las diferencias finitas se pueden obtener formalmente del desarrollo en serie de Taylor. Un ejemplo clásico y muy utilizado es la aproximación de primer orden de la función dada por

$$u(x+h) = u(x) + u'(x)h + \mathcal{O}(h^2) \quad (1)$$

de donde obtenemos que la aproximación a la primera derivada es

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h}, \quad (2)$$

donde h es el tamaño de paso de la malla; esto es, la distancia

entre dos nodos consecutivos de la misma.

Expresiones similares pueden obtenerse para el caso rectangular 2D; por ejemplo, para Δu tenemos

$$(\Delta u)_{ij} = \frac{u_{i,j+1} + u_{i,j-1} + u_{i-1,j} + u_{i+1,j} - 4u_{i,j}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (3)$$

con h nuevamente el tamaño de paso y $u_{i,j}$ el valor aproximado de u en el nodo i, j de la malla.

Al discretizar dicho operador sobre todo el dominio se obtiene una matriz de coeficientes K dada por

$$K = \begin{pmatrix} T & -I & \dots & 0 \\ -I & T & -I & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & 0\dots & -I & T \end{pmatrix},$$

donde

$$T = \begin{pmatrix} 4 & -1 & \dots & 0 \\ -1 & 4 & -1 & \dots & 0 \\ \dots & & & & \\ 0 & 0\dots & -1 & 4 \end{pmatrix};$$

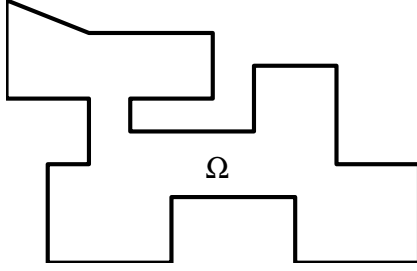


Figura 1. Conjunto conexo Ω

K es una matriz definida positiva con eigenvalores conocidos y, en función de estos últimos, es posible escribir cotas útiles para la norma de la inversa, lo cual permite probar la convergencia del método. En la siguiente sección se muestra como extender estas expresiones a mallas lógicamente rectangulares para el caso de regiones no regulares a fin de poder emplear diferencias finitas en las mismas.

1.2 Regiones irregulares

En mallas para regiones irregulares, cuando los coeficientes del esquema en diferencias se seleccionan de tal forma que se satisface la condición de consistencia, el método de diferencias finitas es una opción intuitiva y eficiente para resolver numéricamente ecuaciones elípticas con condiciones de Dirichlet y Neumann a la frontera. Para mostrar cómo obtener dichos coeficientes, consideremos el problema de aproximar el operador lineal de segundo orden

$$Lu = Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu, \quad (4)$$

donde A, B, C, D, E y F son funciones continuas en un dominio simplemente conexo Ω , un dominio cuya frontera es aproximada por una poligonal, como se muestra en la Figura 1.

Una vez generada una malla para Ω [10], se puede obtener un esquema de diferencias finitas en regiones irregulares considerando un conjunto finito de nodos p_0, p_1, \dots, p_q de la malla para los cuales necesitamos encontrar coeficientes $\Gamma_0, \Gamma_1, \dots, \Gamma_q$, de modo que se satisfaga

$$\sum_{i=0}^q \Gamma_i u(p_i) \approx [Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu]_{p_0} \quad (5)$$

La condición de consistencia requiere que cuando $p_i \rightarrow p_0$ se cumpla

$$\sum_{i=0}^q \Gamma_i u(p_i) - [Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu]_{p_0} \rightarrow 0. \quad (6)$$

Esta diferencia se puede expandir en serie de Taylor hasta segundo orden la cual, usando 8 puntos alrededor de p_0 de la

siguiente forma¹

$$\begin{aligned} [Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu]_{p_0} - \sum_{i=0}^8 \Gamma_i u(p_i) \\ = \\ (F(p_0) - \sum_{i=0}^8 \Gamma_i) u(p_0) + \\ (D(p_0) - \sum_{i=1}^8 \Gamma_i \Delta x_i) u_x(p_0) + \\ (E(p_0) - \sum_{i=1}^8 \Gamma_i \Delta y_i) u_y(p_0) + \\ (A(p_0) - \sum_{i=1}^8 \frac{\Gamma_i (\Delta x_i)^2}{2}) u_{xx}(p_0) + \\ (B(p_0) - \sum_{i=1}^8 \Gamma_i \Delta x_i \Delta y_i) u_{xy}(p_0) + \\ (C(p_0) - \sum_{i=1}^8 \frac{\Gamma_i (\Delta y_i)^2}{2}) u_{yy}(p_0) + \\ \mathcal{O}(\max\{\Delta x_i, \Delta y_i\})^3 \end{aligned}$$

La expresión anterior muestra que satisfacer la condición de consistencia define de manera natural el siguiente sistema de ecuaciones para los coeficientes Γ_i

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & \Delta x_1 & \dots & \Delta x_8 \\ 0 & \Delta y_1 & \dots & \Delta y_8 \\ 0 & (\Delta x_1)^2 & \dots & (\Delta x_8)^2 \\ 0 & \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_8 \Delta y_8 \\ 0 & (\Delta y_1)^2 & \dots & (\Delta y_8)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \Gamma_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(p_0) \\ D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2A(p_0) \\ B(p_0) \\ 2C(p_0) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Observemos que en el sistema (7) hay 6 ecuaciones y 9 incógnitas, lo que nos da suficientes grados de libertad para calcular los coeficientes Γ_i . Dada su estructura, es conveniente considerar el sistema de las últimas 5 ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 & \dots & \Delta x_8 \\ \Delta y_1 & \dots & \Delta y_8 \\ (\Delta x_1)^2 & \dots & (\Delta x_8)^2 \\ \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_8 \Delta y_8 \\ (\Delta y_1)^2 & \dots & (\Delta y_8)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \Gamma_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2A(p_0) \\ B(p_0) \\ 2C(p_0) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

pues la primera ecuación indica que Γ_0 es simplemente

$$\Gamma_0 = F(p_0) - \sum_{i=1}^8 \Gamma_i. \quad (9)$$

El sistema (8) tampoco es de rango completo por lo que puede resolverse de varias formas [2]-[9]; particularmente en

¹Estos 8 puntos son los vecinos de p_0 en una submalla estructurada de 3×3 , como la mostrada en la Figura 2.

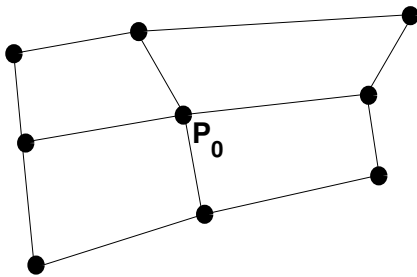


Figura 2. Estencil de 8 puntos

[8] se presentó una implementación de tipo heurístico que, aunque en algunos casos disminuye ligeramente el orden de la aproximación, funciona de manera eficiente y robusta en regiones con geometrías muy irregulares. En este trabajo, se aprovecha la similitud del sistema de ecuaciones (8) con la definición geométrica de un conjunto factible en un problema de programación lineal; para el cual, como en el caso de una fase I del método simplex [1, 11], debemos proponer una función objetivo auxiliar.

Observemos que debemos contar con suficientes grados de libertad para elegir los coeficientes Γ_i , ya que carecemos de la simetría local que tenemos en el caso rectangular; no obstante, el problema es factible si incluimos un número adecuado de nodos en la aproximación.

2. Resultados y Discusión

Para probar el desempeño del método propuesto se realizó la comparación contra el método heurístico implementado en [8]. Ambos se aplicaron a una malla lógicamente rectangular, que representa la bahía de la Habana con 41 puntos por lado, la cual se muestra en la Figura 3; fue generada utilizando el software UNAMalla [10], minimizando el funcional de área adaptiva-longitud. Una vez generada la malla, los coeficientes se calcularon localmente en un estencil definido en una submatriz de 3×3 , para cada nodo interior (ver Figura 2).

Es muy importante observar que, dado que tiene varios grados de libertad, el sistema (8) define un conjunto factible no acotado, por lo que es necesario proponer cotas superiores e inferiores para los coeficientes Γ_i ; dada la simetría de la suma en la expresión (5), en las pruebas se utilizó la función objetivo

$$\sum_{i=0}^8 \Gamma_i \quad (10)$$

con la cota

$$\frac{Factor}{(\min(|dx|, |dy|))^2},$$

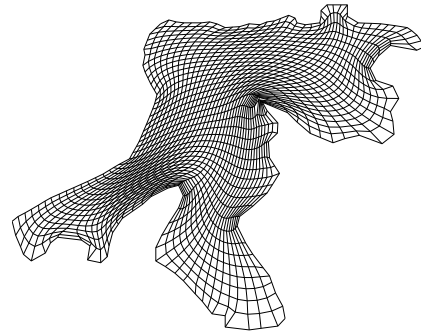


Figura 3. Malla lógicamente rectangular, de 41 puntos por lado, de la bahía de la Habana

donde dx , dy son los tamaños de paso en las direcciones de x , y ; y *Factor* es un número que se ajustó en las diferentes pruebas para aumentar el diámetro del conjunto factible.

En las mallas generadas se calculó la aproximación a la solución de la ecuación de Poisson tomando la función fuente como la expresión

$$f(x, y) = 10e^{2(x+y)},$$

de tal forma que la condición de Dirichlet en la frontera esta dada por

$$g(x, y) = 2e^{2(x+y)}.$$

Las pruebas se realizaron en una computadora portátil Pro-Book HP con procesador i5, con 4 GB de RAM y un sistema operativo Windows 7 de 64 bits; utilizando MATLAB©2012a.

Calculamos el error local de truncamiento (6) para comparar los resultados obtenidos con el método propuesto, empleando la fase I de programación lineal, contra el método heurístico, el cual se implementó empleando pseudoinversa de Moore-Penrose; la comparación se muestra gráficamente en el Cuadro 1; para diferentes valores de *Factor*, se presentan los logaritmos de los errores cuadráticos contra el número de nodo interior de la malla.

En los resultados se puede observar que, independientemente del valor *Factor* dado, el error local de truncamiento tiene un comportamiento similar en orden al del método heurístico, y, a pesar de ser una aproximación de menor orden en algunos casos, en el 99,78 % de los nodos interiores, el cálculo de los coeficientes se hizo en menos de 6 iteraciones. Esto muestra que el algoritmo propuesto es una alternativa computacionalmente muy económica al método heurístico.

Agradecimientos

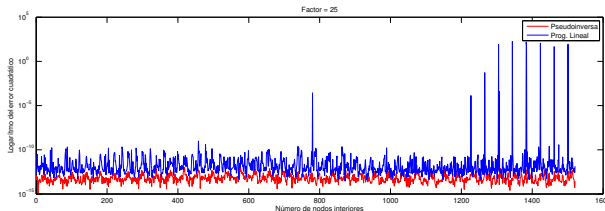
Los autores desean agradecer a la Coordinación de Investigación Científica de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (CIC-UMSNH) por su apoyo a través del proyecto CIC 9.16, así como al Instituto de Cibernética, Matemáticas y Física (ICIMAF) por su atinada combinación

entre la ciencia y la calidez del pueblo cubano; también al Dr. Humberto Madrid por sus siempre atinados comentarios.

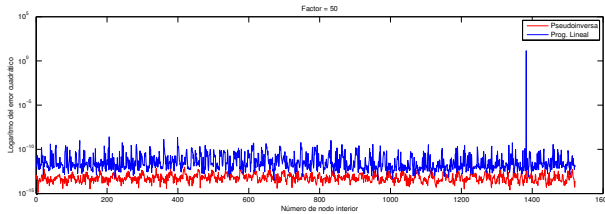
Referencias

- [1] Mokhtar S. Bazaraa, John J. Jarvis, and Hanif D. Sherali. *Linear Programming and Networks Flows*. Wiley, 2010.
- [2] F. Domínguez-M., P. Fernández-Valdez, S. Mendoza-Armenta, J. Tinoco-R., and G. Tinoco-G. Numerical solution of differential equations in irregular plane regions using quality structured convex grids. *Int. J. of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, 4, 2013.
- [3] F. Domínguez-M., F. Guillén-Reyes, E. Ruiz-Díaz, J. Tinoco-R., G. Tinoco-G., and A. Valencia-Ramírez. An application of generalized differences to unsteady heat problems subject to mixed boundary conditions. *PANACM 2015 - 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics, in conjunction with the 11th Argentine Congress on Computational Mechanics, MECOM 2015*, pages 1077–1082, 2015.
- [4] F. Domínguez-M., S. Mendoza-Armenta, J. Tinoco-R., and G. Tinoco-G. Finite difference schemes satisfying an optimality condition for the unsteady heat equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 106:76–83, 2014.
- [5] F. Domínguez-M., E. Ruiz-Díaz, J. Tinoco-R., G. Tinoco-G., and A. Valencia. Generalized finite differences on structured convex grids for irregular planar domains. *11th World Congress on Computational Mechanics, WCCM 2014, 5th European Conference on Computational Mechanics, ECCM 2014 and 6th European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECFD 2014*, pages 5547–5558, 2014.
- [6] F. Domínguez-M., J. Tinoco-R., and S. Mendoza. Finite difference schemes satisfying an optimality condition. *MASCOT10*, 2011.
- [7] F. Domínguez-M., J. Tinoco-R., G. Tinoco-G., P. Michel-F., and E. Ruiz-D. A modified lax-wendroff scheme for irregular 2D space regions. *MASCOT12 Proceedings*, 2012.
- [8] F. J. Domínguez-Mota, P. M. Fernández-Valdez, E. Ruiz-Díaz, J. G. Tinoco-Guerrero, and J. G. Tinoco-Ruiz. An heuristic finite difference scheme on irregular plane regions. *Applied Mathematical Sciences*, 8:671–683, 2014.
- [9] G. Tinoco-Guerrero, F. J. Domínguez-Mota, J. G. Tinoco-Ruiz, and E. Ruiz-Díaz. An implicit modified lax-wendroff scheme for irregular 2D space regions. *MASCOT13 Proceedings*, 2013.

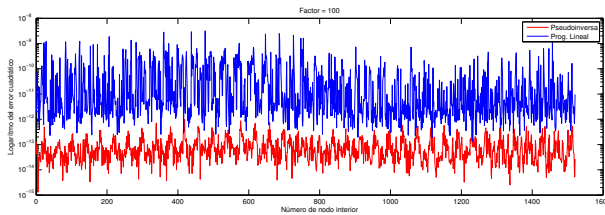
(a)



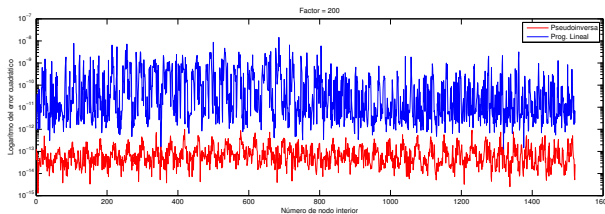
(b)



(c)



(d)



Cuadro 1. Tablas logarítmicas de los errores contenidos, con referencia a los diferentes Factores. (a)Factor = 25, (b)Factor = 50, (c)Factor = 100, (d)Factor = 200

- [10] UNAMalla. An automatic package for numerical grid generation, 2015.
- [11] Robert J. Vandervei. *Linear Programming: Foundations and Extentions*. Princeton University, 2001.